

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**UM BANCO DE DADOS DE PERFIS SIGMA ABERTO E  
EXTENSÍVEL**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**FABRÍCIO FERRARINI**

**PORTO ALEGRE, RS  
2017**



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**UM BANCO DE DADOS DE PERFIS SIGMA ABERTO E  
EXTENSÍVEL**

**FABRÍCIO FERRARINI**

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Área de Concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

**Orientador:**  
**Prof. Rafael de Pelegrini Soares, D.Sc.**

**Orientador:**  
**Prof. André Rodrigues Muniz, Ph.D.**

**PORTO ALEGRE, RS  
2017**

Ferrarini, Fabrício

Um banco de dados de perfis sigma aberto e extensível / Fabrício Ferrarini. -- 2017.

153 f.

Orientador: Rafael de Pelegrini Soares, D.Sc.

Orientador: André Rodrigues Muniz, Ph.D.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Porto Alegre, BR-RS, 2017.

1.Coefficiente de Atividade. 2.COSMO-SAC. 3.Perfil Sigma. 4.IDAC. 5.ELV. 6.ELL. I. Soares, Rafael de P., orient. II. Muniz, André R., orient. III. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Um banco de dados de perfis sigma aberto e extensível*, elaborada por Fabrício Ferrarini como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

Comissão Examinadora:

---

Cauê Torres de Oliveira Guedes Costa, D.Sc.

---

Prof. Pedro Rafael Bolognese Fernandes, D.Sc.

---

Prof. Marcelo Farenzena, D.Sc.



*“A imaginação é mais importante que a ciência, porque a ciência é limitada, ao passo que a imaginação abrange o mundo inteiro”. (Albert Einstein)*





# Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, a Deus. O que seria sem a fé que tenho nele.

Agradeço aos meus pais, Anério Vitor Ferrarini e Neiva Dolores Ferrarini, e minha tia (e segunda mãe) Marilene Lourdes Ferrarini, que não mediram esforços para ajudar a realizar meus sonhos e finalizar mais esta etapa da minha vida.

Aos professores Rafael de Pelegrini Soares e André Rodrigues Muniz, pelo grande incentivo e valiosa orientação, o que tornou possível a finalização desse trabalho.

Aos queridos colegas e amigos Anne Caroline Belusso, Guilherme Braganholo Flôres, Paula Bettio Staudt, Eduardo Ribas, Luis Fernando Baladão, Rafael Schneider, Josiel Dimas Froehlich, Luiz Felipe Kuzler Possani, Marcelo Bassani Rubleske, Lucas Guadagnin, Nicholas Camatti e Denilson de Oliveira pelo incentivo, apoio e pela amizade.

Ao meu querido Leandro Garcias, em gratidão pelo grande e contínuo apoio no dia-a-dia do meu viver e no conquistar de novos horizontes.

Aos meus amigos de longa data Daniela Ribas, Nicole Rocha, Alessandra Lavoratti, Camila Baldin, Daniela Lamers e Perci Homrich, pelas risadas e anos de amizade verdadeira.

Como poderia deixar de agradecer também as pessoas que me acolheram tão bem nessa nova fase da minha vida, meus amigos queridos Juliana Cacimiro, Patrícia Consolini, Tajh Silva, Solange Martins, Rejane Corrêa, Alexandre Wichrestink, Graziela Nardes, Aline Caetano, Rafaela Luz, Francielle Cássia, Lucas Nunes e Guto Pires.

Ao CNPq e à UFRGS que em conjunto possibilitaram a realização deste trabalho.



# Resumo

Modelos de atividade baseados em COSMO se apresentam como uma interessante alternativa para a predição do comportamento de substâncias em mistura. Estes modelos dependem apenas de informações das substâncias puras, como volume e área superficial e outra informação conhecida como perfil sigma, que podem ser determinados através de cálculos de química quântica computacional. O presente trabalho tem por objetivo criar e disponibilizar gratuitamente um banco de dados de perfis sigma para um vasto conjunto de moléculas utilizando o software GAMESS. Para a criação desse banco de dados com informações confiáveis de perfis sigma, foram testados diferentes níveis de teoria para o cálculo da estrutura eletrônica das moléculas, bem como conjuntos de bases distintos, considerando funções de polarização e efeitos difusos. Para realizar a validação dos perfis sigma obtidos, foram estimados valores de coeficientes de atividade em diluição infinita, obtidos através do modelo COSMO-SAC para um conjunto de 689 misturas, as quais não apresentam ligação de hidrogênio. A correlação com os valores de coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC) experimentais, foram construídos gráficos do logaritmo natural de IDAC experimentais e aqueles calculados pelo modelo. O tempo computacional total para obter os perfis sigma também foi avaliado com o intuito de escolher a melhor combinação de teoria e função de base. Dentre os métodos analisados, a teoria de Hartree-Fock (HF) com a função de base 6-311G(d,p) apresentou um bom custo benefício no que se refere ao tempo computacional e a precisão dos resultados frente a dados experimentais, apresentando um coeficiente de determinação superior a 0,94. A partir desses resultados, foi possível criar outros perfis sigma para um número maior de moléculas e disponibilizar essas informações em um banco de dados criado na plataforma do GitHub.

**Palavras-chave:** 1.Coefficiente de Atividade. 2.COSMO-SAC. 3.Perfil Sigma. 4.IDAC. 5.ELV. 6.ELL.



# Abstract

COSMO-based activity coefficient models are widely used to predict non-ideality in mixtures. They require only pure substance properties, such as the  $\sigma$ -profile, a representation of the screening charge density along the molecular surface. The present work aims to create and freely distribute a  $\sigma$ -profile database which can be easily extended by the community using the free GAMESS quantum chemistry (QC) package. Different combinations of QC methods and basis sets were tested in the calculation of the  $\sigma$ -profiles, aiming to define an efficient approach to create the database. The accuracy of COSMO-SAC predictions using these  $\sigma$ -profiles was evaluated by comparison with experimental infinite dilution activity coefficients and phase equilibrium diagrams. Among the studied alternatives, the Hartree-Fock method with the 6-311G(d,p) basis set led to results with a good balance between accuracy and computational cost. Our database was created using this approach, and it is already available to be used and extended by the community without requiring any commercial software.

**Key-words:** 1.Activity Coefficient. 2.COSMO-SAC. 3.Sigma Profile. 4.IDAC. 5.VLE. 6.LLE.



# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xviii</b>
<b>Lista de Códigos</b>	<b>xix</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xxv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Motivação e Objetivo . . . . .	4
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>7</b>
2.1 Equilíbrio de Fases . . . . .	7
2.2 Modelos de Gibbs de excesso . . . . .	9
2.2.1 Modelos não-preditivos . . . . .	9
2.2.1.1 Modelos de Margules . . . . .	9
2.2.1.2 Modelo de van Laar . . . . .	10
2.2.1.3 Modelo de Wilson . . . . .	11
2.2.1.4 Modelo NRTL . . . . .	12
2.2.2 Modelo UNIFAC . . . . .	12
2.2.2.1 Modelo UNIFAC Dortmund (Do) . . . . .	14
2.3 Modelos baseados na teoria COSMO . . . . .	16
2.3.1 COSMO-SAC . . . . .	16
2.3.2 Perfil Sigma . . . . .	19
2.4 Cálculos Quânticos . . . . .	21
2.4.1 Teoria dos Orbitais e a Aproximação de Hartree-Fock e derivados . . . . .	21
2.4.1.1 Correlação Eletrônica - Perturbação de Møller-Plesset . . . . .	25
2.4.2 Teoria do Funcional da Densidade . . . . .	25
2.4.3 Funções de Base - <i>Basis sets</i> . . . . .	27
2.4.4 Métodos Semi-empíricos . . . . .	30
<b>3 Metodologia</b>	<b>33</b>
3.1 Métodos para o Cálculo da Estrutura Eletrônica . . . . .	33
3.2 Pacotes de Química Quântica Computacional . . . . .	35
3.3 Substâncias Seleccionadas para o Estudo . . . . .	37
3.4 Validação dos Perfis Sigma . . . . .	37
3.4.1 Parâmetros Estimados . . . . .	38

