

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS

MEMORIAL ACADÊMICO

**Apresentado à Comissão Especial designada para a avaliação do pedido de promoção a Classe E (Professor Titular), do Plano de Carreira do Magistério Superior da Universidade Federal de Pelotas.**

Alexandre Diehl

SIAPE: 1279462

INSTITUTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA

Pelotas, 30 de Outubro de 2014

# Sumário

<b>1</b>	<b>Apresentação, estrutura do memorial e justificativa</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Formação, aperfeiçoamento e atualização</b>	<b>2</b>
2.1	Graduação . . . . .	2
2.2	Mestrado . . . . .	3
2.3	Doutorado . . . . .	4
2.4	Estágio pós-doutoral . . . . .	5
2.4.1	Bolsa de recém-doutor . . . . .	6
2.4.2	Pós-doutorado no exterior . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Atividades de Ensino, formação de recursos humanos e Extensão</b>	<b>8</b>
3.1	Atividades de Ensino . . . . .	8
3.2	Formação de recursos humanos . . . . .	9
3.2.1	Orientação de estudantes de Graduação . . . . .	9
3.2.2	Orientação de estudantes de Mestrado . . . . .	9
3.2.3	Orientação de estudantes de Doutorado . . . . .	14
3.2.4	Supervisão de Pós-Doutorado . . . . .	18
3.3	Organização de Eventos . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Atividades de gestão acadêmica</b>	<b>19</b>
4.1	Chefia do Departamento de Física: 2010-2011 . . . . .	19
4.2	Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física: 2008-2015 . . . . .	19
4.3	Membro do Colegiado do Curso de Mestrado em Física: 2007-atual . . . . .	20
4.4	Membro do Colegiado do Curso de Licenciatura em Física: 2014-2015 . . . . .	20
4.5	Membro do Conselho Departamental do IFM: 2007-atual . . . . .	20
<b>5</b>	<b>Participação em bancas de trabalhos de conclusão e comissões julgadoras</b>	<b>20</b>
5.1	Bancas de Mestrado . . . . .	20
5.2	Bancas de Doutorado . . . . .	21
5.3	Bancas de Concursos Públicos . . . . .	22

<b>6</b>	<b>Atividades técnico-científicas</b>	<b>22</b>
6.1	Coordenação de projetos de pesquisa com financiamento . . . . .	22
6.2	Participação em congressos, simpósios, seminários e outros eventos similares .	24
6.3	Produção intelectual . . . . .	25
6.3.1	Período entre 1990 e 1997 . . . . .	25
6.3.2	Período entre 1998 e 2000 . . . . .	26
6.3.3	Período entre 2001 e 2002 . . . . .	27
6.3.4	Período entre 2003 e 2006 . . . . .	28
6.3.5	Período entre 2007 e 2010 . . . . .	30
6.3.6	Período entre 2011 e 2014 . . . . .	34
6.4	Impacto da produção intelectual . . . . .	36
<b>7</b>	<b>Plano de Trabalho</b>	<b>38</b>
7.1	Teoria e simulação de fluidos complexos em equilíbrio . . . . .	39
7.1.1	Equilíbrio de fase de um gás de Coulomb . . . . .	40
7.1.2	Sistemas com assimetria de carga: colóides . . . . .	41
7.1.3	Modelagem da associação DNA-surfactante . . . . .	42
7.1.4	Fases líquidas e criticalidade em modelos esfericamente simétricos tipo água . . . . .	43
7.2	Dinâmica de fluidos complexos sob condições de confinamento . . . . .	44
7.2.1	Dinâmica de eletrólitos em meios porosos . . . . .	44
	<b>Referências</b>	<b>45</b>

# 1 Apresentação, estrutura do memorial e justificativa

Meu nome é Alexandre Diehl, 49 anos, casado com Carmem Regina Pereira da Silva Diehl e pai de 2 filhos, Bruno Pereira Diehl (20 anos) e Carolina Pereira Diehl (9 anos). Nasci em 12 de Dezembro de 1964, na cidade de São Leopoldo, Rio Grande do Sul. Fiz toda minha formação escolar básica em escolas públicas, municipais e estaduais, do início do ensino primário até o final do ensino médio. Em 1986 me transferi para a cidade de Porto Alegre, a fim de ingressar no Curso de Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. É neste momento que este Memorial Acadêmico se inicia.

Começo com minha formação de Físico, desde a Graduação em Física (1986-1989), passando pela minha formação de Pós-Graduação (1990-1997), até meu estágio pós-doutoral no exterior (2001-2003). Em seguida, analiso minhas atividades de ensino superior, tanto na forma da docência propriamente dita, como também na orientação de estudantes de Graduação (iniciação científica), Pós-Graduação (Mestrado e Doutorado) e Pós-Doutorado. Minhas atividades de extensão universitária são discutidas, principalmente na organização de eventos científicos para a comunidade externa à UFPel. Na sequência, apresento minha experiência na gestão acadêmica, desde a chefia do Departamento de Física, coordenação e coordenação adjunta do Programa de Pós-Graduação em Física, passando pela participação no conselho departamental da Unidade, colegiados de Cursos de Graduação e de Pós-Graduação. Listo também minha participação em bancas de trabalho de conclusão e comissões julgadoras, como por exemplo bancas de Mestrado, Doutorado e seleção de professores efetivos, substitutos e visitantes para os Departamentos de Física da Universidade Federal do Ceará (UFC) e da Universidade Federal de Pelotas (UFPel). Minhas atividades técnico-científicas são então apresentadas, divididas pela descrição dos projetos de pesquisa com financiamento que coordenei, pela minha participação em congressos, simpósios, seminários e outros eventos similares, tanto na qualidade de estudante como pesquisador em Física da Matéria Condensada, minha área de concentração, e, finalmente, pela listagem comentada da minha produção intelectual, na forma da produção de artigos científicos em periódicos internacionais indexados. Para esta listagem escolhi uma sequência por períodos de tempo, que considero como representativos de minha produção intelectual. A produção intelectual é finalizada com a compilação do impacto da minha contribuição como pesquisador em Física, seja pela indicação do número de citações de cada um dos artigos que publiquei, bem como pelo h-index que possuo atualmente. Finalizo o presente memorial descritivo com uma

proposta de plano de trabalho, dividido pelas linhas de pesquisa que desenvolvo, onde estão listados os projetos que pretendo desenvolver nos próximos anos, já na qualidade de professor da classe E (professor titular). Estes projetos estão ligados ao meu projeto de bolsa de produtividade em pesquisa do CNPq, nível 2, que mantenho de forma ininterrupta deste 2003, cujo período atual encerra-se em Fevereiro de 2016.

O presente Memorial Acadêmico é um relato histórico, ao mesmo tempo analítico e crítico, dos fatos e dos acontecimentos que constituíram minha carreira acadêmica e científica. Neste sentido, escolhi como forma de apresentação do Memorial uma sequência cronológica, porém dividida em etapas, que considero fundamentais para meu amadurecimento profissional. Assim, mesmo havendo uma superposição de datas dentre as várias etapas que descrevo, a leitura do Memorial fornecerá uma informação completa do itinerário percorrido. Acredito que desta forma este Memorial fornecerá material suficiente para que a Comissão Especial, designada para a análise do meu pedido de promoção para a Classe E (Professor Titular) do Plano de Carreira do Magistério Superior da UFPel, possa avaliar minha contribuição como profissional da área de Física e docente da UFPel.

## **2 Formação, aperfeiçoamento e atualização**

Nesta seção apresento minha trajetória como estudante de Graduação e de Pós-Graduação em Física, bem como minha experiência no exterior durante meu estágio pós-doutoral na Universidade de Princeton, NJ, Estados Unidos.

### **2.1 Graduação**

Ingressei no Curso de Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (IF-UFRGS) em Março de 1986. Durante os 4 anos em que frequentei as disciplinas do Curso de Bacharelado em Física do Instituto de Física, tive a oportunidade de desenvolver já a partir do terceiro semestre do Curso atividades de iniciação científica. Minha primeira experiência foi junto ao laboratório de espectroscopia Mössbauer, sob a orientação do Prof. Dr. Adalberto Vasquez. Durante os 2 anos em que fui bolsista do CNPq naquele laboratório, desenvolvi as mais diversas tarefas ligadas a técnica, tais como obtenção e análise dos espectros Mössbauer, etc.

No 6º semestre do Curso, decidi mudar de área, uma vez que não me achava suficientemente habilitado e motivado para a pesquisa em Física Experimental. Comecei então a trabalhar com o Prof. Dr. Miguel Ângelo Cavalheiro Gusmão, na área de Física Teórica em estado sólido, como bolsista de iniciação científica do CNPq. Desenvolvi durante este período estudos em técnicas como expansão diagramática de Feynman, cálculo de densidade de estados, etc. Este período coincidiu com os dois últimos semestres do Curso de Bacharelado, época em que cursava as disciplinas de Estado Sólido, Mecânica Estatística, Mecânica Quântica, etc. Em função disto, esta experiência em iniciação científica, aliada à formação específica do Curso, cristalizou minha vontade de prosseguir na área de Física Teórica. Me graduei Bacharel em Física em Dezembro de 1989.

## **2.2 Mestrado**

Ingressei como estudante regular do Curso de Mestrado em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do IF-UFRGS em Março de 1990. No projeto de Mestrado, orientado pelo Prof. Dr. Miguel Ângelo Cavalheiro Gusmão, procurei testar a aplicabilidade da teoria de perturbação em torno do limite atômico no estudo da difusão de muons em metais a baixas temperaturas. Iniciada no início dos anos 70 [1], a pesquisa experimental evidenciava um comportamento anômalo na taxa de difusão de muons. Usando uma abordagem clássica, que reduz a difusão ao problema de um duplo poço de potencial, a medida que a temperatura é reduzida esperava-se uma tendência à localização dos muons. Entretanto, experimentos de relaxação de spin a campo zero [2] observaram que os muons difundem mais rapidamente com o decréscimo da temperatura. A técnica que utilizei, usada com relativo sucesso na análise da estrutura eletrônica e propriedades de equilíbrio para os modelos de Anderson e Hubbard, considerava o termo cinético (“hopping”) como uma perturbação ao limite atômico. Obtive formalmente a função de Green corrente-corrente, introduzindo uma representação diagramática para os diversos termos da expansão perturbativa. De posse destes diagramas, calculei a constante de difusão para a aproximação mais simples, chamada de aproximação da cadeia, e para as primeiras correções à mesma. Os resultados que obtive indicaram que, embora o método pudesse ser formalmente aplicado ao estudo de problemas de transporte, uma vez que permitia um bom grau de controle na escolha de contribuições relevantes para aproximações mais sofisticadas, as aproximações mais simples que usei não foram capazes de reproduzir o mecanismo de espalhamento entre os

muons e os elétrons do metal, mecanismo este tido como o responsável pelo comportamento anômalo da difusão de muons a baixas temperaturas. A Dissertação de Mestrado *Um problema de transporte tratado pelo método de perturbação em torno do limite atômico* foi apresentada em Agosto de 1993, tendo sido aprovada com conceito A pela comissão julgadora, formada pelo Prof. Dr. Almir Caldeira (IF-UNICAMP), Prof. Dr. João Batista Marimom (IF-UFRGS) e Prof. Dr. Miguel Ângelo Cavalheiro Gusmão (IF-UFRGS).

## 2.3 Doutorado

Ingressei como aluno regular do Curso de Doutorado em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do IF-UFRGS em Setembro de 1993. Durante o primeiro ano fui orientado pelo Prof. Dr. Miguel Ângelo Cavalheiro Gusmão e pelo Prof. Dr. Gerardo Martínez, no projeto *Soluções numéricas em clusters finitos para sistemas eletrônicos fortemente correlacionados*. Iniciei o projeto analisando a interação entre duas impurezas magnéticas num metal normal, descrita pelo hamiltoniano de Anderson. A técnica escolhida consistia na diagonalização exata deste hamiltoniano, via método de Lanczos, para sistemas formados por aglomerados (ou “clusters”) finitos formados por duas ou mais impurezas de Anderson. Durante este período, desenvolvi um programa computacional capaz de obter a base de autovalores e autovetores do hamiltoniano de forma recursiva. A ideia era aplicar tal metodologia ao estudo do comportamento da função de correlação entre os spins das impurezas em função da distância entre elas, procurando verificar o aparecimento de interações do tipo RKKY. Ao final destes 12 primeiros meses, decidi interromper meu projeto de doutoramento, uma vez que o Prof. Dr. Miguel Gusmão iniciaria naquele momento um estágio pós-doutoral na França. Como imaginava que tal viagem tornaria o trabalho mais próximo impossível, de comum acordo com os dois orientadores, optei por mudar de área de pesquisa. Uma vez que na época já havia cursado Mecânica Estatística, Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio e cursava Transições de Fase e Fenômenos Críticos, disciplinas regulares do curso de Pós-Graduação, me interessei fortemente pela área. Decidi então procurar um pesquisador da Instituição ligado à área de concentração em Mecânica Estatística.

Em Agosto de 1994 iniciei um novo projeto de doutoramento, agora na área de Física Teórica em Mecânica Estatística, sob a orientação da Prof. Dra. Marcia Barbosa e do Prof. Dr. Yan Levin. O primeiro tema abordado foi o estudo da conformação de uma cadeia polianfólita (PA) neutra na presença de uma solução contendo um eletrólito (sal). Os polianfólitos são polímeros

cujos monômeros apresentam cargas elétricas positivas e negativas. No caso do PA neutro, o número de cargas positivas e negativas é o mesmo. Usando a teoria Debye-Hückel-Bjerrum-Flory [3, 4, 5] mostrei que tal sistema apresenta uma variedade de conformações, a medida que a concentração de sal e a temperatura são modificadas. Em particular, para alta concentração de sal e alta temperatura, o PA está estendido. A medida que a temperatura é reduzida, o PA colapsa numa estrutura globular diluída, ou microeletrólito. Diminuindo ainda mais a temperatura, a associação entre os monômeros do PA e os íons do sal torna-se relevante e o PA volta a ficar estendido. Por outro lado, para baixas concentrações de sal, o PA permanece colapsado para a maior parte dos valores de temperatura, voltando a se estender somente para valores de temperatura extremamente baixos. Os resultados desta etapa foram publicados no periódico internacional indexado *Physical Review E* [6].

Numa segunda etapa do projeto de doutoramento estudei o diagrama de fases de um gás de Coulomb neutro [4, 5, 7]. Neste sistema, os constituintes são íons carregados, de mesmo diâmetro e mesmo módulo de carga elétrica. Um exemplo típico de tal sistema é o cloreto de sódio fundido. Utilizei a teoria de campos do tipo sine-Gordon numa abordagem variacional, a fim de obter a energia livre de tal sistema. A partir desta energia livre obtive o diagrama de fases do gás de Coulomb em 2 e 3 dimensões, topologicamente idêntico àqueles obtidos através de simulação Monte Carlo [8] e da teoria Debye-Hückel-Bjerrum [4, 5]. Em particular, em 2 dimensões encontrei a linha crítica de ordem infinita de Kosterlitz-Thouless terminando num ponto tricrítico, a partir do qual a transição metal-isolante transforma-se numa transição de primeira ordem. Entretanto, como falha do modelo, não pude obter adequadamente a fase isolante, caracterizada pela formação de dipolos. Os resultados desta etapa foram publicados no periódico internacional indexado *Physical Review E* [9]. A Tese de Doutorado *Transições de fase em sistemas com cargas* foi apresentada em Agosto de 1997, tendo sido aprovada com conceito A pela comissão julgadora, formada pelo Prof. Dr. Constantino Tsallis (CBPF), Prof. Dr. Sílvio Salinas (IF-USP), Prof. Dr. Horácio Oscar Girotti (IF-UFRGS), Prof. Dr. João Alziro Herz da Jornada (IF-UFRGS) e Profa. Dra. Marcia Barbosa (IF-UFRGS).

