

Resumo

Nesta tese, o escoamento eletroosmótico em nanoporos cilíndricos é estudado, com foco em superfícies carregadas polarizáveis e não polarizáveis. O método Dissipative Particle Dynamics é empregado para modelar o comportamento hidrodinâmico do sistema. Em relação às interações eletrostáticas, a tese apresenta e discute uma adaptação do método das somas de Ewald em 3D para a geometria cilíndrica. Iniciamos a investigação do escoamento eletroosmótico em nanoporos cilíndricos com duas abordagens distintas: a primeira modela a superfície carregada com partículas pontuais uniformemente distribuídas e aplica o método de Ewald clássico, enquanto a segunda trata implicitamente a superfície carregada utilizando o método adaptado, demonstrando maior eficiência. O comportamento do escoamento eletroosmótico em nanoporos cilíndricos com eletrólitos mono e multivalentes também é discutido, apresentando os regimes onde ocorre a reversão do escoamento. Por fim, os efeitos da polarização em cilindros carregados com contrastes dielétricos é explorado, observando um aumento notável na taxa de fluxo volumétrico, especialmente em nanoporos polarizáveis estreitos.

Abstract

In this thesis, the electroosmotic flow in cylindrical nanopores is studied, with a focus on polarizable and non-polarizable charged surfaces. The Dissipative Particle Dynamics method is employed to model the hydrodynamic behavior of the system. Regarding electrostatic interactions, the thesis presents and discusses an adaptation of the 3D Ewald summation method for cylindrical geometry. We initiate the investigation of electroosmotic flow in cylindrical nanopores with two distinct approaches: the first models the charged surface with uniformly distributed point particles and applies the classical Ewald method, while the second implicitly treats the charged surface using the adapted method, demonstrating higher efficiency. The behavior of electroosmotic flow in cylindrical nanopores with mono- and multivalent electrolytes is also discussed, presenting the regimes where flow reversal occurs. Finally, the effects of polarization in charged cylinders with dielectric contrasts are explored, observing a notable increase in the volumetric flow rate, especially in narrow polarizable nanopores.