3.5	Construção de Diagramas de Equilíbrio . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussão</b>	<b>45</b>
4.1	Avaliação das Correlações e Tempo Computacional . . . . .	46
4.2	Diagonais de IDAC . . . . .	52
4.3	Diagramas de Equilíbrio . . . . .	57
4.3.1	Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV) . . . . .	58
4.3.1.1	Hidrocarboneto + Hidrocarboneto . . . . .	58
4.3.1.2	Hidrocarboneto + Cetona . . . . .	60
4.3.1.3	Hidrocarboneto + Aldeído . . . . .	62
4.3.1.4	Hidrocarboneto + Éster . . . . .	64
4.3.1.5	Hidrocarboneto + Éter . . . . .	65
4.3.1.6	Outras Misturas . . . . .	67
4.3.2	Equilíbrio Líquido-Líquido (ELL) . . . . .	68
4.4	Banco de Dados . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Conclusões e Trabalhos Futuros</b>	<b>73</b>
5.1	Conclusões . . . . .	73
5.2	Trabalhos Futuros . . . . .	74
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>Resultados detalhados para os Coeficientes de Atividade em Diluição Infinita</b>	<b>83</b>
A.1	HARTREE-FOCK . . . . .	84
A.2	MP2 . . . . .	86
A.3	B3LYP . . . . .	88
A.4	BP86 . . . . .	90
A.5	POA1, VT-2005 e UNIFAC(D <sub>0</sub> ) . . . . .	92
<b>B</b>	<b>Dados experimentais de IDAC</b>	<b>93</b>



# Lista de Figuras

Figura 2.1	Esquema da criação da cavidade dentro do condutor, imposta pela molécula. Fonte: adaptado de Mullins et al. (2006) . . . . .	17
Figura 2.2	Decaimento de uma função de base ao longo do raio atômico, utilizando diferentes fatores de decaimento $\zeta$ e amplitudes. Adaptado de Cramer (2004). . . . .	29
Figura 3.1	Imagem ilustrativa das diagonais de IDAC utilizadas para verificação da precisão dos valores de IDAC calculados em relação aos dados experimentais. Os valores em (a) apresentam desvios maiores quando comparados aqueles ilustrados em (b), pois os primeiros estão mais distantes da diagonal. . . . .	40
Figura 3.2	Fluxograma para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor e desvios da pressão e composição do vapor de sistemas em baixas pressões. . . . .	42
Figura 3.3	Fluxograma do método tipo Rachford-Rice utilizado neste trabalho para a solução de problemas de equilíbrio líquido-líquido. . . . .	44
Figura 4.1	Perfil sigma para a molécula de acetona obtido por HF com diferentes funções de base: (a) 3-21G; (b) 3-21++G(d,p); (c) 6-311G; (d) 6-311G(d,p); (e) 6-311G++(d,p); (f) TZV; (g) TZVP. . . . .	46
Figura 4.2	Gráfico do desvio médio absoluto em relação ao valor do parâmetro $r_{avg}$ para o método de HF com a função de base 6-311++G(d,p). . . . .	48
Figura 4.3	Gráfico do desvio médio absoluto em relação aos dados experimentais para os diferentes métodos de cálculo testados. . . . .	49
Figura 4.4	Gráfico do desvio médio absoluto em relação aos dados experimentais para os diferentes métodos de cálculo testados. . . . .	50
Figura 4.5	Gráfico do tempo computacional total utilizado para os diferentes métodos de cálculo testados. . . . .	51
Figura 4.6	Gráfico do tempo computacional total utilizado para os diferentes métodos de cálculo testados. . . . .	52
Figura 4.7	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock utilizando os conjuntos de funções de base de Pople. . . . .	53
Figura 4.8	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock utilizando os conjuntos de funções de base de Ahlrichs. . . . .	54
Figura 4.9	Comparação entre as diagonais de IDAC para as diferentes teorias utilizando 6-311G(d,p) como conjunto de funções de base. . . . .	55

Figura 4.10	Comparação entre as diagonais de IDAC para diferentes métodos e modelos. . . . .	57
Figura 4.11	Perfil sigma e superfície para as moléculas de (1) n-heptano e (2) n-octano. . . . .	58
Figura 4.12	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo outras combinações de hidrocarbonetos. Dados experimentais de Góral (1994), Willman e Teja (1985), Li et al. (1972). . . . .	59
Figura 4.13	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos. Dados experimentais de ChERIC (2016a), ChERIC (2016b), Murray e Martin (1975), Nikheli (1987), Ashcroft et al. (1979). . . . .	60
Figura 4.14	Perfil sigma e superfície para as moléculas de acetona (propanona) e ciclohexano. . . . .	61
Figura 4.15	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos e cetonas. Dados experimentais de Colin et al. (1984), Campbell et al. (1986), Kudryavtseva e Susarev (1963), Peña et al. (1978). . . . .	62
Figura 4.16	Perfil sigma e superfície para as moléculas de isobutiraldeído e n-heptano. . . . .	63
Figura 4.17	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para mistura contendo hidrocarboneto e aldeído. Dados experimentais de Shealy e Sandler (1985). . . . .	63
Figura 4.18	Perfil sigma e superfície para as moléculas de acetato de metila e 1-hexeno. . . . .	64
Figura 4.19	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos e ésteres. Dados experimentais de Gmehling (1983), NAGATA e HAYASHIDA (1970), Wu e Sandler (1988). . . . .	65
Figura 4.20	Perfil sigma e superfície para as moléculas de dietil éter e n-hexano. . . . .	66
Figura 4.21	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos e éteres. Dados experimentais de Fernández et al. (1987), Treszczanowicz e Lu (1986). . . . .	66
Figura 4.22	Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo outros tipos de combinações de substâncias. Dados experimentais de Handa e Jones (1975), Bissell e Williamson (1975), Kudryavtseva e Susarev (1963), ChERIC (2016c). . . . .	68
Figura 4.23	Diagramas de equilíbrio líquido-líquido para misturas contendo dimetilsulfóxido com diferentes substâncias. Dados experimentais de Nissema (1970), Heinrich e Dojčanský (1975), Renon e Prausnitz (1968). . . . .	69
Figura 4.24	Interface do banco de dados criado no GitHub. . . . .	70
Figura 4.25	Diagonal de IDAC utilizando os perfis sigma do banco de dados, o qual foi criado no GitHub. . . . .	71
Figura A.1	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock . . . . .	84
Figura A.2	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock . . . . .	85

Figura A.3	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de MP2 . . .	86
Figura A.4	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de MP2 . . .	87
Figura A.5	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de B3LYP . . .	88
Figura A.6	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de B3LYP . . .	89
Figura A.7	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de BP86 . . .	90
Figura A.8	Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de BP86 . . .	91
Figura A.9	Comparação entre as diagonais de IDAC para os métodos POA1, VT-2005 e UNIFAC(Do) . . . . .	92

# Lista de Tabelas

Tabela 3.1	Sustâncias selecionadas para o cálculo da estrutura eletrônica envolvendo diferentes métodos quânticos. . . . .	38
Tabela 4.1	Resumo dos resultados obtidos para estimações dos valores de IDAC e tempo computacional para os modelos e métodos de química quântica testados. . . . .	47
Tabela B.1	Referências dos dados de IDAC dos diferentes sistemas utilizados para a validação dos perfis sigma. . . . .	93
Tabela B.2	Referências dos dados de IDAC dos diferentes sistemas utilizados para a construção da diagonal ilustrada na Figura 4.25. . . . .	101

# Lista de Códigos

Código 3.1	<i>Script</i> de comando utilizado no pacote GAMESS. Linhas iniciadas com “!” são comentários. . . . .	36
Código 3.2	<i>Script</i> de comando utilizado no pacote MOPAC. . . . .	36