## **2.4 Estágio pós-doutoral**

Nesta seção procuro apresentar minha experiência em estágios de pós-doutorado, que considero ainda como etapas de minha formação como pesquisador, que desenvolvi após a obtenção do

título de Doutor em Ciências.

#### **2.4.1 Bolsa de recém-doutor**

No período entre Novembro de 1997 e Fevereiro de 1998 permaneci junto ao grupo de Sistemas Complexos do IF-UFRGS, com bolsa de recém-doutor da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS). Durante este período tive a oportunidade de trabalhar mais estreitamente com o então estudante de Doutorado Paulo S. Kuhn (hoje professor do Departamento de Física da Universidade Federal de Pelotas), na época orientado pela Profa. Dra. Marcia Barbosa. Minha tarefa era introduzir o estudante nas técnicas utilizadas pelo grupo, em especial a teoria Debye-Hückel-Bjerrum, bem como auxiliá-lo na parte numérica. O problema que estudamos, parte do seu tema de doutoramento, consistia na investigação da fusão em sistemas de esferas rígidas que interagem através de um potencial repulsivo do tipo Yakawa. O modelo proposto consistia na construção da energia livre para as fases líquida e sólida, utilizando teorias como expansão virial (fase líquida) e Lennard-Jones-Devonshire (fase sólida). O resultado desta colaboração foi publicado no periódico internacional indexado *Physica A* [10].

#### **2.4.2 Pós-doutorado no exterior**

Como durante o Doutorado, e após este período, trabalhei com modelos teóricos em sistemas que apresentam carga elétrica, achei natural continuar a exploração na área, porém de uma outra perspectiva: a simulação computacional. Meu interesse na técnica foi despertado pelo exame de doutoramento (exigência na época do Curso de Doutorado do IF-UFRGS) que prestei em Março de 1997, com o tema *Simulação Monte Carlo em Mecânica Estatística*, e aprovado com conceito A. Além disto, no período entre 2000 e 2001, quando já era docente da Universidade Federal do Ceará, publiquei alguns artigos em periódicos internacionais indexados (veja seção relativa à produção técnico-científica) que utilizavam técnicas como Dinâmica Molecular e Monte Carlo.

Assim, em Agosto de 2001, já como professor Adjunto II do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, iniciei meu estágio pós-doutoral na Universidade de Princeton, NJ, Estados Unidos, com financiamento do CNPq. Nos 18 meses que permaneci junto ao grupo do Prof. Athanassios Panagiotopoulos, pude travar contato com as mais modernas técnicas de

simulação Monte Carlo em sistemas com carga elétrica. O Prof. Panagiotopoulos é uma das maiores autoridades na área de simulação, principalmente pela técnica por ele desenvolvida no ano de 1987 [11], hoje conhecida como Monte Carlo no “ensemble” de Gibbs. Meu projeto de pós-doutorado era *Simulação Monte Carlo em sistemas com interação de longo alcance*. O primeiro problema que analisei foi a obtenção do diagrama de fases em sistemas com forte assimetria de carga. Nos primeiros meses procurei aprender as diversas técnicas usadas pelo grupo do Prof. Panagiotopoulos, tais como simulação no “ensemble” grande canônico [12], discretização do espaço de simulação [13], técnica de repesagem de histogramas (do inglês “histogram reweighting”) [14, 15], análise de tamanho finito (do inglês “mixed-field finite size scaling”) [16, 17], etc. Deste estudo, ficou claro que para os sistemas com assimetria de carga as técnicas então usadas pelo grupo não seriam eficazes.

Em Janeiro de 2002 iniciei o estudo de sistemas iônicos simétricos. O problema escolhido foi o de um eletrólito simétrico, onde, além do potencial coulombiano, temos a presença de um potencial atrativo de curto alcance. A motivação para o estudo de tal sistema foi despertada por publicações teóricas da época [18], onde se faziam previsões de um diagrama de fases bem mais rico do que o caso coulombiano puro. Assim, utilizei o método de Monte Carlo no ensemble grande canônico (GCMC) para obter a curva de coexistência, tanto para o caso de um gás de Coulomb na rede, como para o caso contínuo. Os resultados que obtive comprovaram em parte as previsões teóricas de A. Ciach e G. Stell [18]. Para o caso na rede, não só a transição de ordem-desordem e ponto tricrítico (esperados neste caso), como também uma transição de primeira ordem do tipo gás-líquido, com consequente ponto crítico, foram encontrados pelas simulações. Para as simulações no contínuo, por outro lado, os resultados que obtive não indicaram a presença de tricriticalidade, conforme previsão teórica [18]. Como fatos relevantes desta etapa, posso destacar não somente o intenso aprendizado das técnicas de simulação, como também a publicação de um artigo em 2003 no periódico internacional indexado *The Journal of Chemical Physics*, com os resultados obtidos para este problema [19]. Além disto, os resultados deste artigo foram apresentados na conferência *Fifteenth Symposium on Thermophysical Properties*, realizada em Boulder, Colorado, Estados Unidos, em 2003. A colaboração científica com o Prof. Panagiotopoulos se manteve ativa até 2006, período em que publiquei mais dois artigos, como será descrito nas seções seguintes.

## **3 Atividades de Ensino, formação de recursos humanos e Extensão**

### **3.1 Atividades de Ensino**

Logo após meu doutoramento iniciei minha carreira docente. No primeiro semestre de 1998, fui contratado como professor horista pelo Departamento de Química e Física da Universidade de Santa Cruz do Sul, onde ministrei a disciplina Física Básica I para o Curso de Engenharia Agrícola. Simultaneamente, fui contratado como professor substituto pelo Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, onde ministrei a disciplina Física III-C, para os Cursos de Engenharia Química, Elétrica e Mecânica. Como fato marcante deste período, que reputo como negativo, praticamente tive paralisada minhas atividades de pesquisa, em função da elevada carga horária em sala de aula a que fui submetido.

Em Agosto de 1998 me transferi para o estado do Ceará, onde fui contratado como professor Adjunto I, em regime de dedicação exclusiva pelo Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará (UFC), onde permaneci até Julho de 2006. Neste período lecionei diversas disciplinas, para diferentes Cursos da UFC, tais como Fundamentos de Física Moderna e Física Fundamental para o Curso de Engenharia Elétrica, Física Geral I para o Curso de Matemática. Para os Cursos de Bacharelado e Licenciatura em Física, ministrei as disciplinas Física Geral I, Termodinâmica, Física Estatística, Física Fundamental I e Instrumentação para o Ensino de Física.

Em Julho de 2006 fui redistribuído para o Departamento de Física do Instituto de Física e Matemática da UFPel (IFM-UFPel), onde permaneço até hoje. Neste período ministrei as disciplinas de Física Geral I, Física Geral II, Termodinâmica, Física Estatística, Aplicativos Computacionais para a Física e Simulações Computacionais no Ensino de Física, todas para o Curso de Licenciatura em Física. Para os demais Cursos da UFPel, ministrei as disciplinas Física Geral e Experimental I, Mecânica I, Física Básica I e Física Básica II. Mais recentemente, com a criação do Curso de Mestrado em Física da UFPel em 2008, me envolvi na criação das disciplinas Mecânica Estatística, Simulação Molecular, Tópicos de Física Estatística e Seminários de Física Estatística, todas já ministradas por mim neste período, além da disciplina Transições de Fase e Fenômenos Críticos, ainda não ministrada aos estudantes do Curso de Mestrado.

## 3.2 Formação de recursos humanos

Nesta seção procuro listar os diversos estudantes de Graduação e de Pós-Graduação que tive a oportunidade de orientar, ou ainda oriento, bem como minha experiência na supervisão de recém Doutores em estágios pós-doutorais.

### 3.2.1 Orientação de estudantes de Graduação

A partir de minha contratação como professor efetivo na UFC, tive a chance de desenvolver atividades ligadas à orientação de estudantes de Graduação em iniciação científica. Orientei o estudante Luis Eduardo Araripe Gomes da Silva (2000-2001), com financiamento do CNPq. Os resultados deste projeto foram apresentados em eventos científicos nacionais da área e publicados na forma de um artigo à *Physical Review E* [20]. Ainda na UFC, orientei os estudantes Erneson Alves de Oliveira e Márcio Antônio Pereira Silva, também com financiamento do CNPq (2003-2005).

Já como professor da UFPel, orientei diversos estudantes no período: Luciana Araújo Velasque (2007-2008), Leonardo Pinheiro (2009-2011), Maurício Moreira Soares (2010), Milene Ribeiro Bueno (2010-2014), Tiago Azevedo Braga (2011-2012, 2013-2015) e Henrique Ceron (2014-2015). Os 4 primeiros foram (ou são) meus orientandos de Mestrado no Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel, conforme discussão da seção 3.2.2. Todos estes estudantes tiveram financiamento na forma de bolsas do CNPq, FAPERGS e UFPel, com seus projetos envolvendo o uso de modelos teóricos e simulação computacional aplicada ao estudo de sistemas em Mecânica Estatística de sistemas complexos.

### 3.2.2 Orientação de estudantes de Mestrado

A partir da criação do Curso de Mestrado em Física, dentro do Programa de Pós-Graduação em Física (PPG-Física) da UFPel, tive a oportunidade de orientar estudantes de Mestrado, conforme lista abaixo:

- (1) José Rafael Bordin (2008-2010):

Na Dissertação *Dinâmica Molecular Grande Canônica de Fluidos Complexos*, apresentada ao PPG-Física em 08/2010, o estudante procurou entender de que forma o confinamento de fluidos complexos, carregados ou não, altera as chamadas propriedades termodinâmicas (ou de “bulk”) do fluido. A metodologia empregada para este estudo envolveu

simulação em Dinâmica Molecular Grande Canônica (GCMD) [21, 22, 23], com controle local do potencial químico em reservatórios de controle (DCV-GCMD) [23, 24, 25, 26]. A partir desta técnica, o sistema é colocado em contato com um ou dois reservatórios externos de potencial químico fixo. Isto é conseguido através da inserção e remoção de partículas dentro de um volume de controle local (usando GCMC), colocado dentro do volume de simulação analisado por MD, de forma que o potencial químico do reservatório se mantenha constante durante o curso da dinâmica do sistema. Tradicionalmente aplicado para sistemas neutros sem carga, nosso objetivo era desenvolver a técnica para eletrólitos 1:1. Neste caso, devido à presença das cargas, técnicas como somas de Ewald foram utilizadas. Ao final do projeto, o estudante foi capaz de produzir um código de simulação computacional em DCV-GCMD aplicado ao estudo em sistemas carregados, analisando diversos cenários, tais como a dependência dos resultados com o tipo de termostato usado nas simulações, dependência do tipo de eletrólito usado, etc. Os casos sem e com um canal entre os reservatórios foram estudados, com especial interesse no cálculo da constante de difusão nestes dois cenários. Este código foi utilizado pelo estudante no seu projeto de doutoramento (veja discussão na seção 3.2.3).

(2) Luciana Araújo Velasque (2008-2010):

Na Dissertação *Transições de fase do Modelo Primitivo Restrito com interações de curto alcance*, apresentada ao PPG-Física em 09/2010, a estudante analisou o chamado modelo primitivo restrito (ou modelo RPM, do inglês “Restricted Primitive Model”) para eletrólitos simples. Para este estudo, a estudante utilizou um modelo teórico simples, adicionando ao modelo RPM um potencial de curto alcance do tipo van der Waals, que representaria uma atração efetiva entre as partículas carregadas, associada ao efeito do solvente sobre os íons. Este modelo proposto seria o análogo teórico da abordagem computacional usada na Ref. [19]. Permitindo que esta atração efetiva de curto alcance não fosse dependente da carga dos íons, a estudante foi capaz de mostrar que a medida que a intensidade da atração de curto alcance era aumentada, além do ponto crítico gás-líquido usual presente do modelo RPM, uma segunda separação de fases do tipo fluido-fluido poderia ser encontrada. Esta segunda separação estaria localizada na região de densidades intermediárias, com os valores de densidades na coexistência muito próximos. Esta proximidade poderia ser o motivo pelo qual as simulações da Ref. [19] não terem sido capazes

de localizar esta separação de fases. A estudante Luciana hoje faz parte do programa de doutoramento do Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da UFRGS.

(3) Ronaldo Adriano da Silva Afonso (2010-2012):

A Dissertação *Estudo em simulação Monte Carlo de sistemas coloidais com descontinuidade dielétrica*, apresentada ao PPG-Física em 10/2012, estudou sistemas coloidais em que o valor da constante dielétrica do colóide e do solvente no qual o mesmo está imerso é levado em conta. Nos trabalhos envolvendo colóides que desenvolvi ao longo dos últimos anos utilizei o chamado modelo primitivo restrito, onde o solvente é considerado sem estrutura e com a mesma constante dielétrica do colóide. Neste projeto de Mestrado o estudante se propôs em levantar esta restrição, considerando de forma explícita o valor da constante dielétrica do colóide como sendo muito menor do que a constante dielétrica do solvente, em geral água em temperatura ambiente. O problema eletrostático numa geometria esférica foi resolvido pelo estudante e o potencial eletrostático de interação entre os íons e o colóide foi obtido, no espírito da teoria de carga imagem e contra-imagens. Este potencial foi então utilizado pelo estudante numa abordagem de simulação Monte Carlo, onde foi capaz de calcular a carga efetiva do colóide em diferentes cenários, utilizando o critério dinâmico de condensação [27, 28], o potencial zeta na ausência ou com sais introduzidos no volume de simulação, sempre com boa concordância com experimentos e abordagens teóricas alternativas.

(4) Leonardo Pinheiro (2011-2013):

A Dissertação *Estudo do Comportamento de Fase do Modelo Primitivo Restrito para Eletrólitos Simples Confinados num Meio Poroso*, apresentada ao PPG-Física em 05/2013, analisou o comportamento de fase do modelo RPM para um eletrólito simples, quando este sistema está encerrado num meio onde uma estrutura porosa está presente. A estrutura porosa no modelo foi simulada pela colocação de esferas rígidas, neutras e fixas, distribuídas de forma completamente aleatória dentro da caixa de simulação. Assim, usando o espaço vazio entre estas esferas do meio como o espaço disponível para os íons do fluido, define-se uma dada porosidade para o meio poroso. O objetivo do estudante era analisar o efeito da diminuição do valor da porosidade do meio sobre as propriedades da separação de fase gás-líquido do modelo RPM. Usando simulação Monte Carlo

no ensemble grande canônico, complementada pelas técnicas de repesagem de histogramas [14, 15] e de escala de tamanhos finitos para a região crítica [16, 17], o estudante foi capaz de mostrar que os valores de temperatura e densidade críticas são reduzidos a medida que o valor da porosidade é reduzido, em maior quantidade para a temperatura. Esta redução é consequência do forte estreitamento observado para a região de coexistência, produzida pela presença do meio poroso. Para a região de altos valores de porosidade, portanto próximo do comportamento de “bulk”, o ponto crítico associado à transição gás-líquido foi caracterizado dentro da classe de universalidade do tipo Ising em 3 dimensões, o mesmo do comportamento de “bulk”. Para a região de baixos valores de porosidade, por outro lado, além da separação gás-líquido, uma segunda separação de fases fluido-fluido foi observada. Nesta separação, foram observadas formações de grande aglomerados de cargas positivas e negativas, com poucos íons livres no espaço disponível dentro da estrutura porosa. Estes aglomerados são formados em função da baixa temperatura para onde o sistema é levado. No momento coorientado o estudante Leonardo no Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da UFRGS.