# Lista de Símbolos

$\Delta G_{i/i}^{*res}$	Energia livre para restaurar as cargas em líquido $i$ puro	$\text{J mol}^{-1}$
$\Delta G_{i/s}^{*res}$	Energia livre para restaurar as cargas em volta de uma molécula de soluto	$\text{J mol}^{-1}$
$\Delta W$	Energia de troca	$\text{J mol}^{-1}$
$\hat{f}_i$	Fugacidade da espécie $i$ em uma mistura	Pa
$\bar{G}_i$	Energia de Gibbs parcial molar do componente $i$	$\text{J mol}^{-1}$
$C_{HB}$	Constante para ligação de hidrogênio	$\text{kCal mol}^{-1} \text{Å}^4 \text{e}^{-2}$
$\tau_{ij}$	Parâmetro dependente da temperatura do modelo NRTL	—
$A'_{ij}$	Parâmetro de interação do modelo de van Laar	—
$A_i$	Área superficial da cavidade	$\text{Å}^2$
$A_i(\sigma)$	Área superficial total de todos os segmentos	$\text{Å}^2$
$a_{\text{eff}}$	Área superficial de um segmento padrão $\sigma$	$\text{Å}^2$
$A_{ij}$	Parâmetros de interação empíricos para os modelos de Margules	—
$a_{ij}$	Parâmetro de interação do modelo de van Laar	—
$a_{mn}$	Parâmetro de interação entre os grupos funcionais no modelo UNIFAC	—
$b_{ij}$	Parâmetro de interação do modelo NRTL	—
$b_{mn}$	Parâmetro de interação entre os grupos funcionais no modelo UNIFAC	—
$c_{mn}$	Parâmetro de interação entre os grupos funcionais no modelo UNIFAC	—
$d_{mn}$	Distância entre dois segmentos	$\text{Å}$
$E[n(r)]$	Funcional da densidade eletrônica	—
$E_0$	Energia mínima	$\text{J mol}^{-1}$

$E_{\text{Ne}}[n(r)]$	Funcional de interação com o meio externo	—
$E_{\text{XC}}[n(r)]$	Funcional de troca e correlação	—
$f_{\text{decay}}$	Parâmetro empírico do modelo COSMO-SAC	3, 57
$f_{\text{pol}}$	Fator de polarização	—
$f_i$	Fugacidade da espécie $i$ pura	Pa
$G_i$	Energia de Gibbs do componente $i$	$\text{J mol}^{-1}$
$G_{ij}$	Parâmetro de interação do modelo NRTL	—
$g_{ij}$	Parâmetros de energia característicos das interações do modelo de Wilson	—
$H$	Operador Hamiltoniano	—
$H_e$	Operador Hamiltoniano eletrônico	—
$J[n(r)]$	Funcional da repulsão eletrostática	—
$K_i$	Razão entre coeficientes de atividade	—
$M_A$	Razão entre as massas do núcleo e elétron	—
$n(r)$	Densidade eletrônica	—
$n_i$	Número de mols da espécie $i$	mol
$n_i$	Número de segmentos $p_s(\sigma_n)$	—
$n_i(\sigma)$	Número total de segmentos com densidade de carga $\sigma$	—
$P$	Pressão	Pa
$p_s(\sigma_n)$	Perfil sigma	—
$P_i^{\text{sat}}$	Pressão de saturação da espécie $i$	Pa
$q_i$	Parâmetros de área superficial normalizada	—
$Q_k$	Área superficial do grupo funcional $k$	$\text{m}^2$
$q_i$	Volume efetivo do modelo de van Laar	—
$R$	Constante dos gases	$8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}$
$r_i$	Parâmetro de volume normalizado	—
$R_k$	Volume do grupo funcional $k$	$\text{m}^3$
$R_{\text{AB}}$	Distância entre núcleos	Å



$r_{avg}$	Raio médio	Å
$r_{eff}$	Raio do segmento padrão	Å
$r_{iA}$	Distância entre núcleo e elétron	Å
$r_{ij}$	Distância entre elétrons	Å
$r_n$	Raio do segmento atual	Å
$T$	Temperatura absoluta	K
$T_S[n(r)]$	Funcional da energia cinética	—
$V_i$	Volume da cavidade	Å <sup>3</sup>
$v_i$	Volume molar da substância $i$ no modelo de Wilson	—
$x_i$	Fração molar da espécie $i$ na fase líquida	—
$X_m$	Fração molar - modelo UNIFAC	—
$y_i$	Fração molar da espécie $i$ na fase vapor	—
$Z_A$	Número atômico	—
$q$	Parâmetro de área	79,53 Å <sup>2</sup>
$r$	Parâmetro padrão de volume	66,69 Å <sup>3</sup>
$z$	Número de coordenação	—
$A, B, C, D$	Parâmetros de interação para a expansão de Redlich-Kister	—
$E$	Energia	J mol <sup>-1</sup>
$G$	Energia de Gibbs	J mol <sup>-1</sup>

### Letras Gregas

$\alpha, \beta, \pi$	Fases quaisquer	—
$\alpha'$	Constante para a energia de misfit	—
$\alpha(\omega), \beta(\omega)$	Funções spin	—
$\alpha_{ij}$	Parâmetro de não-randomicidade do modelo NRTL	—
$\chi$	<i>Spin</i> orbital	—
$\epsilon$	Permissividade do meio	e <sup>2</sup> mol kCal <sup>-1</sup> Å <sup>-1</sup>
$\epsilon_0$	Permissividade no vácuo	2,395 × 10 <sup>-4</sup> e <sup>2</sup> mol kCal <sup>-1</sup> Å <sup>-1</sup>

$\gamma_i$	Coeficiente de atividade do componente $i$ na mistura	—
$\Gamma_k$	Coeficiente de atividade do grupo funcional $k$	—
$\Gamma_k^{(i)}$	Coeficiente de atividade do grupo funcional $k$ quando em uma solução referência	—
$\Gamma_s(\sigma_m)$	Coeficiente de atividade para cada segmento de carga $\sigma$	—
$\Lambda_{ij}$	Parâmetro de interação do modelo de Wilson	—
$\mu_i$	Potencial químico da espécie $i$	J mol <sup>-1</sup>
$\phi_i$	Fração de volume normalizado	—
$\phi_i(r)$	Função matemática de um conjunto de bases	—
$\psi$	Função de onda	—
$\psi_e$	Função de onda eletrônica	—
$\Psi_{nm}$	Termo da dependência com a temperatura do modelo UNIFAC	—
$\sigma$	Densidade de carga	e Å <sup>-2</sup>
$\sigma_{HB}$	$\sigma$ de corte para ligação de hidrogênio	e Å <sup>-2</sup>
$\sigma_m$	Densidade de carga média de dado segmento	e Å <sup>-2</sup>
$\Theta$	Fração de superfície - modelo UNIFAC	—
$\theta_i$	Fração de área normalizada	—
$\zeta$	Termo de decaimento exponencial	—

### Sobrescritos

o	Referência
$\infty$	Diluição infinita
antigo	Valor antigo da variável
atual	Valor atual da variável
C	Contribuição combinatorial
calc	Calculado
E	Propriedade em excesso
exp	Experimental

Id	Propriedade de uma solução ideal
KS	Kohn-Sham
mod	Modelo
novo	Novo valor calculado da variável
R	Contribuição residual
SG	Contribuição combinatorial de Staverman-Guggenheim

### **Siglas**

AAD	Desvios experimentais ( <i>Absolute Average Deviation</i> )
ASOG	<i>Analytical-Solution-of-Groups</i>
COSMO	<i>COnductor-like Screening MOdel</i>
COSMO-RS	<i>COnductor-like Screening MOdel for Realistic Solvation</i>
COSMO-SAC	<i>COnductor-like Screening MOdel Segment Activity Coefficient</i>
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
Do	<i>Dortmund</i>
ELL	Equilíbrio Líquido-Líquido
ELV	Equilíbrio Líquido-Vapor
GAMESS	<i>General Atomic and Molecular Electronic Structure System</i>
HF	<i>Hartree-Fock</i>
HP	Produto Hartree
IDAC	Coeficiente de atividade à diluição infinita ( <i>Infinite Dilution Activity Coefficient</i> )
MOPAC	<i>Molecular Orbital PACkage</i>
MP2	Møller-Plesset de segunda ordem
NP	Número de pontos experimentais
SAS	Superfície Acessível pelo Solvente
STO	<i>Slater Type Orbital</i>
UNIFAC	<i>UNIversal quasi-chemical Functional-group Activity Coefficients</i>



# Capítulo 1

## Introdução

Para o dimensionamento e projeto de processos de separação, é de suma importância o estudo do equilíbrio de fases das substâncias envolvidas (LEONHARD et al., 2009). Modelos de coeficiente de atividade, ou modelos de energia de Gibbs em excesso, são normalmente utilizados para prever a não idealidade da fase líquida de misturas, consequência das diferenças de interação entre as espécies envolvidas. Essa não idealidade é determinada, usualmente, através de modelos de coeficiente de atividade, tanto baseados em métodos de contribuição de grupo, UNIFAC (FREDENSLUND et al., 1975), por exemplo, quanto em métodos com parâmetros para pares de substâncias, como o de Wilson (1964), o de van Laar (1909), NRTL (RENON; PRAUSNITZ, 1968), dentre outros. Contudo, esses métodos requerem parâmetros estimados a partir de dados experimentais e, com isso, são menos práticos quando se trata de novos compostos e/ou novos grupos (MULLINS et al., 2006; XIONG et al., 2014).