(5) Maurício Moreira Soares (2013-2015):

Neste trabalho o estudante procura desenvolver um modelo matemático para o estudo da angiogênese, um importante fenômeno biológico, responsável por muitas patologias e que tem sido alvo de intensa pesquisa nos últimos anos. Se espera que o conhecimento sobre a angiogênese induzida em tumores traga consequências relevantes para o diagnóstico e tratamento do câncer. A abordagem escolhida pelo estudante utiliza um modelo multiescala de interface difusa, originalmente proposto por Travasso *et al.* [29], de forma a entender os mecanismos biológicos relacionados ao crescimento endotelial. O modelo tem como foco a proteína fator de crescimento do endotélio vascular (VEGF), que tem a tarefa de ativar as células endoteliais de ponta, fazendo originar novas vasculaturas e regulando a migração e proliferação das células endoteliais. Assim, o VEGF é a principal força motor da angiogênese e o seu estudo provê uma promissora primeira abordagem sobre o crescimento de vasos sanguíneos. Esses aspectos são levados em consideração e introduzidos no modelo matemático proposto e implementado em três dimensões. Para o cálculo do fluxo sanguíneo é proposta a utilização da lei de Hagen-Poiseuille, considerando-se o sangue como um fluido newtoniano, incompressível e em regime laminar. Para tratar

a identificação dos nodos da rede vascular, é aplicado um método de processamento de imagem para a extração das linhas médias dos vasos sanguíneos formados, permitindo assim o tratamento adequado da rede hidráulica. O que se espera deste modelo é uma descrição adequada da angiogênese, predizendo a morfologia endotelial, densidade de ramificações e o calibre dos novos vasos formados. A dissertação está em fase final de elaboração, devendo ser apresentada em Fevereiro de 2015.

(6) Karlisson Rodrigo de Almeida Sousa (2014-2017):

Este estudante ingressou no Mestrado em Física da UFPel em Abril de 2014, sob minha orientação. A proposta de Mestrado deste estudante envolve o uso de simulação computacional para o estudo de soluções contendo polieletrólitos, surfactantes iônicos e diferentes tipos de sais, sistemas que comecei a estudar no período de 2007 a 2010 (veja discussão na seção 6.3.5). A proposta envolve a caracterização da formação micelar observada em soluções contendo surfactantes catiônicos e aniônicos (ou misturas cataniônicas), com ou sem a presença de polieletrólitos, uma vez que tal propriedade é fortemente influenciada pela presença dos íons de sal na solução [30, 31, 32, 33]. Esta influência (ou especificidade) é percebida através da série liotrópica ou série de Hofmeister [34], que ordena os íons pela sua capacidade de precipitar proteínas [35] (veja discussão na seção 6.3.5). Trabalhos recentes sugerem que a especificidade iônica desempenha papel importante [36] para a micelização de surfactantes iônicos. Pensando nisto, o projeto que propus para o estudante é obter o valor da concentração crítica para a formação micelar em soluções cataniônicas, usando simulação em Dinâmica Molecular, através do uso do pacote ES-PreSo (acrônimo derivado da expressão em inglês “Extensible Simulation Package for Research on Soft- Matter”), desenvolvido pelo grupo do Prof. Christian Holm do Institute for Computational Physics Universität Stuttgart, Alemanha.

(7) Milene Ribeiro Bueno (2014-2017):

Esta estudante ingressou no segundo semestre de 2014 no Mestrado em Física da UFPel, sob minha orientação. No momento estamos definindo o tema de seu projeto de Mestrado.

### 3.2.3 Orientação de estudantes de Doutorado

Até o momento não temos um Curso de Doutorado em Física no Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel. O projeto do Programa é submeter em 2015 uma proposta de criação de um Curso de Doutorado em Física na UFPel. Como atual Coordenador do Programa, tenho me envolvido integralmente neste projeto. Assim, com a intenção de adquirir experiência neste tipo de orientação, me envolvi desde 2010 na coorientação de estudantes de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Física do IF-UFRGS. Estes estudantes foram meus alunos de Mestrado em Pelotas, conforme lista abaixo:

(1) José Rafael Bordin (2010-2013):

Na tese *Estudos computacionais sobre a dinâmica e estruturação de fluidos complexos confinados em nanoporos*, apresentada ao IF-UFRGS em 09/2013, o estudante desenvolveu dois projetos ligados à simulação computacional de fluidos complexos. No primeiro deles, o estudante aplicou as técnicas de simulação em DCV-GCMD (veja discussão na seção 3.2.2) no estudo de canais iônicos, estruturas formadas por proteínas específicas ligadas a uma membrana fosfolipídica [37] e preenchidas com água, cuja função principal é a troca de eletrólito entre os meios exterior e interior de uma célula. Dependendo da conformação desta proteína, o poro pode estar fechado ou aberto. Quando aberto, a proteína torna-se extremamente específica ao tipo de íon que pode passar pelo canal [38, 39]. A fim de funcionar adequadamente, é preciso que o canal conduza milhares de íons num período de poucos milissegundos. Entretanto, considerando que o canal é aberto através de uma membrana fosfolipídica de baixa constante dielétrica (da ordem de 2, em contraste com o valor 80 da água, em unidades da permissividade do vácuo) e muito estreita (tipicamente, raios de 3 até 8 Å), tal que o custo energético para que um íon entre no canal seja enorme, é fascinante como a natureza se encarrega de executar tal tarefa. Do ponto de vista tecnológico, encontramos o mesmo problema nos chamados nanoporos, assim denominados em função da escala de fabricação destes poros preenchidos com água [40]. Usando um modelo proposto por Levin [41] para o cálculo da contribuição de carga imagem produzida pela descontinuidade dielétrica enfrentada por um íon dentro do canal, o estudante foi capaz de desenvolver um código em DCV-GCMD que descreve de forma bastante precisa e com custo computacional reduzido o fluxo iônico através de uma canal artificial que simula o canal antibacteriológico gramicidin A [42]. Os perfis de corrente-

voltagem e corrente-concentração foram obtidos, novamente em boa concordância com o canal gramicidin A. Os resultados deste trabalho foram publicados em 2012 no periódico *Physical Review E* [43].

Na segunda parte do projeto de doutoramento, o estudante procurou entender de que forma o uso de modelos com potenciais efetivos poderia ser usado no estudo das propriedades de fluidos que apresentam comportamentos anômalos, similares àqueles encontrados na água. Ao invés de utilizar os métodos tradicionais de cálculos de primeiros princípios (ou *ab initio*), em geral de alto custo computacional e submetidos à restrições de uso em sistemas confinados, o estudante propôs a utilização de potenciais efetivos com mais de uma escala, que, em condições de *bulk*, foram capazes de reproduzir com sucesso os comportamentos dinâmicos, termodinâmicos e as anomalias estruturais da água. Na sua tese de Doutorado, o estudante José Rafael propôs a aplicação da abordagem de potenciais clássicos empíricos no caso de um fluido confinado num nanotubo. Este fluido, chamado de tipo água, uma vez que de fato não tem a pretensão de representar a molécula de água de forma explícita, é caracterizado por esferas que interagem através de um potencial de duas escalas, produzido a partir da soma de um potencial de Lennard-Jones usual e uma gaussiana centrada numa posição arbitrária. O nanotubo, construído como uma rede hexagonal de esferas numa folha enrolada, interage com as partículas do fluido através de um potencial do tipo Weeks-Chandler-Andersen. Esta configuração foi utilizada numa simulação no ensemble isobárico-isotérmico (ou das pressões), confinando o nanotubo e as partículas do fluido por duas paredes móveis nas extremidades da caixa de simulação. Como resultado, o estudante foi capaz de mostrar que coeficiente de difusão aumenta com a diminuição do raio do nanotubo a partir de um certo valor crítico (limiar crítico). Este efeito é atribuído à competição entre o confinamento, que favorece a acomodação das partículas do fluido em escalas de comprimento de mais baixa energia, e a interação superficial com as paredes do nanotubo, que favorece a formação de uma única camada de partículas do fluido (*single file*) abaixo do limiar crítico, onde a difusão é facilitada. Este mesmo mecanismo de difusão *single file* foi observado em simulações *ab initio* de água confinada, porém o mecanismo responsável é atribuído às pontes de hidrogênio [44]. Estes resultados foram publicados no artigo “Diffusion Enhancement in Core-softened fluid confined in nanotubes” publicado em 2012 [45].

Na parte final da sua tese de doutoramento, o estudante procurou estudar a relação entre as propriedades dinâmicas e a estrutura dos fluidos confinados em nanoporos. Para tanto, o objeto de estudo foi a anomalia do chamado fator de aumento de fluxo, definido como a razão entre a condutividade hidráulica, obtida de simulação molecular, do valor obtido para esta propriedade de modelos contínuos clássicos, como a equação de Hagen-Poiseuille. Experimentos recentes [46, 47, 48] mostraram que o fator de aumento de fluxo da água é várias ordens de grandeza maior do que se espera de modelos clássicos de fluxo. Estes experimentos mostraram inclusive que a água sofre uma transição de um fluxo contínuo para um sub-contínuo [48]. Este comportamento foi observado não somente para nanotubos hidrofóbicos a base de carbono, mas também para canais hidrofílicos de alumina [49], o que parece indicar que o aumento de fluxo não é uma propriedade exclusiva da água. De fato, o fluxo de etanol, metano e decano também exibem um grande aumento de fluxo quando confinados em nanotubos [47, 50]. No desenvolvimento deste projeto, o estudante utilizou a técnica de simulação em DCV-GCMD, a fim de criar um gradiente de potencial químico através do nanotubo que conecta os dois reservatórios. O fluido foi modelado através de um potencial de duas escalas com termos repulsivos e atrativos. Com este modelo, o estudante foi capaz de mostrar como o raio do nanotubo afeta o fator de aumento de fluxo, para diferentes cenários do potencial de duas escalas. A transição de um fluxo contínuo para sub-contínuo, similar àquela observada para a água, é caracterizada por flutuações e aumento acentuado no fator aumento de fluxo para raios de nanotubo pequenos. Esta transição é produzida pelas mudanças estruturais no fluido dentro do nanotubo, produzidas pela competição entre as interações fluido-nanotubo e fluido-fluido, responsáveis pela criação de camadas correlacionadas de fluido. Os resultados foram publicados no artigo “Relation Between Flow Enhancement Factor and Structure for Core-Softened Fluids Inside Nanotubes” publicado em 2013 [51].

(2) Leonardo Pinheiro (2013-2017):

Neste trabalho, em colaboração com a Profa. Marcia Barbosa do IF-UFRGS, orientadora principal do estudante, iremos estudar a natureza das fases líquidas e do ponto crítico em modelos esfericamente simétricos para a água. Na tese de doutoramento de José Rafael Bordin, discutida acima, foi analisada a relação entre a estrutura de fluidos representados por potenciais de duas escalas e as propriedades dinâmicas destes fluidos sob condições

de confinamento. A inspiração neste caso era a analogia entre as propriedades anômalas destes fluidos com as anomalias dinâmicas apresentadas pela água. Estas anomalias no caso da água têm sido explicadas na literatura a partir de três hipóteses:

1. Conjectura de limite de estabilidade: na região onde as anomalias são observadas existiria uma linha de decomposição espinodal que seria reentrante [52].
2. Hipótese da existência de um segundo ponto crítico: existiriam na região metaestável da água duas fases líquidas em coexistência [53]. A linha de coexistência entre estas fases terminaria em um ponto crítico. As anomalias seriam, então, decorrentes das flutuações críticas na vizinhança deste ponto.
3. Hipótese de inexistência de singularidade: de acordo com esta teoria as anomalias seriam provenientes do comportamento não usual da densidade [54].

A hipótese 2, mesmo com os problemas técnicos do ponto de vista experimental na região superfria, pois o sistema simplesmente condensa ou solidifica, merece atenção. A presença de duas fases amorfas, uma de baixa densidade e outra de alta densidade, a baixíssimas temperaturas [55], tem sido tomada como evidência (ainda sob debate) da presença de duas fases líquidas. Na sua tese de doutoramento, o estudante irá a analisar esta hipótese 2 para as anomalias, usando uma abordagem em simulação computacional. O modelo microscópico utiliza um potencial efetivo esfericamente simétrico, com duas escalas de comprimento, característico de um fluido no qual a dinâmica e a termodinâmica não estão associadas à escala molecular, mas a uma escala de agregados mesoscópicos, como é o caso da água e suas ligações (ou pontes) de hidrogênio.

A possibilidade de que um sistema de uma única componente apresente duas fases líquidas, cuja coexistência termine em um segundo ponto crítico (o primeiro ponto crítico seria entre a fase líquida e a fase gasosa), foi proposta inicialmente por Hemmer e Stell [56]. Os autores propuseram que um potencial com duas escalas apresentaria dupla criticalidade se uma das escalas fosse atrativa. Deste trabalho, uma série de modelos têm sido propostos para descrever a possível dupla criticalidade da água. Sob certas condições a dupla criticalidade coexiste com a presença de anomalias dinâmicas e termodinâmicas. Estes modelos, no entanto, não exploram a natureza das duas fases líquidas que coexistiriam abaixo do ponto crítico. Uma questão relevante para a modelagem da água é se estas

duas fases apresentam uma linha de coexistência com inclinação negativa, o que indicaria uma fase líquida mais densa mais entrópica que a fase líquida menos densa. A hipótese de que a linha de coexistência entre as duas fases líquidas apresenta inclinação negativa é aceita para a água e seria um teste interessante para os modelos esfericamente simétricos. Para testar se este é o caso, o estudante irá analisar uma família de modelos esfericamente simétricos [57] derivados de um modelo mais complexo para a água, o ST4. O que se pretende é verificar como são as fases líquidas e como é a região de coexistência, além de calcular os expoentes críticos da transição líquido-líquido, a fim de verificar se estão na classe de universalidade de Ising, como o proposto para a água.

### **3.2.4 Supervisão de Pós-Doutorado**

Em função da criação do Curso de Mestrado em Física dentro do Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel, tivemos a oportunidade de assimilar jovens Doutores, a partir da abertura de editais de pós-doutorado, como é o caso do PNPd da CAPES. Neste período, supervisionei a Dra. Andrea Ucker Timm (2012), hoje professora na Faculdade da Serra Gaúcha, Caxias do Sul, o Dr. Arlan da Silva Ferreira (2012-2013), hoje professor do Departamento de Física da UFPel, o Dr. José Rafael Bordin (2013), hoje professor da UNIPAMPA, Campus Caçapava do Sul. Atualmente supervisiono o estágio pós-doutoral do Dr. Amin Bakshandeh (2014-2015). Todos estes jovens Doutores foram assimilados no projeto PNPd Institucional 2011, aprovado em 2012 e com validade de 3 anos, transformado em PNPd/CAPES em Março de 2014. O projeto que está sendo desenvolvido por este pesquisador está descrito no plano de trabalho que finaliza este memorial, seção 7.1.2.

### **3.3 Organização de Eventos**

Como docente da UFPel, pude participar na organização de dois eventos ligados à Pesquisa em Física na cidade de Pelotas. Em 2007 fui o coordenador geral do “I Encontro de Física do Centro-Sul do RS”, com financiamento da FAPERGS e FINEP, onde 61 participantes oriundos da UFPel, FURG, UFRGS, UNIPAMPA, UFSM, UNIFRA, USP e LNLS apresentaram um retrato da pesquisa em Física na metade sul do RS. Em 2010 fui coordenador adjunto do “II Encontro de Física do RS”, com financiamento da FAPERGS e CNPq. Continuação do evento organizado em 2007, neste segundo evento em torno de 100 participantes reuniram-se em Pe-

lotas para discutir a Física no estado do RS. Neste evento, um grupo maior de estudantes foi inserido, em especial os discentes do Programa de Pós-Graduação em Física.

Em 2013 participei como membro do comitê regional de organização do I Encontro de Físicos do Sul, realizado na cidade de Curitiba, PR. Neste evento, organizado para congregar as Instituições dos três estados da região sul, em torno de 290 participantes discutiram a pesquisa e o ensino de Física nestes três estados. O Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel participou deste evento com a maior delegação de fora do estado do Paraná, com professores e discentes do Programa apresentando os seus trabalhos. Para o ano de 2015 está previsto a realização do II Encontro de Físicos do Sul no estado do Rio Grande do Sul, com a coordenação geral a cargo do Programa de Pós-Graduação da UFPel.

## **4 Atividades de gestão acadêmica**

Durante os últimos anos participei de diversas atividades de gestão acadêmica, principalmente a partir da minha redistribuição da UFC para a UFPel. Separei estas atividades pelos cargos exercidos, conforme apresentado abaixo.

### **4.1 Chefia do Departamento de Física: 2010-2011**

No período de Janeiro de 2010 a Dezembro de 2011, exerci o cargo de Chefe do Departamento de Física do Instituto de Física e Matemática da UFPel. Neste período, participei da reestruturação do elenco de disciplinas do Departamento que é oferecido para os demais Cursos da UFPel, iniciada na gestão anterior. Nesta reestruturação, reduzimos o número de horas semanais do Departamento, através da otimização da oferta de disciplinas. Além disto, coordenei a aquisição de kits de equipamentos para o ensino de Física experimental, no valor aproximado de R\$ 1.200.000,00. Estes equipamentos estão em uso, não só nas disciplinas oferecidas para os Cursos de Engenharia da UFPel, mas também pelos alunos do Curso de Licenciatura em Física.

### **4.2 Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física: 2008-2015**

Desde a criação do Curso de Mestrado em Física em 2007, dentro do Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel, participei da administração do Programa. Primeiro na qualidade de Coordenador Adjunto (2007-2011) e depois na Coordenação do Programa, *Pró-tempore* no período

2012-2014 e eleito para o período atual 2014-2015. Neste período pude acompanhar estreitamente as etapas de criação, desenvolvimento e consolidação de um Programa de Pós-Graduação em Física. Como marco deste período, posso destacar o resultado obtido na última avaliação trienal (2010-2012), onde o Curso de Mestrado em Física da UFPel foi avaliado com a nota 4.

### **4.3 Membro do Colegiado do Curso de Mestrado em Física: 2007-atual**

Desde a criação do Curso de Mestrado em Física tenho participado como membro permanente do Colegiado da Pós-Graduação (CoPG) ligado ao Curso de Mestrado em Física. Atualmente, como Coordenador do programa, presido este Colegiado.

### **4.4 Membro do Colegiado do Curso de Licenciatura em Física: 2014-2015**

Recentemente fui indicado como membro titular do Colegiado do Curso de Licenciatura em Física da UFPel.

### **4.5 Membro do Conselho Departamental do IFM: 2007-atual**

Participo como Membro titular do Conselho Departamental do Instituto de Física (IFM) desde 2007, nas mais diversas representações: Prof. Adjunto, Chefe do Departamento de Física e Coordenação de Curso de Pós-Graduação. Neste período acompanhei as diversas mudanças a que foi submetido o IFM, em especial àquelas introduzidas pelo projeto REUNI, com a criação dos Cursos de Engenharia da UFPel.

## **5 Participação em bancas de trabalhos de conclusão e comissões julgadoras**

### **5.1 Bancas de Mestrado**

Como docente da UFC, participei em 2004 da banca de julgamento da Dissertação “Estudo da fragmentação através da Dinâmica Molecular”, do estudante Luis Eduardo Araripe Gomes

da Silva. Vale ressaltar que o estudante iniciou a exploração deste tema durante sua iniciação científica, sob minha orientação.

Já como docente da UFPel, participei em 2010 das bancas das Dissertações “Estudo da transição colapsado-estendido em soluções de polieletrólitos flexíveis”, da estudante Cíntia Barbosa Passos, “Dinâmica Molecular Grande Canônica de Fluidos Complexos”, do estudante José Rafael Bordin, e “Transições de fase do Modelo Primitivo Restrito com interações de curto alcance”, da estudante Luciana Araújo Velasque. Em 2012 participei da banca de avaliação da Dissertação “Estudo em simulação Monte Carlo de sistemas coloidais com descontinuidade dielétrica”, do estudante Ronaldo Adriano da Silva Afonso. Em 2013, participei da banca da Dissertação “Estudo do comportamento de fase do modelo primitivo restrito para eletrólitos confinados num meio poroso”, do estudante Leonardo Pinheiro. Todas estas Dissertações foram apresentadas ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel.

Participei em bancas de Mestrado em Programas de Pós-Graduação de outras Instituições de Ensino Superior. Em 2013, na Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, participei da comissão julgadora da Dissertação “Estudo por simulação computacional da interação entre polieletrólitos fracos e macroíons esféricos”, do estudante Vinícius Martins de Oliveira. Em 2013, na Universidade de São Paulo, campus São Carlos, participei da banca da Dissertação “Sincronização explosiva em redes complexas”, do estudante Thomas Kauê Dal’Maso Peron. Ainda em 2013, na Universidade Federal do Rio Grande do Sul, participei da banca da Dissertação “Comportamento de um modelo para a água em sistemas porosos”, do estudante Alexandre Pentead Furlan. Em 2014, na Universidade Federal do Rio Grande do Sul, participei da banca de Mestrado “Vórtices e partículas de Yukawa em um potencial de confinamento”, do estudante Matheus Giroto.

## **5.2 Bancas de Doutorado**

Como docente da UFC, participei em 2004 da banca de julgamento da tese de Doutorado “Propriedades estruturais, dinâmicas e térmicas em clusters bidimensionais”, do estudante Wandemberg Paiva Ferreira.

Já como docente da UFPel, participei em 2008 na Universidade Federal do Rio Grande do Sul da banca de Doutorado “Correlações eletrostáticas e de tamanho em um modelo de cela para dispersões coloidais”, do estudante Alexandre Derivi. Ainda em 2008, na Universidade Federal

do Rio Grande do Sul participei da banca de Doutorado “Líquidos iônicos: desenvolvimento de campo de força e estudo das propriedades físicas e estruturais”, do estudante Jones de Andrade. Em 2012, na Universidade Federal de São Paulo, participei da banca de Doutorado “Modelos estatísticos para a transição ordem-desordem de camadas lipídicas”, do estudante Henrique Santos Guidi.

### **5.3 Bancas de Concursos Públicos**

Como professor da UFC, fui nomeado membro de banca de concurso público cinco vezes. Quatro delas para concurso de professor substituto e uma para professor visitante estrangeiro. Já como docente da UFPel, participei de quatro comissões julgadores, três para a seleção de Professor Adjunto e uma para Professor Assistente.

## **6 Atividades técnico-científicas**

Nesta seção procuro apresentar minhas atividades ligadas à pesquisa em Física. Dividi estas atividades listando os projetos de pesquisa com financiamento que coordenei, os congressos e eventos em Física que participei diretamente, ou fui coautor de trabalho apresentado, e os eventos em Física que coordenei. Na parte final da seção discuto brevemente minha produção científica, na forma de publicações especializadas em periódicos internacionais indexados, com a compilação do impacto desta produção.

### **6.1 Coordenação de projetos de pesquisa com financiamento**

Os projetos abaixo foram desenvolvidos sob minha coordenação ao longo dos últimos 16 anos, no desenvolvimento das minhas atividades de pesquisa em Física. Na UFPel estes recursos têm sido usados para equipar o laboratório do Grupo de Teoria e Simulação em Sistemas Complexos (TSSC) que coordeno. Listei apenas os projetos de tiveram financiamento direto dos órgãos de fomento à pesquisa.

1. Programa de Apoio a Núcleos de Excelência - PRONEX - Edital FAPERGS/CNPq nº 008/2009: coordenei o nó local de Pelotas no projeto “Efeitos Complexos em Sistemas Coulombianos”, sob coordenação da Profa. Marcia Barbosa do IF-UFRGS. Este projeto

permitiu a destinação de R\$ 77.372,00 para a aquisição de um cluster de computação de alto desempenho, composto por 96 núcleos de processamento, utilizado pelos grupos de pesquisa do Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel, dentre os quais o grupo TSSC que coordeno.

2. Pró-Equipamentos CAPES: coordenei o sub-projeto “Qualificação da infra-estrutura das linhas de pesquisa do PPG-Física”, submetido à CAPES em 07/2012, no valor de R\$ 40.000,00. Para o grupo TSSC foi destinado R\$ 30.000,00 para a compra de um cluster de computadores com 48 núcleos de processamento.
3. Financiamento Individual à Pesquisa: Edital Universal/2009 do CNPq (14/2009), “Laboratório de modelagem de macromoléculas”, no valor de R\$ 13.300,00
4. Financiamento Individual à Pesquisa: Edital Universal/2007 do CNPq (09/2007), “Teoria e Simulação de Eletrólitos e Polieletrólitos”, no valor de R\$ 15.782,00.
5. Financiamento Individual à Pesquisa: Edital Universal/2002 do CNPq (019/2004), “Simulação Monte Carlo em sistemas com interação de longo alcance”, no valor de R\$ 5.000,00.
6. Financiamento Individual à Pesquisa: Edital Universal/2000 do CNPq (05/2000), “Estudo da criticalidade na fragmentação através de simulação em dinâmica molecular”, no valor de R\$ 9.969,00.

No momento estou com dois projetos submetidos à Editais de financiamento à pesquisa:

1. Financiamento Individual à Pesquisa: Edital Universal/2014 do CNPq (14/2014), “Confinamento em sistemas carregados: uma abordagem computacional”, no valor de R\$ 38.304,00.
2. Financiamento Individual à Pesquisa: Edital FAPERGS Pesquisador Gaúcho (02/2014) – Faixa A, “Eletrólitos confinados: estudo do equilíbrio e das propriedades dinâmicas, através de simulação computacional”, no valor de R\$ 38.304,00.

## 6.2 Participação em congressos, simpósios, seminários e outros eventos similares

Ao longo destes anos tive a oportunidade de participar de alguns eventos relacionados com a pesquisa em Física. No Brasil, participei do Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada em 1993, 1995, 1997, 1996, 1997, 1999, 2000, 2003, 2006 e 2009, com comunicações orais e na forma de pôsteres. Participei do Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, com comunicações orais em 1998 e 1999. Participei do I Encontro dos Físicos do Sul do RS em 2007 e do II Encontro de Física do RS em 2010, ambos realizados na cidade de Pelotas. Em 2013 participei do I Encontro de Físicos do Sul, realizado na cidade de Curitiba. Nestes 3 últimos eventos participei da organização, tanto na coordenação geral (dois primeiros) como nos comitês regionais de organização (último deles).

Em eventos Internacionais (realizados no Brasil ou fora dele), participei em 1996 do *Workshop on Complex Systems*, realizado na cidade de Brasília, com a apresentação do poster “A neutral polyampholyte in an ionic solution”, tema de minha tese de Doutorado. Em 1997, fui co-autor de 2 trabalhos apresentados na conferência *V Latin American Workshop on Non-Linear Phenomena*, realizada na cidade de Canela: um na forma oral, “Sine-Gordon mean field theory of a Coulomb gas”, tema de minha tese de Doutorado, e outro como poster, “Phase diagram of Yukawa systems”. Ainda em 1997, fui co-autor de trabalho apresentado na conferência *International Conference on the morphology and kinetics of phase separating complex fluids*, realizada na cidade de Messina, Itália, na forma de comunicação oral sob o título “Nucleation and growth in model for microemulsions”, tema que desenvolvi com a Profa. Marcia Barbosa antes de definirmos o tema de doutoramento. Em 1999 fui co-autor do trabalho apresentado na conferência *VI Latin American Workshop on Non-Linear Phenomena*, realizada na cidade de Córdoba, Argentina, na forma de comunicação oral com o título “Density-functional theory for like-charged plates”. Ainda em 1999, tive a oportunidade de participar do *Workshop on Dynamics of Nonequilibrium Systems*, realizado em na cidade de Trieste, Itália. Não apresentei trabalho neste evento. Em 2003 meu trabalho de pós-doutoramento foi apresentado como comunicação oral à conferência *Fifteenth Symposium on Thermophysical Properties*, realizada na cidade de Boulder, Colorado, Estados Unidos. Este trabalho foi apresentado pelo Prof. Panagiotopoulos, pois não obtive financiamento por parte dos órgãos de fomento do Brasil. Ainda em 2003 apresentei o trabalho “Phase diagrams in the lattice RPM model“, na forma de poster, no

*Workshop em Simulação e Modelagem de Nanoestruturas*, realizado no Centro Internacional de Física da Matéria Condensada da Universidade de Brasília. Finalmente, em 2005 participei da conferência internacional *6<sup>o</sup> Liquid Matter Conference*, realizada na cidade de Utrecht, Holanda, com a apresentação do trabalho “Phase diagrams in the lattice restricted primitive model: From order-disorder to gas-liquid phase transition”, na forma de poster.

Em anos mais recentes, meus estudantes de Graduação e Pós-Graduação, bem como recém doutores que supervisionei em estágios de Pós-Doutorado, têm apresentado seus trabalhos em eventos científicos no Brasil, tais como aqueles listado acima, onde minha participação tem sido como co-autor.

### **6.3 Produção intelectual**

Para a discussão da minha produção intelectual, escolhi uma forma cronológica dividida por períodos que considero representarem meu crescimento e amadurecimento como pesquisador, culminando com a concessão de minha bolsa de Produtividade em Pesquisa nível 2 do CNPq em 2003. Esta bolsa tem validade até Fevereiro de 2016 e está ligada ao projeto Teoria e Simulação de Sistemas Complexos.

#### **6.3.1 Período entre 1990 e 1997**

Período que coincide com a obtenção dos títulos de Mestre em Física e Doutor em Ciências, meus primeiros artigos foram publicados em 1996 e 1997. O primeiro deles, “Neutral Polyampholyte in an ionic solution” [6], e o segundo, “Sine-Gordon mean field theory of a Coulomb gas” [9], já descritos na seção 2 da minha formação de Pós-Graduação. Estes dois artigos usam uma abordagem puramente teórica, e já sinalizavam meu interesse pela área de pesquisa em Física Estatística de sistemas carregados. Logo após o doutoramento, tive a oportunidade de publicar mais um artigo, “Melting of a colloidal crystal” [10], em colaboração com Paulo S. Kuhn, então estudante de Doutorado. Neste trabalho, investigamos a separação de fase sólido-líquido de um sistema de esferas rígidas que interagem através de um potencial do tipo Yukawa repulsivo, através de uma teoria para o cálculo das energias livres na coexistência entre as duas fases termodinâmicas. Meu papel neste trabalho foi mais de acessoramento do estudante, auxiliando-o na parte numérica do trabalho, bem como na introdução dos modelos teóricos necessários para a realização do trabalho.

O final deste período coincide com o final do meu doutoramento e o início de minhas atividades de docência em Instituições de nível superior. Neste período tive um intervalo relativamente grande de interrupção das atividades de pesquisa, em função das atividades de docência que realizei na época.

### **6.3.2 Período entre 1998 e 2000**

Este período se inicia com minha contratação como docente da Universidade Federal do Ceará em 1998. Em 1999 publiquei o artigo intitulado “Density-functional theory for attraction between like-charged plates” [58], em colaboração com M. N. Tamashiro (então pós-doc em Porto Alegre, hoje professor da Unicamp), Marcia Barbosa e Yan Levin. Neste trabalho investigo a interação entre duas placas igualmente carregadas, que confinam partículas de carga oposta a estas (chamados de contraíons). Usando o ferramental da teoria Debye-Hückel à aproximação de plasma de uma componente, fui capaz de mostrar que, a despeito de terem a mesma carga elétrica, a interação entre as placas pode se tornar atrativa, em função da presença dos contraíons.