Uma alternativa para caracterizar as interações moleculares e, por fim, quantificar a não idealidade de misturas, é o uso de métodos de solvatação. Esses modelos permitem determinar propriedades termo-físicas sem nenhum dado experimental, sendo baseados em mecânica quântica computacional (MULLINS et al., 2006). O COSMO-SAC, proposto por Lin e Sandler (2002), é um modelo de energia de Gibbs em excesso baseado em cálculo de química quântica e foi inspirado pelo modelo COSMO-RS, desenvolvido por Klamt (1995). No COSMO-SAC, cada molécula é descrita por uma superfície de densidade de carga em sua volta, determinada pelo método COSMO.

Essa densidade é representada através de uma função denotada como perfil sigma, a qual conecta uma porção da superfície molecular à sua respectiva densidade

de carga. Para o cálculo do coeficiente de atividade, apenas é necessário o perfil sigma e a superfície e volume de van der Waals de cada molécula. Isso faz com que o modelo seja genuinamente preditivo (BOUILLOT et al., 2013), dependendo apenas de um pequeno conjunto de parâmetros universais. Contudo, para obtenção das informações necessárias (citadas anteriormente) de cada substância, faz-se necessário o cálculo e a obtenção da estrutura eletrônica de cada molécula.

Alguns trabalhos apresentados na literatura visam testar a influência de diferentes métodos de química computacional para a obtenção da estrutura eletrônica. São amplamente explorados os métodos que se baseiam em encontrar uma solução aproximada para a equação de Schrödinger (1926), como a aproximação de Hartree-Fock (HF) e métodos que introduzem efeitos de correlação eletrônica à aproximação de HF, como a teoria da perturbação de Møller-Plesset (MP) (MØLLER; PLESSET, 1934). O objetivo dos métodos de HF e seus derivados é obter uma expressão para a função de onda ( $\psi(r)$ ), com a qual é possível obter qualquer propriedade mensurável do sistema (LEVINE, 2000; SZABO; OSTLUND, 1996). Uma maneira alternativa àquelas supracitadas é a teoria do funcional da densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*). Ela consiste em determinar uma função chamada de densidade eletrônica ( $n(r)$ ), através da qual obtêm-se as propriedades desejadas para o sistema estudado (KOHN; SHAM, 1965).

Não existem soluções analíticas exatas para  $\psi(r)$  e  $n(r)$  e estas são tipicamente expressas usando combinações lineares de funções matemáticas. A esse conjunto de funções dá-se o nome de funções de base (ou, do inglês, *basis sets*). No que diz respeito ao cálculo de estrutura eletrônica de moléculas, é conveniente utilizarem-se combinações de funções gaussianas, pois estas são capazes de descrever o decaimento da energia conforme ocorre um aumento da distância em relação ao centro, ou seja, com o distanciamento de núcleo. Existem diferentes funções de bases e podem ser classificadas conforme o número de funções gaussianas usadas para descrever cada orbital atômico e também podem incluir funções adicionais para descrever efeitos de polarização e difusos.

Existem diversas opções de pacotes de química quântica computacional disponíveis para a execução destes cálculos. Dentre os mais conhecidos e utilizados estão

---

o Gaussian (FRISCH et al., 2009), Turbomole (AHLRICHS et al., 1989), Dmol<sup>3</sup> (DELELEY, 2000) e GAMESS (SCHMIDT et al., 1993), sendo o último de distribuição livre e gratuita para o meio acadêmico incluindo códigos fonte.

Cada método de mecânica quântica e suas variantes possuem suas particularidades e envolvem diferentes tipos de aproximações. A precisão na predição trazida por esses métodos e o custo computacional associado dependem fortemente nos detalhes da teoria utilizada e na qualidade das funções de base empregadas em cada expansão. Conseqüentemente, espera-se que essas configurações afetem o cálculo dos perfis sigma e, conseqüentemente, a predição dos coeficientes de atividade e propriedades relacionadas.

Considerando essa grande variedade em metodologia de química quântica, alguns estudos apresentados na literatura têm avaliado a influência das diferentes técnicas usadas para obter-se a estrutura eletrônica em modelos baseados na teoria COSMO. Franke e Hannebauer (2011) testaram diferentes métodos de mecânica quântica computacional em conjunto com o modelo COSMO-RS (KLAMT, 1995) para estimar valores de coeficientes de atividade em diluição infinita (*IDAC - Infinite Dilution Activity Coefficient*). A precisão de cada predição foi verificada por meio da comparação com dados experimentais para um conjunto de 70 espécies, totalizando 375 dados de IDAC. As geometrias moleculares de equilíbrio para as moléculas foram previamente determinadas no vácuo (na ausência dos efeitos do COSMO). Os autores concluíram que os métodos quânticos tem influência nas predições do modelo COSMO-RS e obtiveram MP2 como melhor método.

Chen et al. (2016) conduziram um estudo similar utilizando o modelo COSMO-SAC original (LIN; SANDLER, 2002). Os autores também introduziram uma modificação a este modelo (chamado de COSMO-SAC revisado). Foram propostas diferentes expressões para a dependência com a temperatura e para as interações intermoleculares do tipo ligação de hidrogênio. Para isso, novos parâmetros foram introduzidos para melhor descrever esse tipo de interação. Além de valores de IDAC, outras propriedades, como equilíbrio líquido-vapor e líquido-líquido, foram preditas. Novamente, a geometria de equilíbrio para cada espécie envolvida foi obtida no vácuo. Nesse estudo, os autores também utilizaram perfis sigma do banco de dados da Virginia Tech

(VT-2005) (MULLINS et al., 2006) e obtiveram a mesma informação utilizando diferentes métodos de química quântica computacional. Concluiu-se que o modelo COSMO-SAC original é sensível ao método quântico utilizado e foi observado que o modelo revisado não possui sensibilidade significativa a isso. Isso permite que esse modelo utilize método de química quântica de baixa qualidade, sem haver perda da qualidade da predição.

Como mencionado anteriormente, existem bancos de dados contendo informações de perfis sigma disponíveis para o acesso do meio acadêmico, como o VT-2005, pertencente ao grupo da Virginia Tech (MULLINS et al., 2006; MULLINS et al., 2008), e o banco de dados de Dortmund (DDB, 2017). Porém, os perfis sigma destes bancos de dados foram obtidos através de pacotes de química computacional cuja licença é paga: Dmol<sup>3</sup> (DELLEY, 2000), para o VT-2005 e Gaussian (FRISCH et al., 2009), para o banco de dados de Dortmund. Assim, para que esse banco possa ser expandido com informações de outros pesquisadores, haverá a necessidade da compra do mesmo pacote utilizado para contribuir com a ampliação das informações lá contidas.

## 1.1 Motivação e Objetivo

A partir do que foi explanado, o presente trabalho tem por objetivo principal determinar o perfil sigma para um grande número de espécies químicas distintas e armazená-los em um banco de dados. Mesmo já existindo banco de dados com esse tipo de informação, a principal motivação deste estudo é disponibilizar essas informações de maneira livre e, para isso, foram utilizadas ferramentas computacionais gratuitas, como o pacote de química quântica GAMESS (SCHMIDT et al., 1993), com o intuito de que esse banco de dados possa ser expandido mais facilmente pela comunidade acadêmica.

Para a criação de um banco de dados consistente e de forma eficiente, a influência de diferentes teorias e conjuntos de funções de base para o cálculo da estrutura eletrônica foi avaliada. Algumas modificações na metodologia, com relação aos trabalhos citados, foram feitas como, por exemplo, realizar o processo de determinação da geometria de equilíbrio considerando os efeitos de solvatação do COSMO. Os parâmetros



---

universais do modelo foram re-estimados. Foram avaliados os tempos computacionais e estimados valores de IDAC para um conjunto de 689 misturas utilizando o modelo COSMO-SAC. Com isso, foi possível comparar com dados experimentais e verificar qual a melhor correlação.



# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 Equilíbrio de Fases

Para que um sistema esteja em equilíbrio térmico e mecânico, dois critérios devem ser respeitados: não deve haver gradientes de temperatura ( $T$ ) e também nenhuma diferença de pressão ( $P$ ) deve ser observada entre as fases envolvidas ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\pi$ ), como é mostrado a seguir (KORETSKY, 2013):

$$T^\alpha = T^\beta = \dots = T^\pi \quad (2.1a)$$

$$P^\alpha = P^\beta = \dots = P^\pi \quad (2.1b)$$

Caso haja um desequilíbrio térmico, por exemplo, e  $T^\alpha$  se torne maior que  $T^\beta$ , a energia fluirá da fase  $\alpha$  para a fase  $\beta$  até que o equilíbrio térmico seja reestabelecido. O mesmo se aplica para o caso onde ocorrem gradientes de pressão.

Contudo, um terceiro critério, o equilíbrio químico, deve ser respeitado para que haja a coexistência de fases. Então para que isso ocorra, é estabelecido que a energia de Gibbs total do sistema deve ser a mínima possível para dadas temperatura e pressão e essa condição é satisfeita quando a energia de Gibbs parcial molar de cada componente em cada fase é idêntico:

$$\bar{G}_i^\alpha = \bar{G}_i^\beta = \dots = \bar{G}_i^\pi \quad (2.2)$$

A energia de Gibbs parcial molar é uma quantidade muito importante no que se refere ao equilíbrio químico e recebe a denotação de potencial químico ( $\mu_i$ ). A definição

de uma propriedade parcial molar é sua derivada em relação ao número de mols de dado componente ( $n_i$ ), conforme:

$$\mu_i = \bar{G}_i = \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_{j \neq i}} \quad (2.3)$$

A partir disso, pode-se reescrever a Equação 2.2 da seguinte forma:

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta = \dots = \mu_i^\pi \quad (2.4)$$

Lewis (1901) propôs uma nova propriedade termodinâmica, conhecida como fugacidade, a qual possui unidade de pressão, e está definida da seguinte forma:

$$\mu_i - \mu_i^\circ \equiv RT \ln \left( \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^\circ} \right) \quad (2.5)$$

onde  $\hat{f}_i$  é a fugacidade do componente  $i$  quando em mistura,  $\hat{f}_i^\circ$  representa essa mesma propriedade em um estado de referência e  $R$  é a constante universal dos gases.

Contudo, o estado de referência (notado por  $^\circ$ ) é arbitrário, e pode ser escolhida qualquer condição. Por conveniência, é usual determinar esse estado tanto como o de um gás ideal (em conjunto com equações de estado) como de uma solução ideal (para modelos de Gibbs em excesso). No que se refere às soluções, a diferença de uma propriedade em seu estado real e aquele valor quando essa é tratada como ideal é conhecida com propriedade em excesso, como ilustrado a seguir:

$$\bar{G}_i^E = \bar{G}_i - \bar{G}_i^{Id} = \mu_i - \mu_i^{Id} \equiv RT \ln \left( \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^{Id}} \right) \quad (2.6)$$

Outra maneira de representar a Equação 2.6, a qual permite quantificar a não idealidade da fase líquida, é fazendo o uso do coeficiente de atividade ( $\gamma_i$ ), cuja definição é a relação entre a fugacidade do componente  $i$  em mistura e essa mesma propriedade quando é feita a consideração de solução ideal. Assim, a Equação 2.6 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\bar{G}_i^E = \left( \frac{\partial G^E}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_{j \neq i}} \equiv RT \ln (\gamma_i) \quad (2.7)$$

Existem diferentes modelos para o cálculo do coeficiente de atividade apresentados por diversos autores. A próxima seção tem por objetivo apresentar alguns dos principais modelos que são conhecidos na literatura.

## 2.2 Modelos de Gibbs de excesso

### 2.2.1 Modelos não-preditivos

#### 2.2.1.1 Modelos de Margules

A expansão de Redlich-Kister é uma forma empírica para a estimação da energia de Gibbs em excesso ( $g^E$ ) para uma mistura binária. A partir da truncagem de determinados números de termos dessa expressão, é possível obterem-se alguns modelos matemáticos para a estimativa do coeficiente de atividade. Esse modelo está apresentado a seguir:

$$g^E = x_1x_2 [A + B(x_1 - x_2) + C(x_1 - x_2)^2 + D(x_1 - x_2)^3 + \dots] \quad (2.8)$$

onde  $x_1$  e  $x_2$  são as frações molares dos componentes da mistura e  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  são parâmetros empíricos a serem ajustados.

A partir da truncagem até o primeiro termo da Equação 2.8, obtém-se o modelo de Margules de um parâmetro, que é dado por:

$$\frac{g^E}{RT} = Ax_1x_2 \quad (2.9)$$

onde  $A$  é uma constante empírica ajustada para uma dada temperatura. Aplicando-se a definição de propriedade parcial molar e fazendo-se o uso da Equação 2.7, obtêm-se expressões para o coeficiente de atividade para os componentes 1 e 2 de uma mistura.

$$RT \ln \gamma_1 = Ax_2^2 \quad (2.10a)$$

$$RT \ln \gamma_2 = Ax_1^2 \quad (2.10b)$$

A simetria dessas duas equações é notável, visto que, em diluição infinita, ou seja, quando as composições do primeiro ou do segundo componente tende a zero, os valores de  $\ln \gamma_i^\infty$  (coeficiente de atividade em diluição infinita do componente  $i$ ) são idênticos em ambas as relações e iguais ao parâmetro  $A$  (SMITH et al., 2007).

De uma maneira análoga, truncando-se os até o segundo termo da Expansão de Redlich-Kister, é possível obter outro modelo de Margules, porém, esse dito com dois

parâmetros.

$$RT \ln \gamma_1 = (A_{12} + 3A_{21}) x_2^2 - 4A_{21} x_2^3 \quad (2.11a)$$

$$RT \ln \gamma_2 = (A_{12} - 3A_{21}) x_1^2 - 4A_{21} x_1^3 \quad (2.11b)$$

Como no modelo de Margules de um parâmetro, os valores de  $A_{12}$  e  $A_{21}$  são constantes empíricas e são ajustadas conforme a temperatura do sistema. Contudo, como  $A_{12}$  e  $A_{21}$  não necessariamente possuem valores idênticos, o modelo é assimétrico, ou seja, os valores dos coeficientes de atividade a diluição infinita para cada componente podem obter valores distintos entre si.

### 2.2.1.2 Modelo de van Laar

O modelo para a energia de Gibbs em excesso, desenvolvido por van Laar, para uma mistura binária, está mostrado na seguinte equação (PRAUSNITZ et al., 1999):

$$\frac{g^E}{RT} = \frac{2a_{12}x_1x_2q_1q_2}{x_1q_1 + x_2q_2} \quad (2.12)$$

Aplicando-se a definição mostrada na Equação 2.7, é possível chegar-se em modelos de coeficiente de atividade para os componentes 1 e 2 de uma mistura, conforme é dado por:

$$\ln \gamma_1 = \frac{A'_{12}}{\left(1 + \frac{A'_{12}x_1}{A'_{21}x_2}\right)^2} \quad (2.13a)$$

$$\ln \gamma_2 = \frac{A'_{21}}{\left(1 + \frac{A'_{21}x_2}{A'_{12}x_1}\right)^2} \quad (2.13b)$$

onde  $A'_{12} = 2q_1a_{12}$  e  $A'_{21} = 2q_2a_{12}$ .

As Equações 2.13a e 2.13b são comumente usadas para representar os coeficientes de atividade. Estas equações incluem dois parâmetros empíricos,  $A'_{12}$  e  $A'_{21}$ . A razão destes dois parâmetros é igual à razão dos volumes efetivos  $q_1$  e  $q_2$ , e que também se iguala à relação entre  $\ln \gamma_1^\infty$  e  $\ln \gamma_2^\infty$ . Além disso, mesmo que o modelo de Gibbs em excesso apresente um terceiro parâmetro de interação entre as substâncias ( $a_{12}$ ), este não é possível de ser determinado empiricamente.