Em 2000 publiquei meu primeiro artigo de simulação computacional. Em colaboração com Humberto A. Carmona, Luis E. Araripe (meu estudante de iniciação na época), José Soares A. Jr e Gil de Aquino Farias, publiquei o trabalho “Scaling behavior in explosive fragmentation” [20]. Neste trabalho utilizei simulação em Dinâmica Molecular para investigar a distribuição de fragmentos produzidos num evento explosivo. Meu interesse era verificar que tipo de lei de distribuição para as massas dos fragmentos poderia ser obtida, a partir de um modelo bem simples de fragmentação. Assim, objetos bidimensionais ligados pelo potencial de Lennard-Jones eram produzidos de forma computacional e fragmentados através da energia cinética fornecida aos constituintes do objeto num tempo igual a zero. A quebra destes objetos se dava através da competição entre a energia potencial dos objetos, responsável pela ligação entre os constituintes, e a energia cinética fornecida aos mesmos. As simulações realizadas mostraram que a distribuição de massas seguia uma lei de potência, com um expoente dependente da configuração inicial do objeto. Tal dependência foi interpretada como uma evidência de que a fragmentação não poderia ser caracterizada como um exemplo de criticalidade auto-organizada, sugestão então tida como aplicável à fragmentação.

### 6.3.3 Período entre 2001 e 2002

Este período coincide com meu estágio pós-doutoral no exterior, que vai de Agosto de 2001 a Fevereiro de 2013. Na primeira etapa deste período publiquei o artigo “Charge renormalization and phase separation in colloidal suspensions” [59]. Em colaboração com Marcia Barbosa e Yan Levin, explorei neste trabalho os efeitos da condensação de contraíons sobre a separação de fases do tipo fluido-fluido em suspensões coloidais. Usando o ferramental das teorias Debye-Hückel e DLVO [60] propus uma energia livre variacional que, para os casos em que não existiria sal na solução, a transição fluido-fluido não seria possível. Somente com a adição de sal é que tal transição de fase poderia ser observada, porém em condições de difícil realização experimental. Na verdade este trabalho continua atual, uma vez que é grande o esforço no sentido de elucidar o comportamento de tais sistemas. O problema nestes casos é a alta assimetria (de carga e de tamanhos) entre os constituintes, o que inviabiliza grande parte dos métodos tradicionais de mecânica estatística, bem como a exploração em simulação computacional.

Ainda em 2001, publiquei meu segundo artigo inteiramente de simulação computacional, “Counterion correlations and attraction between like-charged macromolecules” [61], em colaboração com Humberto Carmona e Yan Levin. Neste trabalho utilizei simulação Monte Carlo para investigar a interação entre duas cadeias cilíndricas, carregadas com a mesma carga elétrica, quando íons de carga oposta (contraíons) às cadeias estão condensados nestas. Tal sistema seria uma representação bastante simplificada de duas cadeias de DNA. Os resultados de simulação Monte Carlo mostraram que é exatamente esta condensação dos contraíons a responsável pela atração observada entre as cadeias de DNA. Mostraram também como o raio do DNA, o tamanho deste e a configuração espacial dos contraíons condensados determinam a intensidade desta atração.

Em Agosto de 2001 fui para os Estados Unidos para iniciar meu estágio pós-doutoral na Universidade de Princeton. Continuei, entretanto, interagindo com alguns dos meus colaboradores. Assim, em 2002 publiquei o artigo “Thermodynamics of ionic microgel” [62]. Neste trabalho minha participação se resume ao desenvolvimento da solução numérica do modelo teórico, juntamente com Yan Levin, pois a parte experimental foi desenvolvida na Espanha por A. Fernandez-Nieves e A. Fernandez-Barbero. Basicamente, o modelo desenvolvido permitiu a construção de uma energia livre de campo médio, onde as interações mais relevantes do sistema contribuem com um termo. Assim, mediante minimização desta energia livre, pude

mostrar que tal sistema apresenta transição contínua ou descontínua, dependendo da interação do polímero (que define o “microgel”) com o solvente. O modelo também permitiu calcular a mobilidade como função da carga efetiva do polímero, em boa concordância com os resultados experimentais.

Finalmente, no segundo semestre de 2002 publiquei mais um artigo de simulação, “Reply to Comment on Scaling behavior in explosive fragmentation” [63], em colaboração com docentes da UFC. Neste trabalho reafirmo as observações publicadas no meu artigo de 2000 [20], em função do artigo proposto por Åström *et al.* [64], onde estes autores contestaram as conclusões da Ref. [20]. Assim, mediante rigorosas simulações em Dinâmica Molecular do modelo de fragmentação que propus em 2000, fui capaz não só de mostrar que tal contestação não se aplicava ao meu modelo, como também propor uma nova forma de escala para a função distribuição da massa dos fragmentos.

#### **6.3.4 Período entre 2003 e 2006**

Após meu retorno para o Ceará em Fevereiro de 2003, meu trabalho de pós-doutorado, “Phase transitions and tricriticality in the lattice restricted primitive model supplemented by short-range interactions” [19] foi publicado. Na seção 2 da minha formação discuti este trabalho, não cabendo maiores comentários neste ponto.

Dando continuidade na pesquisa em sistemas coloidais, iniciada com o artigo de 2001 citado acima [59], juntamente com Yan Levin, publiquei em 2004 o artigo “Effective charge of colloidal particles” [27]. Utilizando simulação Monte Carlo, propus uma forma alternativa de definição da carga efetiva em sistemas contendo colóides, chamado de critério dinâmico, onde a energia total das micropartículas na solução contendo o colóide é levada em conta na determinação da condensação destas, ou seja, da carga efetiva. O método tradicionalmente usado na literatura, chamado de critério geométrico, considera apenas a distância da micropartícula à superfície do colóide, o que introduz um grau de arbitrariedade no valor a ser usado para esta distância. Com o critério dinâmico, fui capaz de mostrar que mesmo para soluções contendo micropartículas multivalentes (sem sal na solução) o comportamento verificado experimentalmente para a carga efetiva é reproduzido, o que em geral não é obtido via métodos tradicionais. Como ponto negativo neste problema, não foi possível fazer a extensão do método para soluções contendo sal, pois o critério de condensação parece ser satisfeito entre as partículas constituintes

do sal, sem que estas estejam efetivamente condensadas à superfície do colóide.

Ainda como resultado de minha interação com o Prof. Panagiotopoulos de Princeton, publiquei em 2005 o artigo “Phase diagrams in the lattice restricted primitive model: From order-disorder to gas-liquid phase transition” [65]. Neste trabalho usei simulação Monte Carlo no “ensemble” grande canônico de um gás de Coulomb em 3 dimensões, a fim de obter o diagrama de fases para o caso em que um potencial repulsivo de curto alcance é introduzido. Da mesma forma que para o caso do potencial atrativo usado na Ref. [19], a introdução de um termo repulsivo produziria um diagrama de fases bastante complexo, segundo previsões teóricas da época [66, 67]. Para o caso de um gás na rede, uma transição de fases do tipo gás-líquido poderia ser encontrada a medida que a repulsão de curto alcance fosse aumentada. Meus resultados de simulação foram capazes de reproduzir tais previsões teóricas com sucesso.

No mesmo ano de 2005, publiquei o artigo “Mass distribution of a two-dimensional fragmentation process” [68], juntamente com docentes da UFC e meu antigo aluno de iniciação científica, Luis Eduardo Araripe (naquele momento estudante de Doutorado). Neste artigo uma forma de escala para a massa dos fragmentos em função da energia fornecida ao processo foi sugerida, tal que a distribuição dos fragmentos produzidos poderia estar ligada com o processo de formação da amostra a ser fragmentada.

Finalmente, em Novembro de 2005 publiquei o artigo “Statistics vs. dynamics: two methods for calculating the effective charge of colloidal particles” [28], em colaboração com Yan Levin. Neste trabalho dei sequência ao artigo referente ao mesmo tema citado acima [27], analisando de que forma a solução linearizada utilizada na literatura poderia reproduzir o comportamento observado para a carga efetiva em sistemas coloidais. Propus que a solução linearizada, conhecida na literatura como prescrição de Alexander [69], poderia ser usada contanto que o perfil de densidade das micropartículas usado, obtido via simulação Monte Carlo, deveria levar em conta apenas as partículas situadas longe da superfície do colóide. Nesta região os efeitos de correlação eletrostática não seriam relevantes, tornando a solução linearizada aceitável. Em especial, mostrei também que usando esta prescrição para a solução linearizada, o comportamento da carga efetiva é o mesmo do critério dinâmico introduzido na Ref. [27].

Em 2006 publiquei mais um trabalho com o Prof. Panagiotopoulos, “Phase behavior of the lattice Restricted Primitive Model with nearest-neighbor exclusion” [70]. Neste trabalho, continuação da Ref. [65], propus que a repulsão tornava-se infinita, o que corresponderia a uma exclusão da ocupação simultânea de sítios de primeiros vizinhos. Neste caso, verifiquei

que a transição gás-líquido tornava-se metaestável e a transição de ordem-desordem terminava numa temperatura e densidade bem definidas. Este comportamento difere totalmente do caso contínuo, uma vez que neste a transição é sempre encontrada. Em especial, além das usuais estruturas cristalinas do tipo CsCl e NaCl [66, 67], encontrei uma nova estrutura do tipo CuAu, a exemplo de resultados experimentais recentes [71].

Ainda em 2006, em colaboração com Yan Levin, publiquei o artigo “Smoluchowski equation and the colloidal charge reversal” [72], onde investiguei o comportamento do chamado potencial zeta, definido como o valor do potencial eletrostático na região que delimita os íons livres daqueles que estão ligados ao colóide eletrostaticamente, em soluções contendo colóides e um sal do tipo 3:1 (os cátions do sal têm valência +3, enquanto os ânions têm valência -1). Utilizando simulação Monte Carlo e permitindo que a posição da região que delimita os íons que estão adsorvidos à superfície do colóide, chamada na literatura de região de “shear-plane”, daqueles que estão livres (posição onde o potencial zeta é calculado) fosse localizada numa distância de um diâmetro de contração da superfície do colóide, quando o usual é tomar distâncias menores, tal que as flutuações térmicas fossem consideradas, verifiquei a chamada inversão de carga do colóide. Além disto, observei a existência de uma densidade de carga crítica para o colóide, a fim de que tal fenômeno fosse observado.

### **6.3.5 Período entre 2007 e 2010**

Após a minha redistribuição para a UFPel em Julho de 2006, já em 2007 publiquei o artigo “Flexible polyelectrolyte conformation in the presence of oppositely charged surfactants” [30], em colaboração com o docente da UFPel Paulo Sérgio Kuhn. Neste trabalho, utilizando a teoria Debye-Hückel-Bjerrum-Manning [73, 74] para a descrição das interações eletrostáticas, juntamente com o modelo de elasticidade de Flory [75, 76], propus um modelo estatístico para a formação dos complexos formados por polieletrólitos e surfactantes, a fim de investigar o efeito da interação hidrofóbica entre os monômeros neutros das caudas dos surfactantes sobre a conformação dos polieletrólitos. Experimentos [77, 78, 79, 80, 81, 82] mostram que para certos tipos de surfactantes, como por exemplo o CTAB (do inglês, *cetyl trimethyl ammonium bromide*), cadeias de DNA sofrem uma transição discreta de uma conformação estendida para uma compactada, quando da adição de pequenas quantidades destes surfactantes. A característica marcante destes trabalhos é a forte dependência da interação hidrofóbica entre as caudas do

surfactante sobre a transição [77]. De fato, fui capaz de mostrar que mediante a descrição da interação hidrofóbica como uma atração efetiva entre as caudas dos surfactantes condensados ao polieletrólito, no espírito da teoria de van der Waals, podemos controlar a transição discreta através da intensidade desta atração hidrofóbica [30].

Em 2009 publiquei a extensão deste modelo para o caso com sal na solução, como por exemplo KBr ou NaCl, através do artigo “Effect of monovalent salt on the conformation of polyelectrolyte-surfactant complexes” [31], novamente em colaboração com Paulo Sérgio Kuhn. A maior dificuldade neste caso é que a adição do sal reduz a concentração crítica de micelas (ou cmc) drasticamente [83]. Assim, a transição observada no caso sem sal pode ocorrer na mesma região do cmc. Devemos, portanto, incluir a formação de micelas no modelo. Foi o que fiz, ao incluir a micelização no modelo introduzido na Ref. [30]. Como resultado, observei que a adição de sal faz com que o complexo DNA-surfactante volte a ficar estendido, de forma descontínua, em concordância com os resultados experimentais [84].

Neste período voltei a estudar sistemas coloidais, tanto do ponto de vista computacional como teórico. Em 2008 publiquei o artigo “Colloidal charge reversal: Dependence on the ionic size and the electrolyte concentration” [85] em colaboração com Yan Levin. Neste trabalho, utilizei simulação Monte Carlo e argumentos de escala para analisar a reversão de carga em soluções contendo colóides e sal multivalente, através da obtenção da densidade de carga crítica do colóide (a partir da qual a reversão de carga é observada) em função da concentração e tamanho dos íons do sal. A reversão de carga era caracterizada pela inversão de sinal do potencial zeta, método desenvolvido na Ref. [72]. A partir dos resultados de simulação, foi possível verificar que a densidade de carga crítica do colóide é reduzida a medida que a concentração de sal multivalente era aumentada, com a formação de um ponto de inflexão a medida que a temperatura era reduzida (ou, de modo análogo, aumentando o comprimento de Bjerrum). De fato, para baixas temperaturas este ponto de inflexão transformava-se num platô, de tal forma que a densidade de carga crítica do colóide tornava-se independente da concentração de sal presente. Usando argumentos de escala, propus que a carga crítica do colóide (associada com a densidade de carga na reversão de carga) escalava com o inverso do quadrado do tamanho dos íons do sal. Este comportamento para a densidade de carga crítica foi observado para dois tipos de sal multivalente.

Em 2009 voltei a analisar a teoria Poisson-Boltzmann em sistemas coloidais, uma vez que naquele momento formas alternativas vinham sendo propostas, em especial aproveitando as

ideias da teoria Poisson-Boltzmann [86]. Em colaboração com Alexandre Pereira dos Santos, então estudante de Doutorado do IF-UFRGS, e Yan Levin, publiquei o artigo “Electrostatic correlations in colloidal suspensions: density profiles and effective charges beyond the Poisson-Boltzmann theory” [87]. Neste trabalho, o critério de condensação de Alexander [69] é modificado, onde ao invés de usarmos a forma tradicional, onde a densidade de contraíons na borda da cavidade onde o colóide está encerrado é utilizada no cálculo da carga efetiva, consideramos a suspensão de cargas dentro da cavidade como um gás em equilíbrio com um líquido fortemente correlacionado. Nesta abordagem, o perfil de densidades é obtido do equilíbrio entre dois regimes: um associado com a região longe da superfície do colóide, onde as correlações são fracas, e outro para a região da vizinhança do colóide, onde as correlações eletrostáticas são fortes. De fato, nesta região temos um fluido fortemente correlacionado, que pode ser estudado pela teoria de plasma de uma componente quase-2D. Com esta nova abordagem, fui capaz de obter a pressão osmótica e a carga efetiva do colóide, quando na presença de contraíons multivalentes, em boa concordância com resultados de simulação Monte Carlo [87].

Em 2010 dei continuidade à exploração dos métodos de Poisson-Boltzmann modificados, ao publicar o artigo “Colloidal charge renormalization in suspensions containing multivalent electrolyte” [88], em colaboração com Alexandre Pereira dos Santos e Yan Levin. Neste trabalho, analisei a renormalização de carga em suspensões coloidais contendo eletrólitos multivalentes e monovalentes. A abordagem teórica que propus permitiu a obtenção da carga efetiva e os perfis de densidade de contraíons e coíons, íons de carga oposta e mesma carga do colóide, respectivamente. Fui capaz de mostrar que colóides altamente carregados invertem sua carga, em função da presença de eletrólitos multivalentes na solução e da adsorção de contraíons multivalentes destes sais. Por outro lado, quando sais monovalentes são adicionados, a inversão de carga é reduzida, uma vez que parte dos contraíons multivalentes preferem ser solvatados na solução.