### 2.2.1.3 Modelo de Wilson

Um modelo para o cálculo da energia livre de Gibbs em excesso foi apresentado por Wilson (1964). Essa expressão apresenta algumas vantagens, como, por exemplo, o fato de que podem ser ajustados  $n(n - 1)$  parâmetros de interação binária em um sistema de  $n$  componentes. A maior desvantagem apresentada neste modelo é não conseguir prever equilíbrios formados entre fases líquidas. O modelo de Wilson está mostrado na equação que segue.

$$\frac{g^E}{RT} = - \sum_i x_i \ln \left( 1 - \sum_j x_j \Lambda_{ji} \right) \quad (2.14)$$

onde  $x_i$  é a fração molar do componente  $i$  e  $\Lambda_{ji}$  são parâmetros ajustáveis (sendo  $\Lambda_{ii} = 0$  e  $\Lambda_{ij} \neq \Lambda_{ji}$ ).

Aplicando a derivada parcial molar, obtém-se uma expressão para o cálculo dos coeficientes de atividade, como mostrado na equação abaixo:

$$\ln \gamma_k = 1 - \ln \left( \sum_j x_j \Lambda_{kj} \right) - \sum_i \frac{x_i \Lambda_{ik}}{\sum_j x_j \Lambda_{ij}} \quad (2.15)$$

Para um sistema binário, a expressão Equação 2.15 pode ser reescrita através das seguintes equações, mostradas abaixo.

$$\ln \gamma_1 = - \ln(1 - \Lambda_{21}x_2) + x_2 \left[ \frac{x_2 \Lambda_{12}}{1 - \Lambda_{12}x_2} - \frac{x_1 \Lambda_{21}}{1 - \Lambda_{21}x_2} \right] \quad (2.16a)$$

$$\ln \gamma_2 = - \ln(1 - \Lambda_{12}x_1) - x_1 \left[ \frac{x_2 \Lambda_{12}}{1 - \Lambda_{12}x_2} - \frac{x_1 \Lambda_{21}}{1 - \Lambda_{21}x_2} \right] \quad (2.16b)$$

No modelo de Wilson, o parâmetro  $\Lambda_{ji}$  possui dependência com a temperatura, conforme é mostrado nas equações abaixo:

$$\Lambda_{ji} = 1 - \left( \frac{v_j}{\hat{v}_i} \right) \exp \left( - \frac{g_{ji} - g_{ij}}{kT} \right) \quad (2.17a)$$

$$\Lambda_{ij} = 1 - \left( \frac{v_i}{\hat{v}_j} \right) \exp \left( - \frac{g_{ij} - g_{ji}}{kT} \right) \quad (2.17b)$$

onde  $v_j$  e  $v_i$  são os volumes molares das substâncias  $j$  e  $i$ , respectivamente e  $g_{ji}$  e  $g_{ij}$  são parâmetros de energia característicos das interações entre  $j$  e  $i$ .

### 2.2.1.4 Modelo NRTL

O modelo NRTL (do inglês *nonrandom, two-liquid*), para uma mistura multicomponente, apresentado por Renon e Prausnitz (1968), é dado por:

$$\frac{g^E}{RT} = \sum_i x_i \frac{\sum_j \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k G_{ki} x_k} \quad (2.18)$$

O valor do parâmetro  $G_{ji}$  pode ser obtido através das seguintes expressões:

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji}) \quad (2.19a)$$

$$\tau_{ji} = \frac{b_{ji}}{RT} \quad (2.19b)$$

Aplicando-se a definição de propriedade parcial molar, consegue-se uma expressão para o coeficiente de atividade para dado componente em uma mistura com duas ou mais substâncias envolvidas. Os parâmetros  $\alpha_{ji}$  e  $b_{ji}$  representam, respectivamente, os parâmetros de não-randomicidade e de interação do modelo NRTL.

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k G_{ki} x_k} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k G_{kj} x_k} \left( \tau_{ij} - \frac{\sum_l x_l \tau_{lj} G_{lj}}{\sum_k G_{kj} x_k} \right) \quad (2.20)$$

Diferentemente dos modelos anteriormente citados, este modelo é capaz de prever o equilíbrio líquido-líquido. O modelo, simplificado para uma mistura de apenas dois componentes, pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left( \tau_{21} \frac{\exp(-2\alpha_{12}\tau_{21})}{[x_1 + x_2 \exp(-\alpha_{12}\tau_{21})]^2} + \tau_{12} \frac{\exp(-\alpha_{12}\tau_{12})}{[x_2 + x_1 \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})]^2} \right) \quad (2.21a)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left( \tau_{12} \frac{\exp(-2\alpha_{12}\tau_{12})}{[x_2 + x_1 \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})]^2} + \tau_{21} \frac{\exp(-\alpha_{12}\tau_{21})}{[x_1 + x_2 \exp(-\alpha_{12}\tau_{21})]^2} \right) \quad (2.21b)$$

## 2.2.2 Modelo UNIFAC

Fredenslund et al. (1975) explicam que a metodologia UNIFAC (*Universal Quasi-chemical Functional Activity Coefficient*) é utilizável para uma vasta quantidade de misturas exibindo desvios positivos ou negativos da lei de Raoult. O método UNIFAC



segue o modelo *Analytical-Solution-of-Groups*, ou ASOG, de Derr e Deal (1969), onde os coeficientes de atividade em misturas são relacionados às interações entre os grupos estruturais. Além disso, o modelo UNIFAC pode ser usado para prever os coeficientes de atividade para os componentes em misturas binárias desconhecidas que fazem parte de um determinado sistema multicomponente. Tais previsões podem ser utilizadas na geração de parâmetros binários em qualquer modelo de excesso de Gibbs.

Conforme Pöllmann e Löbbecke (1996), o logaritmo do coeficiente de atividade em uma mistura pode ser calculado via o somatório de duas contribuições: a combinatorial, devido aos diferentes tamanhos e formatos das moléculas, e a residual, que representa a contribuição via interação energética entre as moléculas, conforme:

$$\ln\gamma_i = \ln\gamma_i^C + \ln\gamma_i^R \quad (2.22)$$

onde  $\ln\gamma_i^C$  é o termo combinatório e  $\ln\gamma_i^R$  é o termo residual.

Todavia, Gmehling (1995) cita que resultados não satisfatórios são obtidos para sistemas cujos componentes detêm tamanhos bem diferentes de moléculas, bem como para coeficientes de atividade à diluição infinita. Assim, Muzenda (2013) afirma que diferentes modificações foram propostas para os termos combinatorial e residual, bem como uma introdução da dependência da temperatura nos parâmetros de interação dos grupos funcionais.

Nagata e Koyabu (1981) propuseram modificações apenas no termo residual adicionando um termo tipo Flory-Huggins na relação de  $\ln\gamma_i^R$ . Além disso, alteraram a relação com a fração de área superficial, utilizada originalmente, para uma dependência da fração molar do grupo funcional, além de relacionar o parâmetro de interação dos grupos funcionais com a temperatura. Entretanto, os resultados obtidos foram similares ao UNIFAC original e não houve grande solução dos problemas encontrados no modelo original.

Larsen et al. (1987) propuseram modificações na expressão combinatorial do UNIFAC original incorporando as modificações propostas por Kikic et al. (1980) e investigadas por Alessi et al. (1982). O termo combinatorial tornou-se dependente do parâmetro de fração volumétrica do grupo funcional. O termo residual teve apenas modificação na interação com a temperatura. Como resultado, o modelo proposto ob-

teve melhorias nas predições de equilíbrios líquido-vapor (ELV).

Weidlich e Gmehling (1987) publicaram outro modelo modificado do UNIFAC original, denominando-o de UNIFAC (Dortmund). Dentre as incorporações, destacam-se: a utilização dos parâmetros de volume e área superficial de van der Waals para alcanos cíclicos e reclassificação dos álcoois em primário, secundário e terciário com seus próprios parâmetros de volume e área superficial de van der Waals; e a extensão do ajuste dos parâmetros de interação dos grupos funcionais para inclusão dos coeficientes de atividade à diluição infinita, equilíbrios líquido-vapor e entalpia em excesso, buscando aprimorar a precisão de tais parâmetros.

Mais modelos baseados originalmente no UNIFAC de Fredenslund et al. (1975) são propostos buscando, principalmente, melhorar a precisão dos parâmetros para mais tipos de equilíbrios e demais tipos de grupos funcionais. Neste trabalho, será utilizado o modelo UNIFAC (Dortmund), melhor explicado na seção a seguir.