Neste período iniciei o estudo das propriedades de interface em eletrólitos, onde mecanismos físicos em geral desprezados quando se estuda o comportamento de “bulk”, como por exemplo a presença de cargas imagens, mostram-se importantes na determinação das propriedades do sistema. Dentre os efeitos observados, o comportamento da tensão superficial é o mais curioso. Sabe-se, por exemplo, que sais inorgânicos dissolvidos na solução aumentam a tensão superficial da interface água-ar [89, 90, 91], efeito oposto àquele observado em soluções com surfactante. Observa-se também que a dependência da tensão superficial com o tipo de cátion do sal é fraca, enquanto que o tipo de ânion utilizado tem uma forte influência [92, 93]. De

maneira geral, o aumento da tensão superficial com o aumento da concentração de sal é explicado pela equação de Gibbs-Duhem e pelo critério de estabilidade termodinâmico, que exigem que este aumento seja acompanhado por uma adsorção negativa do soluto, ou seja, uma redução de eletrólito próximo da interface água-ar. Teorias baseadas nas idéias de Debye-Hückel (DH) foram inicialmente utilizadas por Wagner [94], Onsager e Samaras (OS) [95], onde esta zona de depleção próxima à interface seria explicada por efeitos eletrostáticos produzidos pelas cargas imagens induzidas. O problema com estas teorias é que a dependência da tensão superficial com os tipos de cátions e ânions utilizados não é capturada. De fato, como os raios hidratados dos diferentes tipos de ânions é praticamente o mesmo, as teorias DH e OS predizem que a tensão superficial é completamente independente do tipo de íon, em desacordo com os experimentos e simulações computacionais. O desafio neste caso é obter uma teoria capaz de capturar as especificidades de cada tipo de íon. Recentemente, novas abordagens de cálculo foram propostas [96, 97], onde propriedades como tensão superficial e adsorção podem ser calculadas, pelo menos de forma qualitativa, até regiões de concentração em que teorias como DH e OS não são válidas.

Em 2009 iniciei o estudo deste sistema, ao publicar o artigo mais importante da minha produção intelectual, “Ions at the air-water interface: An end to a hundred-year old mystery?” [98], em colaboração com Yan Levin e o então estudante de Doutorado Alexandre P. dos Santos. Nosso objetivo era utilizar o ferramental teórico introduzido na Ref. [97] ao estudo da tensão superficial para diferentes tipos de eletrólitos. A ideia básica nesta abordagem é introduzir a mobilidade das cargas dos íons, quando estes estão próximos a uma interface água-ar. Usando como único parâmetro ajustável o raio hidratado do sódio, fomos capazes de explicar de forma teórica a tensão superficial, bem como obter o perfil de íons na região próxima à interface água-ar, em consonância com resultados experimentais [99]. Em particular, os resultados indicam que cátions alcalinos e ânions a base de fluor são fortemente hidratados, de tal forma que são repelidos da interface. Como resultado, a tensão superficial para estes sais é grande. Por outro lado, íons de bromo e iodo, bem como ânions oxigenados ( $\text{NO}_3^-$  e  $\text{IO}_3^-$ , por exemplo), não são hidratados. Como resultado, são adsorvidos na superfície, reduzindo assim a tensão superficial.

Em 2010 continuei a exploração deste estudo, no artigo “Surface tensions, surface potentials, and the Hofmeister series of electrolyte solutions” [100], em colaboração com Yan Levin e Alexandre P. dos Santos. Neste trabalho continuamos a abordagem teórica iniciada nas Refs. [97, 98], levando em conta de forma explícita o raio de hidratação dos íons e a polarizabi-

lidade dos mesmos. O modelo se mostrou capaz de ordenar de forma apropriada os valores de tensão superficial e potenciais de superfície para diferentes tipos de íons, com um ordenamento que segue a sequência do tipo Hofmeister. Em particular, ânions do tipo cosmotrópicos ( $\text{SO}_4^{-2}$ ,  $\text{OH}^-$ ), por serem altamente hidratados, são fortemente repelidos da interface água-ar. Já os ânions caotrópicos ( $\text{Cl}^-$ ,  $\text{I}^-$ ) são absorvidos na região de interface.

### 6.3.6 Período entre 2011 e 2014

Em 2012 continuei a exploração dos efeitos de superfície sobre as propriedades dos eletrólitos, através do artigo “Surface tension of electrolyte-air interface: a Monte Carlo study” [101]. Neste trabalho, em colaboração com Yan Levin e Alexandre P. dos Santos, utilizei uma abordagem de simulação Monte Carlo para introduzir uma nova forma de cálculo da tensão superficial, levando em conta os efeitos de carga imagem Kelvin e contra-imagens, presentes na geometria esférica utilizada na abordagem computacional. Fomos capazes de obter os perfis de densidade dentro da cavidade de simulação, a fim de utilizá-los no cálculo da tensão superficial de excesso. Os resultados apresentaram uma boa concordância com experimentos e modelos teóricos [102].

Neste período, iniciei a investigação de fluidos complexos confinados, cujo estudo das propriedades dinâmicas e de equilíbrio tem se intensificado nos últimos anos. Isto se deve não somente ao interesse puramente acadêmico, uma vez que o confinamento modifica profundamente as características do fluido, mas também pela crescente capacidade tecnológica de produção de estruturas na escala nanométrica, onde diversas formas de fluido podem ser confinadas. O que se observa nestes casos é que mesmo líquidos comuns como a água têm comportamentos não muito usuais, quando comparados ao comportamento no *bulk*. Anomalias na densidade e difusão anômala são alguns dos exemplos de propriedades que no *bulk* estão mais ou menos explicadas, enquanto que sob confinamento muito ainda precisa ser feito para uma explicação apropriada. Este projeto teve participação ativa de José Rafael Bordin, à época estudante de Doutorado no IF-UFRGS, cuja orientação dividi com a Profa. Marcia Barbosa.

O primeiro projeto estudado envolvia o estudo de canais iônicos, estruturas formadas por proteínas específicas fixadas a uma membrana fosfolipídica [37] e preenchidas com água, cuja função é a troca de eletrólito entre os meios exterior e interior de uma célula. Os resultados deste projeto foram publicados em 2012 no artigo “Ion fluxes through nanopores and transmembrane channels”[43], conforme discussão na seção que descreve minha experiência na coorientação

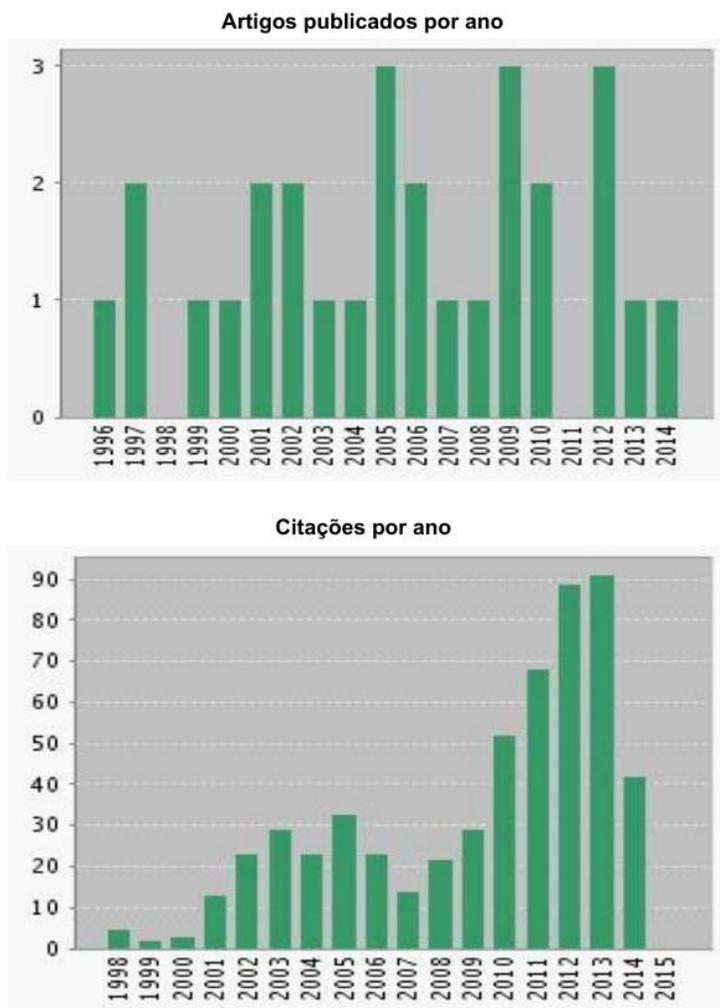
do estudante José Rafael Bordin, seção 3.2.3. O segundo projeto também foi desenvolvido na coorientação deste estudante, agora no estudo da dinâmica de fluidos modelados por potenciais de duas escalas através de nanotubos. Estes fluidos são ditos tipo água, uma vez que reproduzem os comportamentos anômalos da água em condições de *bulk* e sob condições de confinamento. Os dois primeiros problemas tratados foram discutidos na seção 3.2.3, cujos resultados foram publicados nos artigos “Diffusion Enhancement in Core-softened fluid confined in nanotubes” [45] e “Relation Between Flow Enhancement Factor and Structure for Core-Softened Fluids Inside Nanotubes” [51].

Finalizado o Doutorado do estudante José Rafael, continuei o estudo de fluidos de duas escalas sob confinamento. O problema tratado, uma continuação da Ref. [51], discutiu o efeito do confinamento sobre o fluxo de partículas através do nanotubo. Devido à presença das duas escalas no potencial, os resultados obtidos mostraram um comportamento oscilatório anômalo, caracterizado por um mínimo global no fluxo a medida que o raio do nanotubo é reduzido, o que é compatível com uma transição de um fluxo do tipo *single-file*, observado para raios pequenos, para um fluxo do tipo ordenado do fluido, a medida que raio do nanotubo aumenta. Este mínimo global é atribuído à competição entre os dois comprimentos característicos presentes no potencial de duas escalas usado. Além deste resultado, se aumentarmos ainda mais o raio do nanotubo, um segundo mínimo local aparece no fluxo do fluido, que torna-se mais evidente para baixas temperaturas. Este mínimo local deve-se à formação de uma dupla camada de partículas no fluxo de partículas através do nanotubo. Os resultados deste projeto foram publicados em 2014 no artigo “Enhanced flow of core-softened fluids through narrow nanotubes” [103].

Em 2014 retomei o estudo iniciado nas Refs. [30] e [31] para a complexação de polieletrólitos e moléculas de surfactantes. Em colaboração com Paulo S. Kuhn e Cíntia B. Passos, egressa do Curso de Mestrado em Física da UFPel e hoje doutoranda do IF-UFRGS, me propus a modelar a associação entre polieletrólitos e surfactantes catiônicos, numa solução contendo moléculas de surfactantes aniônicos. Tais soluções são chamadas de misturas cataniônicas. Usando o ferramental teórico das Refs. [30] e [31] fui capaz de obter o comportamento dos complexos polieletrólito-surfactantes catiônicos formados, em função da concentração do surfactante aniônico, para diferentes tipos destes surfactantes, definidos pelos tamanhos das caudas hidrofóbicas. Os resultados deste projeto estão no artigo “Flexible polyelectrolyte conformation in the presence of cationic and anionic surfactants”, submetido ao periódico Phys. Rev. E em 2014, ainda em debate com os avaliadores do periódico.

## 6.4 Impacto da produção intelectual

Nesta seção faço uma compilação do impacto da minha produção intelectual, medida pelos índices alcançados pelos meus 28 artigos publicados. Como índices representativos temos o número total de **561 citações**, o que produz um **h-index de 14**. Estes números foram retirados do Web of Science (webofknowledge.com), em consulta no dia 14/10/2014. Nas figuras 6.4 e 6.4 apresento a compilação destes números.



<b>Resultados encontrados</b>	<b>28</b>
Soma do número de citações	561
Soma do número de citações sem autocitações	528
Artigos que fizeram a citação	442
Artigos que citam sem autocitações	424
Média de citações por item	20.04
<b>h-index</b>	<b>14</b>

Figura 1: Quadro resumido da produção intelectual.

Título	Periódico	Ano	Volume	Página	Citações	Média/ano
Ions at the Air-Water Interface: An End to a Hundred-Year-Old Mystery?	Phys. Rev. Lett	2009	103	257802	104	17.33
Surface Tensions, Surface Potentials, and the Hofmeister Series of ...	Langmuir	2010	26	10778	68	13.60
Charge renormalization and phase separation in colloidal suspensions	Europhys. Lett.	2001	53	86	53	3.79
Density-functional theory for attraction between like-charged plates	Physica A	1999	274	433	39	2.44
Counterion correlations and attraction between like-charged mac...	Phys. Rev. E	2001	64	11804	34	2.43
Scaling behavior in explosive fragmentation	Phys. Rev E	2000	62	4742	33	2.20
Smoluchowski equation and the colloidal charge reversal	J. Chem. Phys.	2006	125	54902	29	3.22
Effective charge of colloidal particles	J. Chem. Phys.	2004	121	12100	24	2.27
Colloidal charge renormalization in suspensions containing ...	J. Chem. Phys.	2010	132	104105	21	4.20
Electrostatic correlations in colloidal suspensions: Density profiles ...	J. Chem. Phys.	2009	130	124110	20	3.33
Colloidal charge reversal: Dependence on the ionic size and the ...	J. Chem. Phys.	2008	129	124506	19	2.71
Phase transitions and tricriticality in the lattice restricted primitive ...	J. Chem. Phys.	2003	118	4993	18	1.50
Sine-Gordon mean field theory of a Coulomb gas	Phys. Rev E	1997	56	619	15	0.83
Neutral polyampholyte in an ionic solution	Phys. Rev E	1996	54	6516	15	0.79
Thermodynamics of ionic microgels	Phys. Rev E	2002	65	36143	14	1.08
Surface tension of an electrolyte-air interface: a Monte Carlo study	J. Phys. Condens. Matter	2012	24	284115	8	2.67
Diffusion enhancement in core-softened fluid confined in nanotubes	J. Chem. Phys.	2012	137	84504	7	2.33
Phase diagrams in the lattice restricted primitive model: From order-...	Phys. Rev E	2005	71	46118	7	0.70
Ion fluxes through nanopores and transmembrane channels	Phys. Rev E	2012	85	31914	6	2.00
Flexible polyelectrolyte conformation in the presence of oppositely ...	Phys. Rev E	2007	76	41807	5	0.62
Statistics versus dynamics: two methods for calculating the effective ...	J. Phys. Condens. Matter	2005	17	S3309	5	0.50
Relation Between Flow Enhancement Factor and Structure for Core-...	J. Phys. Chem. B	2013	117	7047	4	2.00
Phase behavior of the lattice restricted primitive model with nearest ...	J. Chem. Phys.	2006	124	194509	4	0.44
Reply to Comment on 'Scaling behavior in explosive fragmentation'	Phys. Rev E	2002	65	48102	4	0.31
Melting of a colloidal crystal	Physica A	1997	247	235	3	0.17
Effect of monovalent salt on the conformation of polyelectrolyte-...	Phys. Rev E	2009	79	11805	1	0.17
Enhanced flow of core-softened fluids through narrow nanotubes	J. Chem. Phys.	2014	140	194504	0	0.00
Mass distribution of a two-dimensional fragmentation process	Int. J. Mod. Phys. C	2005	16	253	0	0.00

Figura 2: Lista discriminada da produção intelectual.

## 7 Plano de Trabalho

Finalizo este memorial acadêmico apresentando meu plano de trabalho para os próximos 4 anos, de 2015 a 2018. Por que este período, uma vez que a Classe E (Professor Titular) não possui estágio probatório nem níveis horizontais de progressão?