### 2.2.2.1 Modelo UNIFAC Dortmund (Do)

Segundo Jakob et al. (2006), UNIFAC (Dortmund), ou UNIFAC(Do), é um modelo da energia livre de Gibbs em excesso ( $g^E$ ) que permite a predição dos coeficientes de atividade em sistemas não-eletrolisados em função da temperatura e composição. O coeficiente de atividade é calculado via soma da parcela combinatorial e residual, para cada componente  $i$ , via Equação 2.22.

Jakob et al. (2006) cita que a parte combinatorial independente da temperatura é calculada com os valores do volume via volume ( $R_k$ ) e a área superficial ( $Q_k$ ) de van der Waals dos grupos funcionais. Comparativamente com o modelo UNIFAC original, o UNIFAC (Do) apresenta uma mudança empírica na parte combinatorial ( $V'_i$ ) para melhor descrever os sistemas assimétricos, da seguinte forma:

$$\ln\gamma_i^C = 1 - V'_i + \ln(V'_i) - 5q_i \left[ 1 - \frac{V_i}{F_i} + \ln\left(\frac{V_i}{F_i}\right) \right] \quad (2.23)$$

$$V'_i = \frac{r_i^{3/4}}{\sum_j x_j r_j^{3/4}} \quad (2.24)$$

$$V_i = \frac{r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.25)$$

$$F_i = \frac{q_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.26)$$

onde  $V_i$  e  $F_i$  são as frações de volume e área superficial da espécie  $i$  na mistura e  $V_i'$  é o termo alterado empiricamente.

O volume e área superficial relativos de van der Waals, para cada molécula  $i$ , podem ser calculados pelas propriedades  $R_k$  e  $Q_k$  dos grupos estruturais  $k$ :

$$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k \quad (2.27)$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k \quad (2.28)$$

A parte residual pode ser obtida utilizando os coeficientes de atividade dos grupos funcionais  $k$  na mistura ( $\Gamma_k$ ) e dos mesmos quando em uma solução referência contendo apenas moléculas do tipo  $i$  ( $\Gamma_k^{(i)}$ ):

$$\ln \gamma_i^R = \sum_k v_k^{(i)} \left( \ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)} \right) \quad (2.29)$$

A dependência da composição é expressa através do termo  $\Gamma_k$ , dado por:

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left( 1 - \ln \left( \sum_m \Theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\Theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \Theta_n \Psi_{nm}} \right) \quad (2.30)$$

onde a fração de superfície ( $\Theta_m$ ) e a fração molar ( $X_m$ ) são definidas por:

$$\Theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \quad (2.31)$$

$$X_m = \frac{\sum_j v_m^{(j)} x_j}{\sum_j \sum_n v_n^{(j)} x_j} \quad (2.32)$$

Por fim, a dependência da temperatura do parâmetro de interação entre os grupos funcionais  $n$  e  $m$  é dada por:

$$\Psi_{nm} = \exp\left(\frac{-a_{nm} + b_{nm}T + c_{nm}T^2}{T}\right) \quad (2.33)$$

## 2.3 Modelos baseados na teoria COSMO

Os modelos baseados na teoria COSMO (do inglês, *COnductor-like Screening MOdel*) são fundamentados no conceito da *superfície acessível pelo solvente* de uma determinada molécula. Em outras palavras, nesses modelos, a molécula do soluto é considerada imersa em um meio dielétrico contínuo com permissividade  $\epsilon$ . Dessa maneira, o soluto gera uma cavidade no interior do dielétrico e a interface entre a cavidade e o dielétrico é normalmente conhecida como área acessível ao solvente (SAS, do inglês *solvent accessible surface*). Para qualquer distribuição de carga, a resposta de um dielétrico homogêneo contínuo consiste em uma superfície de distribuição de cargas na interface devido à polarização do meio (KLAMT; SCHÜÜRMAN, 1993).

O modelo constrói uma cavidade dentro do condutor perfeito, de acordo com o conjunto de regras e dimensões específicas dos átomos. O dipolo da molécula extrai a carga do meio condutor para a superfície da cavidade gerada, com o intuito de cancelar o campo elétrico gerado, tanto aquele no interior do condutor, quanto aquele tangente à superfície. A Figura 2.1 apresenta um esquema do que foi explanado anteriormente.

### 2.3.1 COSMO-SAC

O modelo COSMO-SAC (do inglês, *COnductor-like Screening MOdel - Segment Activity Coefficient*), proposto por Lin e Sandler (2002), é uma modificação do modelo COSMO-RS, proposto por Klamt (1995) e faz o uso de duas contribuições para o cálculo do coeficiente de atividade ( $\gamma_{i/s}$ ), como mostra a equação:

$$\ln \gamma_{i/s} = \frac{\Delta G_{i/s}^{*res} - \Delta G_{i/i}^{*res}}{RT} + \ln \gamma_{i/s}^{SG} \quad (2.34)$$

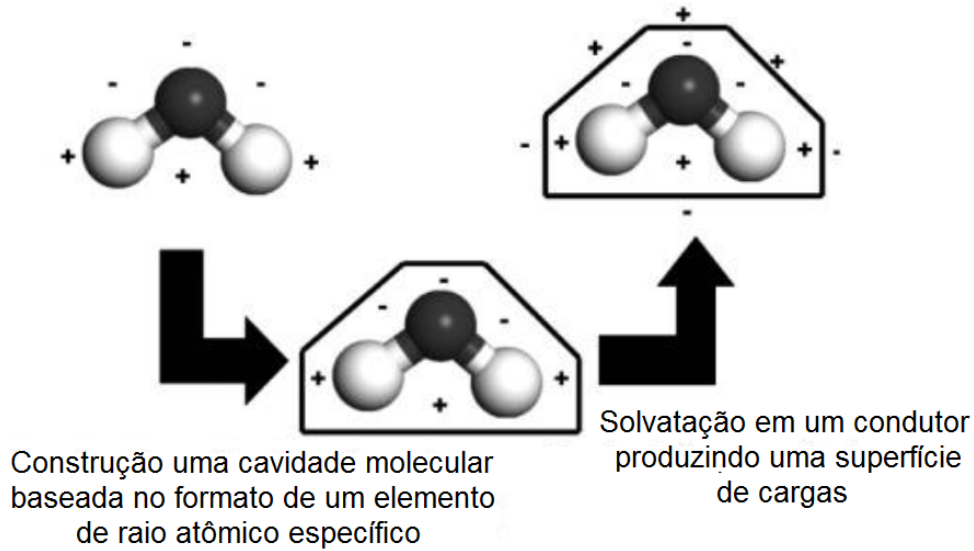


Figura 2.1: Esquema da criação da cavidade dentro do condutor, imposta pela molécula. Fonte: adaptado de Mullins et al. (2006)

O primeiro termo é definido como a diferença entre a energia livre para restaurar as cargas em volta da molécula de soluto  $S$ ,  $\Delta G_{i/s}^{*res}$ , e a energia livre para restaurar as cargas em um líquido puro  $i$ ,  $\Delta G_{i/i}^{*res}$ . O segundo termo diz respeito à contribuição combinatorial de Staverman-Guggenheim,  $\ln \gamma_{i/s}^{SG}$ , a qual melhora os cálculos da energia livre para a formação da cavidade, conforme é mostrado abaixo:

$$\ln \gamma_{i/s}^{SG} = \ln \left( \frac{\phi_i}{x_i} \right) + \frac{z}{2} q_i \ln \left( \frac{\theta_i}{\phi_i} \right) + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2.35)$$

onde  $\phi_i$  e  $\theta_i$  são as frações de volume e área normalizados, e são definidas conforme segue:

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.36a)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (2.36b)$$

$$l_i = \left( \frac{z}{2} \right) [(r_i - q_i) - (r_i - 1)] \quad (2.36c)$$

onde  $z$  é o número de coordenação,  $x_i$  é a fração molar,  $r_i$  e  $q_i$  são, respectivamente, parâmetros de volume e área superficial normalizados, e são definidos da seguinte maneira (LIN; SANDLER, 2002; MULLINS et al., 2006):

$$q_i = \frac{A_i}{q} \quad (2.37a)$$

$$r_i = \frac{V_i}{r} \quad (2.37b)$$

onde  $A_i$  e  $V_i$  são a área superficial e volume da cavidade, respectivamente, ambos obtidos por cálculo envolvendo COSMO. Já os valores de  $q$  e  $r$  são os parâmetros de área e volume, cujos valores clássicos são iguais a  $79,53 \text{ \AA}^2$  e  $66,69 \text{ \AA}^3$ , respectivamente.