Primeiro, porque meu projeto de pesquisa associado ao período atual da minha bolsa de produtividade em pesquisa nível 2 do CNPq, “Teoria e simulação de sistemas complexos”, encerra-se em Fevereiro de 2016. Pretendo pedir a renovação deste projeto em 2015 por mais 3 anos, a fim de em 2018 conseguir minha progressão para pesquisador em produtividade em pesquisa nível 1D do CNPq.

Em segundo lugar, porque toda minha atuação dentro da UFPel é voltada para o crescimento do Instituto de Física e Matemática, tanto a nível de Graduação como de Pós-Graduação. No caso da Graduação, nos próximos anos pretendo me envolver ainda mais com o Curso de Licenciatura em Física, uma vez que até 2016 farei parte do Colegiado deste Curso como membro Titular. No momento o Departamento de Física está preparando um projeto de criação de um Curso de Bacharelado em Física em 2016, do qual certamente terei participação ativa, dada minha formação a nível de Graduação e de Pós-Graduação. De fato, a criação deste Curso de Bacharelado é em grande parte motivada pela existência do Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel, do qual participo ativamente desde a sua criação em Dezembro de 2007. Nas duas últimas avaliações trienais da CAPES foi destacada pelas comissões de avaliação a necessidade de um Curso de Bacharelado em Física, visando uma melhor preparação dos ingressantes no Curso de Mestrado em Física da UFPel.

Com relação à Pós-Graduação, meu projeto para os próximos anos é consolidar ainda mais o Curso de Mestrado em Física, que obteve a nota 4 na última avaliação trienal 2010-2012 da CAPES. Esta consolidação será feita a partir da melhoria dos índices da avaliação do Curso, tais como o aumento do número de estudantes ingressantes, redução dos tempos de titulação, aumento da produção intelectual do corpo docente, melhoria da infraestrutura do Programa, seja na parte da pesquisa em Física teórica como no ramo experimental. Esta consolidação deverá ser sentida na próxima avaliação trienal 2013-2015, através da nota do Curso de Mestrado, que esperamos manter como 4 ou subir para a nota 5, a máxima permitida para um Curso de Mestrado no Brasil. Além disto, o Programa irá submeter uma proposta de criação de um Curso de Doutorado em Física na UFPel em 2015, com início de atividades previsto para Março de

2016. Este é o grande projeto do qual pretendo fazer parte ativamente, quer seja na Coordenação do Programa, cujo atual mandato encerra-se em Dezembro de 2015, ou como membro docente permanente do Colegiado da Pós-Graduação.

Do ponto da pesquisa em Física, meus projetos para os próximos anos estão ligados às linhas de pesquisa que definem minha atuação como pesquisador em Física. Para tanto, dividi esta seção pelas linhas que desenvolvo ao longo dos últimos anos e pretendo continuar a exploração no período deste plano de trabalho. Evidentemente, como a pesquisa é uma atividade dinâmica, estas linhas não são estanques. Novas linhas poderão ser iniciadas no decorrer dos próximos anos, muito em função da minha atuação junto ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFPel.

## **7.1 Teoria e simulação de fluidos complexos em equilíbrio**

Procuo nesta linha de pesquisa estudar o comportamento de fase de fluidos ditos complexos em equilíbrio. Estes fluidos podem ser dominados por interações de longo alcance, como por exemplo àquelas de natureza coulombiana, ou por potenciais efetivos de curto alcance com duas escalas de comprimento característicos, que competem entre si, como nos modelos tipo água usados na descrição de sistemas com alguma anomalia estrutural ou dinâmica, como é o caso da água. No caso dos sistemas dominados por interações coulombianas, os exemplos são muitos: soluções eletrolíticas formadas por sais monovalentes e multivalentes, soluções coloidais, polímeros com cargas, surfactantes iônicos, etc. Além da motivação puramente acadêmica, uma vez que tais compostos apresentam propriedades dramaticamente diferentes daquelas de um sistema cujos componentes são neutros, sua estreita relação com sistemas biológicos e as inúmeras aplicações tecnológicas envolvidas justificam o esforço dispendido. Entretanto, a despeito deste esforço, as propriedades termodinâmicas destes sistemas permanecem em grande parte controversas. Tanto é verdade, que grande parte da minha produção bibliográfica nos últimos anos tem se concentrado nesta linha de pesquisa. No caso dos sistemas dominados por potenciais de curto alcance com duas escalas de comprimento, a motivação principal é investigar a natureza das possíveis fases líquidas, e possíveis pontos críticos, encontrados para a água e sua caracterização a partir de potenciais efetivos mais simples.

Nesta linha de pesquisa tenho basicamente 4 projetos de atuação: a caracterização do equilíbrio de fases de um gás de Coulomb, o estudo de sistemas coloidais, a modelagem da associação

DNA com moléculas de surfactantes iônicos e a utilização de potenciais efetivos de duas escalas para a modelagem de fases líquidas em modelos tipo água.

### **7.1.1 Equilíbrio de fase de um gás de Coulomb**

Neste projeto utilizo as técnicas de simulação em Monte Carlo, nos diferentes ensembles a disposição, para caracterizar as diferentes fases termodinâmicas de um sistema contendo cargas elétricas, como por exemplo sais fundidos, como por exemplo a separação de fases gás-líquido, líquido-líquido e líquido-sólido. No chamado gás de Coulomb, os sistemas podem ser formados por eletrólitos simétricos, em que as cargas elétricas positivas e negativas têm o mesmo módulo da carga elétrica e o mesmo tamanho, ou assimétricos, quando o módulo da carga elétrica e os tamanhos dos íons podem ser distintos. Durante meu doutoramento e pós-doutoramento trabalhei com estes sistemas, tanto do ponto de vista teórico quanto de simulação computacional. As publicações referentes foram discutidas na seção 6.3.

Para os próximos anos, retomaremos o estudo do modelo primitivo restrito (RPM) com interações de curto alcance, iniciado no ano de 2003 na Ref. [19], para o caso do contínuo (veja discussão da seção sobre meu pós-doutorado). Recentemente, a estudante de Mestrado Luciana Araújo Velasque sob minha orientação, seção 3.2.2, observou evidências teóricas de um segundo ponto crítico associado à uma separação fluido-fluido, coexistindo com o ponto crítico gás-líquido esperado para o modelo RPM. O que pretendo agora é verificar se estes dois pontos críticos podem ser verificados através de simulação Monte Carlo. Na Ref. [19] não explorei o espaço de parâmetros de forma apropriada, pois o potencial de curto alcance utilizado tinha uma extensão fixa. A estudante Luciana verificou que a coexistência de fases é fortemente afetada quando os parâmetros que definem o potencial de curto alcance são modificados. Em especial, como um dos pontos críticos tem uma densidade crítica muito pequena, simulações para tamanhos pequenos em geral têm dificuldades para sintonizar esta região. Este trabalho deverá ser realizado em parceria com um estudante de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Física, a ser definido ainda.

Ainda no caso do contínuo, diferentes cenários podem ser testados. Por exemplo, ao invés de utilizar potenciais de curto alcance que não diferenciam as cargas, como aqueles utilizados na Ref. [19] e na Dissertação da estudante Luciana, podemos admitir que os íons de carga positiva tenham uma atração efetiva de curto alcance que compete com a repulsão eletrostática.

Ao mesmo tempo, podemos também introduzir uma repulsão efetiva de curto alcance entre os íons de carga oposta. Com isto, estas interações de curto alcance têm um efeito contrário à interação eletrostática. É esta competição que imagino ser a responsável por mudanças no diagrama de fase do gás de Coulomb. Tal potencial poderia representar o efeito do solvente em alguns compostos iônicos, em geral ignorados no modelo RPM. É com esta perspectiva que pretendo iniciar a exploração em simulação computacional destes sistemas com interações microscópicas que competem entre si.

Ainda com relação ao gás de Coulomb, pretendemos retomar a investigação do diagrama de fases do modelo primitivo restrito confinado num meio poroso. Meu objetivo neste tema é investigar o efeito da estrutura do meio poroso sobre as possíveis fases termodinâmicas de um eletrólito simétrico 1:1, quando este preenche os espaços formados por um estrutura porosa. Este projeto foi iniciado na orientação do estudante Leonardo Pinheiro, seção 3.2.2, admitindo que os obstáculos que formam o meio poroso não tenham qualquer interação com os íons do fluido, além do volume excluído oferecido por estes. Embora o estudante tenha sido capaz de obter o comportamento de fase do fluido a medida que o valor da porosidade fosse reduzido, a caracterização do ponto crítico parecia indicar uma classe de universalidade do tipo Ising, para altos valores de porosidade e com desvios significativos a medida que a porosidade era reduzida. Esta região de baixos valores de porosidade precisa de uma análise mais apurada, que é o que pretendo fazer nos próximos anos, pois um dos objetivos deste projeto é verificar a possibilidade do desaparecimento da separação gás-líquido a medida que a porosidade é reduzida, tal que o fluido é cada vez mais confinado.

### **7.1.2 Sistemas com assimetria de carga: colóides**

Neste projeto desenvolvo abordagens teóricas e de simulação computacional, em especial de Monte Carlo, a fim de entender as propriedades de soluções contendo pelo menos uma componente com carga elétrica elevada e tamanho considerável, quando comparada com as moléculas do solvente (em geral água) e eventuais sais presentes. Esta componente macromolecular é chamada de colóide. Questões como a presença ou não de uma separação de fases fluido-fluido, determinação da carga efetiva do colóide, possibilidade de atração entre colóides com cargas elétricas iguais, efeitos de carga imagem, etc, têm despertado minha atenção nos últimos anos, refletida na lista das minhas publicações neste tema, seção 6.3.

O que pretendo para os próximos anos neste projeto é aprofundar a investigação dos efeitos de carga imagem sobre as propriedades das soluções coloidais, iniciada nas Refs. [98, 100, 101] e na orientação de Mestrado do estudante Ronaldo Adriano da Silva Afonso, 3.2.2. Meu objetivo agora é investigar de que forma a descontinuidade dielétrica presente em soluções coloidais altera propriedades como o potencial zeta, carga efetiva e distribuição de micropartículas na vizinhança dos colóides. Parte desta análise foi iniciada na orientação do estudante Ronaldo. Pretendo agora introduzir efeitos como polidispersividade, onde os sais presentes na solução são formados por íons com tamanhos distintos. A ideia é analisar os efeitos de volume excluído, combinados com os de carga imagem, sobre as propriedades listadas acima. Esta etapa está sendo realizada em colaboração com o Dr. Amin Bakshandeh, que atualmente supervisiono no seu estágio de pós-doutorado na UFPel.

Ainda em sistemas com assimetria de carga, outro tema que pretendo desenvolver é o estudo da equação de estado para soluções coloidais. Se nas abordagens anteriores eu estava preocupado com as propriedades de uma única partícula coloidal dentro de uma célula, neste projeto quero investigar a equação de estado de uma solução contendo várias partículas coloidais. Pretendo obter o valor da pressão para diferentes concentrações de partículas coloidais, na presença ou não de sais na solução. Para tanto, usarei simulação MC nos ensembles canônico, grande canônico, isobárico-isotérmico e semi grande canônico. A necessidade destas diferentes técnicas se deve às dificuldades de amostragem inerentes em sistemas com alta assimetria de carga e tamanho entre os constituintes, como é o caso das soluções coloidais. Como a assimetria de carga entre os colóides e os íons na solução é grande, a maior parte dos movimentos de MC tem baixa eficiência, devido ao alto custo energético. Para contornar este problema, técnicas de movimentos de aglomerados (ou *clusters*) em geral precisam ser utilizadas. Pretendo estudar estas formas de amostragem, propondo novas e testando-as com as que existem na literatura. Propriedades como distribuição radial, calor específico e energia serão calculados para diferentes valores de assimetria de carga e tamanho.

### **7.1.3 Modelagem da associação DNA-surfactante**

Neste projeto, iniciado nas Refs. [30, 31] sob uma perspectiva puramente teórica, procuro entender os mecanismos microscópicos que governam a interação entre polieletrólitos carregados, onde o DNA é um exemplo bem característico, e moléculas de surfactantes iônicos. Estas mo-

léculas de surfactantes são formadas por cadeias com uma cabeça polar hidrofílica e uma cauda formada por monômeros hidrofóbicos. Quando colocados em solução, com ou sem sal, estas duas estruturas formam complexos, conforme discussão na seção 6.3.

Para os próximos anos, pretendo explorar a alternativa computacional de estudo do sistema DNA-surfactantes. Os complexos DNA-surfactante e as micelas formadas exclusivamente por surfactantes apresentam uma diversidade muito grande de formas, tamanhos, cargas, etc. Assim, a exploração teórica de tais estruturas torna-se extremamente difícil, senão impossível. Nas Refs. [30, 31], por exemplo, utilizei uma geometria esférica para os complexos e as micelas. Sabe-se, entretanto, que diferentes geometrias poderiam ter sido exploradas. Na presença de sal, por exemplo, micelas esféricas, cilíndricas, bi-camadas, vesículas, etc, são observadas. Assim, a alternativa computacional, seja através do método de Monte Carlo ou Dinâmica Molecular, torna-se atraente. Se nas Refs. [30, 31] me preocupei mais com os aspectos qualitativos do problema, pretendo agora explorar de forma sistemática as estruturas formadas. Questões como composição, formato e estabilidade dos complexos serão analisadas detalhadamente. Este projeto será desenvolvido em paralelo com a orientação do estudante Karlisson Rodrigo de Almeida Sousa, seção 3.2.2, que desenvolverá simulação em Dinâmica Molecular de misturas cataniônicas, ou seja, soluções contendo surfactantes catiônicos e aniônicos, com ou sem a presença de polieletrólitos. A ideia é caracterizar por completo estas misturas, com especial atenção à caracterização da concentração crítica para a formação das micelas mistas que são esperadas nestas soluções.

#### **7.1.4 Fases líquidas e criticalidade em modelos esfericamente simétricos tipo água**

Este projeto envolve a coorientação de Doutorado do estudante Leonardo Pinheiro do IF-UFRGS, que desenvolvo com a Profa. Marcia Barbosa, conforme discussão da seção 3.2.3. No desenvolvimento deste projeto, o estudante utilizará uma metodologia em simulação Monte Carlo, associada às técnicas de caracterização de fases em coexistência e determinação de pontos críticos, tais como repesagem de histogramas [14, 15] e de escala de tamanhos finitos para a região crítica [16, 17]. O modelo microscópico utilizado é definido a partir de um potencial efetivo com simetria esférica, com duas escalas de comprimento, características de um fluido no qual a dinâmica e a termodinâmica não estão associadas à escala molecular, mas a uma escala mesoscópica. Os objetivos que serão buscados pelo estudante estão discutidos na seção 3.2.3.

## 7.2 Dinâmica de fluidos complexos sob condições de confinamento

Procuro nesta linha de pesquisa entender de que forma o confinamento de fluidos complexos, carregados eletrostaticamente ou não, altera as chamadas propriedades de *bulk*. Determinação da corrente de íons em canais iônicos, mudanças na constante de difusão e estruturação em fluidos confinados, etc, são algumas das propriedades que tenho estudado nos últimos anos. A metodologia empregada para o estudo nesta linha de pesquisa envolve o uso de técnicas de simulação computacional em Dinâmica Molecular (MD) e Monte Carlo (MC), nos ensembles canônico, grande canônico e isobárico-isotérmico.

Na seção 6.3 da minha produção intelectual descrevi os projetos que desenvolvi nos últimos anos nesta linha, tais como o estudo de canais iônicos, estruturação e dinâmica de fluidos tipo água em nanotubos, etc. Para os próximos anos estes projetos poderão ser retomados, a partir do impacto das publicações derivadas desta pesquisa. Este projeto tem sido realizado em colaboração com a Profa. Marcia Barbosa do IF-UFRGS e o Prof. José Rafael Bordin da UNIPAMPA, Campus Caçapava do Sul.

### 7.2.1 Dinâmica de eletrólitos em meios porosos

Para os próximos anos pretendo iniciar um novo projeto, referente ao estudo da dinâmica de eletrólitos, monovalentes ou multivalentes, através de meios porosos. O estudo da dinâmica de partículas carregadas através de estruturas desordenadas, tais como matrizes porosas, como àquelas utilizadas na Dissertação de Mestrado do estudante Leonardo Pinheiro, seção 3.2.2, tem se intensificado na última década. Uma das razões é a ampla gama de aplicações tecnológicas possíveis em tais sistemas, como por exemplo catálise, recuperação de petróleo, processos de separação via membranas e tratamento de poluetes. Ao mesmo tempo, do ponto de vista teórico de estudo destes sistemas, a modelagem mais próxima possível da situação experimental ainda está para ser construída. A grande dificuldade neste caso refere-se não só ao caráter de longo alcance da interação coulombiana dominante, o que por si só já representa um desafio considerável, mas também a presença da matriz ou estrutura porosa introduz uma variável adicional de análise. A difusão das cargas através destas estruturas certamente dependerá da distribuição dos centros que representam a estrutura porosa, introduzindo assim o problema da reprodutibilidade dos modelos teóricos.

Meu objetivo neste projeto é a exploração da dependência da matriz porosa sobre as pro-

priedades da dinâmica dos íons através do meio poroso. Pretendo verificar de que forma a presença de carga elétrica nos centros que definem a matriz porosa impacta em propriedades como a constante de difusão dos íons, coeficiente de auto difusão, etc. Além disto, é do meu interesse verificar a dependência da estrutura de criação da matriz porosa, que no meu projeto terá uma estrutura fractal controlada, sobre as propriedades dinâmicas dos íons. Para isto, usarei um algoritmo de construção da estrutura fractal, onde a fractalidade do meio poroso é conhecida. A dinâmica será definida a partir da existência de um gradiente de pressão ou potencial químico através do meio poroso, desenvolvido através da técnica de simulação em Dinâmica Molecular Grande Canônica (GCMD), estudada na Dissertação de Mestrado do estudante José Rafael Bordin, seção 3.2.2. Quero agora aplicar esta técnica GCMD ao estudo da dinâmica de íons através do meio poroso em diferentes cenários, onde os centros do meio possuem carga elétrica de mesmo sinal ou sinal contrário aos íons do fluido, polidispersividade nos tamanhos em relação aos íons do fluido, etc. Este projeto será desenvolvido em colaboração com o Prof. Arlan da Silva Ferreira do Departamento de Física da UFPel e com o Prof. José Rafael Bordin da UNIPAMPA, Campus Caçapava do Sul.

## Referências

- [1] I. I. Gurevich, E. A. Mel'eshko, A. Muratova, B. A. Nikol'sky, V. S. Roganov, V. I. Selivanov, and B. V. Sokolov. *Phys. Lett. A*, 40:143, 1972.
- [2] R. Kodono, J. Imazato, K. Nishizawa, K. Nagamine, T. Yamazaki, D. Richter, and J. M. Welter. *Hyperfine Interact.*, 17:109, 1984.
- [3] P. W. Debye and E. Hückel. *Phys. Z.*, 24:185, 1923.
- [4] M. E. Fisher and Y. Levin. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3826, 1993.
- [5] Y. Levin and M. E. Fisher. *Physica A*, 225:164, 1996.
- [6] A. Diehl, M. C. Barbosa, and Y. Levin. *Phys. Rev. E*, 54:6516, 1996.
- [7] G. Stell. *J. Stat. Phys.*, 78:197, 1995.
- [8] A. Z. Panagiotopoulos. *Fluid Phase Equil.*, 76:97, 1992.

- [9] A. Diehl, M. C. Barbosa, and Y. Levin. *Phys. Rev. E*, 56:619, 1997.
- [10] P. Kuhn, A. Diehl, M. C. Barbosa, and Y. Levin. *Physica A*, 247:235, 1997.
- [11] A. Z. Panagiotopoulos. *Mol. Phys.*, 61:813, 1987.
- [12] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulations of Liquids*. Clarendon, Oxford, 1987.
- [13] A. Z. Panagiotopoulos and S. K. Kumar. *Phys. Rev. Lett.*, 83:2981, 1999.
- [14] A. M. Ferrenberg and R. R. H. Swendsen. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2635, 1988.
- [15] A. M. Ferrenberg and R. R. H. Swendsen. *Phys. Rev. Lett.*, 63:1195, 1989.
- [16] N. B. Wilding and A. D. Bruce. *J. Phys.: Condens. Matter*, 4:3087, 1992.
- [17] A. D. Bruce and N. B. Wilding. *Phys. Rev. Lett.*, 68:193, 1992.
- [18] A. Ciach and G. Stell. *J. Mol. Phys. Liq.*, 87:255, 2000.
- [19] A. Diehl and A. Z. Panagiotopoulos. *J. Chem. Phys.*, 118:4993, 2003.
- [20] A. Diehl, H. A. Carmona, L. E. Araripe, J. S. Andrade Jr, and G. A. Farias. *Phys. Rev. E*, 62:4742, 2000.
- [21] T. Çağın and B. M. Pettitt. *Mol. Phys.*, 72:169, 1991.
- [22] M. Lupkowski and F. van Swol. *J. Chem. Phys.*, 95:1995, 1991.
- [23] A. Papadopoulos, E. D. Becker, M. Lupkowski, and F. van Swol. *J. Chem. Phys.*, 98:4897, 1993.
- [24] G. S. Heffelfinger and F. van Swol. *J. Chem. Phys.*, 100:7548, 1994.
- [25] G. S. Heffelfinger and D. M. Ford. *Mol. Phys.*, 94:659, 1998.
- [26] A. P. Thompson, D. M. Ford, and G. S. Heffelfinger. *J. Chem. Phys.*, 109:6406, 1998.
- [27] A. Diehl and Y. Levin. *J. Chem. Phys.*, 121:12100, 2004.
- [28] A. Diehl and Y. Levin. *J. Phys.: Condens. Matter*, 17:S3309, 2005.

- [29] R. D. M. Travasso, E. C. Poiré, M. Castro, J. C. Rodriguez-Manzaneque, and A. Hernández-Machado. *PLoS ONE*, 6:e19989, 2011.
- [30] P. S. Kuhn and A. Diehl. *Phys. Rev. E*, 76:041807, 2007.
- [31] A. Diehl and P. S. Kuhn. *Phys. Rev. E*, 79:011805, 2009.
- [32] N. Jiang, P. Li, Y. Wang, J. Wang, H. Yang, and R. K. Thomas. *J. Phys. Chem. B*, 108:15385, 2004.
- [33] S. Manet, Y. Karpichev, D. Dedovets, and R. Oda. *Langmuir*, 29:3518, 2013.
- [34] F. Hofmeister. *Arch. Exp. Pathol. Pharmacol*, 24:247, 1888.
- [35] M. T. Record, W. T. Zhang, and C. F. Anderson. *Adv. Protein Chem.*, 51:281, 1998.
- [36] A. P. dos Santos, W. Figueiredo, and Y. Levin. *Langmuir*, 30:4593, 2014.
- [37] B. Hille. *Ionic Channels of Excitable Membrane*, 3rd ed. Sinauer Associates, Sunderland, Ma, 2001.
- [38] D. A. Royle and et. al. *Nature*, 280:69, 1998.
- [39] S. Bernèche and B. Roux. *Nature*, 414:73, 2001.
- [40] J. Li, D. Stein, C. McMullan, D. Branton, M. J. Aziz, and J. A. Golovchenko. *Nature*, 412:166, 2001.
- [41] Y. Levin. *Europhys. Lett.*, 76:163, 2009.
- [42] T. A. Hilder, D. Gordon, and S. H. Chung. *Nanomedicine*, 7:702, 2011.
- [43] J. R. Bordin, A. Diehl, M. C. Barbosa, and Y. Levin. *Phys. Rev. E*, 85:031914, 2012.
- [44] X. Qin, Q. Yuan, Y. Zhao, S. Xie, and Z. Liu. *Nanoletters*, 11:2173, 2011.
- [45] J. R. Bordin, A. B. de Oliveira, A. Diehl, and M. C. Barbosa. *J. Chem. Phys.*, 137:084504, 2012.
- [46] J. K. Holt, H. G. Park, Y. M. Wang, M. Stadermann, A. B. Artyukhin, C. P. Grigoropoulos, A. Noy, and O. Bakajin. *Science*, 312:1034, 2006.

- [47] M. Majumder, N. Chopra, R. Andrews, and B. J. Hinds. *Nature*, 438:44, 2005.
- [48] X. Qin, Q. Yuan, Y. Zhao, S. Xie, and Z. Liu. *Nanoletters*, 11:2173, 2011.
- [49] K. P. Lee, H. Leese, and D. Mattia. *Nanoscale*, 4:2621, 2012.
- [50] M. Whitby, M. Thanou, L. Cagnonand, and N. Quirke. *Nanoletters*, 8:2632, 2008.
- [51] J. R. Bordin, A. Diehl, and M. C. Barbosa. *J. Phys. Chem. B*, 117:7047, 2013.
- [52] R. J. Speedy. *J. Phys. Chem.*, 86:3002, 1982.
- [53] P. H. Poole, F. Sciortino, U. Essmann, and H. E. Stanley. *Nature*, 360:324, 1992.
- [54] H. E. Stanley and J. Teixeira. *J. Chem. Phys.*, 73:3404, 1980.
- [55] L. D. Calvert O. Mishima and E. Whalley. *Nature*, 310:393, 1984.
- [56] P. C. Hemmer and G. Stell. *Phys. Rev. Lett.*, 24:1284, 1970.
- [57] N. Barraz Jr., E. Salcedo, and M. Barbosa. *J. Chem. Phys.*, 131:094504, 2009.
- [58] A. Diehl, M. N. Tamashiro, M. C. Barbosa, and Y. Levin. *Physica A*, 274:433, 1999.
- [59] A. Diehl, M. C. Barbosa, and Y. Levin. *Europhys. Lett.*, 53:86, 2001.
- [60] H. Lowen, J.-P. Hansen, and P. A. Madden. *J. Chem. Phys.*, 98:3275, 1993.
- [61] A. Diehl, H. A. Carmona, and Y. Levin. *Phys. Rev. E*, 64:011804, 2001.
- [62] Y. Levin, A. Diehl, A. Fernandez-Nieves, and A. Fernandez-Barbero. *Phys. Rev. E*, 65:036143, 2002.
- [63] A. Diehl, J. S. Andrade Jr, and G. A. Farias. *Phys. Rev. E*, 65:048102, 2002.
- [64] J. A. Åström, R. P. Linna, and J. Timonen. *Phys. Rev. E*, 65:048101, 2002.
- [65] A. Diehl and A. Z. Panagiotopoulos. *Phys. Rev. E*, 71:046118, 2005.
- [66] A. Ciach and G. Stell. *Phys. Rev. Lett.*, 91:060601, 2003.
- [67] A. Ciach and G. Stell. *Phys. Rev. E*, 70:016114, 2004.

- [68] L. E. Araripe, A. Diehl, J. S. Andrade Jr., and R. N. Costa Filho. *Int. J. Mod. Phys. C*, 16:253, 2005.
- [69] D. Hone, S. Alexander, P. M. Chaikin, and P. Pincus. *J. Chem. Phys.*, 79:1474, 1983.
- [70] A. Diehl and A. Z. Panagiotopoulos. *J. Chem. Phys.*, 124:194509, 2006.
- [71] A.-P. Hynninen, M. E. Leunissen, A. van Blaaderen, and M. Dijkstra. *Phys. Rev. Lett.*, 96:018303, 2006.
- [72] A. Diehl and Y. Levin. *J. Chem. Phys.*, 125:054902, 2006.
- [73] Y. Levin. *Rep. Prog. Phys.*, 65:1577, 2002.
- [74] G. S. Manning. *J. Chem. Phys.*, 51:924, 1969.
- [75] P. J. Flory. *Principles of Polymer Chemistry*. Cornell University Press, Ithaca, New York, 1971.
- [76] P. G. de Gennes. *Scaling Concepts in Polymer Physics*. Cornell University Press, Ithaca, New York, 1979.
- [77] S. M. Mel'nikov, V. G. Sergeyev, and K. Yoshikawa. *J. Am. Chem. Soc.*, 117:2401, 1995.
- [78] A. V. Gorelov, E. D. Kudryashov, J. C. Jacquier, D. McLoughlin, and K. E. Dawson. *Physica A*, 249:216, 1998.
- [79] Y. S. Mel'nikova and B. Lindman. *Langmuir*, 16:5871, 2000.
- [80] Z. X. Wang, D. J. Liu, and S. J. Doug. *Biophys. Chem.*, 87:179, 2000.
- [81] S. Marchetti, G. Onori, and C. Cametti. *J. Phys. Chem. B*, 109:3676, 2005.
- [82] S. Marchetti, G. Onori, and C. Cametti. *J. Phys. Chem. B*, 110:24761, 2006.
- [83] S. B. Johnson, C. J. Drummond, P. J. Scales, and S. Nishimura. *Langmuir*, 11:2367, 1995.
- [84] S. M. Mel'nikov, V. G. Sergeyev, K. Yoshikawa, H. Takahashi, and I. Hatta. *J. Chem. Phys.*, 107:6917, 1997.

- [85] A. Diehl and Y. Levin. *J. Chem. Phys.*, 129:124506, 2008.
- [86] B. I. Shklovskii. *Phys. Rev. E*, 60:5802, 1999.
- [87] A. P. dos Santos, A. Diehl, and Y. Levin. *J. Chem. Phys.*, 130:124110, 2009.
- [88] A. P. dos Santos, A. Diehl, and Y. Levin. *J. Chem. Phys.*, 132:104105, 2010.
- [89] A. Heydweiller. *Ann. Physik*, 33:145, 1910.
- [90] R. Aveyard and S. M. Saleem. *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 72:1609, 1976.
- [91] P. K. Weissenborn and R. J. Pugh. *Langmuir*, 11:1422, 1995.
- [92] S. Rajamani, T. M. Truskett, and S. Garde. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 102:9475, 2005.
- [93] S. M. Kathmann, I. F. W. Kuo, and C. J. Mundy. *J. Am. Chem. Soc.*, 130:16556, 2008.
- [94] C. Wagner. *Phys. Z.*, 25:474, 1924.
- [95] L. Onsager and N. N. T. Samaras. *J. Chem. Phys.*, 2:528, 1934.
- [96] C. H. Ho, H. K. Tsao, and Y. J. Sheng. *J. Chem. Phys.*, 119:2369, 2003.
- [97] Y. Levin. *Phys. Rev. Lett.*, 102:147803, 2009.
- [98] Y. Levin, A. P. dos Santos, and A. Diehl. *Phys. Rev. Lett.*, 103:257802, 2009.
- [99] N. Matubayasi, K. Tsunemoto, I. Sato, R. Akizuki, T. Morishita, A. Matuzawa, and N. Natsukari. *J. Colloid Interface Sci.*, 243:444, 2001.
- [100] A. P. dos Santos, A. Diehl, and Y. Levin. *Langmuir*, 26:10778, 2010.
- [101] A. Diehl, A. P. dos Santos, and Y. Levin. *J. Phys.: Condens. Matter*, 24:284115, 2012.
- [102] N. Matubayasi, K. Yamamoto, S. Yamaguchi H. Matsuo, and N. Ikeda. *J. Colloid Interface Sci.*, 214:101, 1999.
- [103] J. R. Bordin, J. S. Andrade Jr, A. Diehl, and M. C. Barbosa. *J. Chem. Phys.*, 140:194504, 2014.