A energia livre de restauração,  $\Delta G_{i/s}^{*res}$ , é definida como sendo o somatório (sobre toda a superfície de carga) do perfil sigma e o logaritmo natural dos coeficientes de atividade de cada segmento, conforme é mostrado (LIN; SANDLER, 2002; MULLINS et al., 2006):

$$\frac{\Delta G_{i/s}^{*res}}{RT} = n_i \sum_{\sigma_m} p_i(\sigma_m) \ln \Gamma_s(\sigma_m) \quad (2.38)$$

onde  $n_i$  é o número de segmentos,  $p_s(\sigma_n)$  é o perfil sigma e  $\Gamma_s(\sigma_m)$  é o coeficiente de atividade para cada segmento de carga  $\sigma$  na solução  $s$ . Esses coeficientes de atividade são definidos conforme segue:

$$\ln \Gamma_s(\sigma_m) = - \ln \left( \sum_{\sigma_n} p_s(\sigma_n) \Gamma_s(\sigma_n) \exp \left[ \frac{-\Delta W(\sigma_m, \sigma_n)}{RT} \right] \right) \quad (2.39)$$

$$\ln \Gamma_i(\sigma_m) = - \ln \left( \sum_{\sigma_n} p_i(\sigma_n) \Gamma_i(\sigma_n) \exp \left[ \frac{-\Delta W(\sigma_m, \sigma_n)}{RT} \right] \right) \quad (2.40)$$

onde  $\Gamma_i(\sigma_m)$  é o coeficiente de atividade para cada segmento de carga  $\sigma$  do líquido puro.

A energia de troca,  $\Delta W(\sigma_m, \sigma_n)$ , é a energia requerida para se obter um par  $(\sigma_m, \sigma_n)$  a partir de um par neutro, e pode ser obtida através da seguinte expressão:

$$\Delta W(\sigma_m, \sigma_n) = \left( \frac{\alpha'}{2} \right) (\sigma_m + \sigma_n)^2 + C_{HB} \max [0, \sigma_{acc} - \sigma_{HB}] \min [0, \sigma_{don} + \sigma_{HB}] \quad (2.41)$$

onde  $\alpha'$  é uma constante para a energia de misfit que é calculada a partir da área superficial de um segmento padrão como  $(0,64 \times 0,3 \times a_{\text{eff}}^{3/2}) / \epsilon_0$ , com  $\epsilon_0$  sendo a permissividade no vácuo, cujo valor é  $2,395 \times 10^{-4} \text{ e}^2 \text{ mol kCal}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ ,  $C_{HB}$  é a constante para as interações do tipo ligação de hidrogênio,  $\sigma_{HB}$  é a densidade de carga de corte para a ligação de hidrogênio,  $\sigma_{acc}$  e  $\sigma_{don}$  são o maior e menor valores, respectivamente, para  $\sigma_m$  e  $\sigma_n$ , os termos *max* e *min* indicam que os valores maiores e menores de seus argumentos são utilizados (LIN; SANDLER, 2002; MULLINS et al., 2006).

Para o cálculo do valor de  $\alpha'$ , é introduzido um fator de polarização ( $f_{\text{pol}}$ ), sendo este, um parâmetro que pode ser estimado (GERBER; SOARES, 2010) utilizando dados

experimentais de coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC - *Infinite Dilution Activity Coefficients*), equilíbrio líquido-vapor (ELV), dentre outros. A expressão é apresentada a seguir:

$$\alpha' = f_{\text{pol}} \left( \frac{0,3 \times a_{\text{eff}}^{3/2}}{\epsilon_0} \right) \quad (2.42)$$

Por fim, a expressão para o cálculo de coeficiente de atividade  $\gamma_{i/s}$  (Equação 2.34) pode ser reescrita e obtém-se a seguinte equação:

$$\ln \gamma_{i/s} = n_i \sum_{\sigma_m} p_i(\sigma_m) [\ln \Gamma_s(\sigma_m) - \ln \Gamma_i(\sigma_m)] + \ln \gamma_{i/s}^{SG} \quad (2.43)$$

### 2.3.2 Perfil Sigma

De acordo com o que é apresentado por Mullins et al. (2006), a partir das densidades de carga aparentes obtidas por meio de cálculos envolvendo o COSMO ( $\sigma^*$ ), é calculada uma média desses valores sobre um segmento de superfície circular com o intuito de obter uma nova densidade de carga efetiva, denotada agora como  $\sigma$ . Essa nova densidade de cargas é representada como a probabilidade de distribuição de um segmento superficial de determinada molécula, que tenha uma específica densidade de carga. Essa probabilidade é conhecida como perfil sigma e foi definida por Klamt (1995), para uma molécula  $i$ , da seguinte forma:

$$p_i(\sigma) = \frac{n_i(\sigma)}{n_i} = \frac{A_i(\sigma)}{A_i} \quad (2.44)$$

onde  $n_i(\sigma)$  é o número de segmentos com densidade de carga  $\sigma$  em uma única molécula  $i$  e  $A_i(\sigma)$  é definida como a área superficial total de todos esses segmentos, e é expressa como o produto de  $n_i(\sigma)$  pela área superficial de um segmento padrão,  $a_{\text{eff}}$ . Esse valor de área superficial padrão é um parâmetro ajustável e foi calibrado por Klamt et al. (1998) como sendo igual a  $7,1 \text{ \AA}^2$ .

O número total de segmentos ( $n_i$ ) e a área total da cavidade ( $A_i$ ) são calculados

por intermédio das duas definições apresentadas abaixo:

$$n_i = \sum_{\sigma} n_i(\sigma) = \frac{A_i}{a_{\text{eff}}} \quad (2.45a)$$

$$A_i = \sum_{\sigma} A_i(\sigma) \quad (2.45b)$$

O perfil sigma para uma mistura de  $n$  componentes,  $p_s(\sigma)$ , é constituído por meio de uma média ponderada de perfis sigma dos componentes puros envolvidos nessa mistura, como segue:

$$p_s(\sigma) = \frac{\sum_i x_i n_i p_i(\sigma)}{\sum_i x_i n_i} = \frac{\sum_i x_i A_i p_i(\sigma)}{\sum_i x_i A_i} \quad (2.46)$$

A densidade superficial de carga é obtida através da média das densidades de carga superficiais calculadas através do COSMO, utilizando a expressão que segue:

$$\sigma_m = \frac{\sum_n \sigma_n^* \frac{r_n^2 r_{\text{avg}}^2}{r_n^2 + r_{\text{avg}}^2} \exp\left(-f_{\text{decay}} \frac{d_{mn}^2}{r_n^2 + r_{\text{avg}}^2}\right)}{\sum_n \frac{r_n^2 r_{\text{avg}}^2}{r_n^2 + r_{\text{avg}}^2} \exp\left(-f_{\text{decay}} \frac{d_{mn}^2}{r_n^2 + r_{\text{avg}}^2}\right)} \quad (2.47)$$

onde  $\sigma_m$  é a densidade superficial de carga média em dado segmento  $m$ ,  $r_n$  é o raio do segmento (fazendo-se a consideração de que cada segmento tenha formato circular),  $r_{\text{avg}}$  é o raio médio,  $d_{mn}$  é a distância entre dois segmentos e  $f_{\text{decay}}$  é um parâmetro empírico que foi previamente calibrado por Hsieh et al. (2010), cujo valor é 3,57.

Como se pode notar, algumas informações como o perfil sigma e também o volume e área superficial das moléculas são valores necessário para a utilização do modelo COSMO-SAC. Para a determinação destes, são utilizados métodos de cálculo baseados em química quântica computacional, onde os principais serão mencionados nas próximas seções.



## 2.4 Cálculos Quânticos

Como foi citado na seção anterior, os modelos do tipo COSMO fazem o uso de informação oriunda de mecânica quântica computacional, tais como volume e área superficial molecular, além das distribuições de cargas na forma de perfis sigma.

Dentre os métodos mais conhecidos para o cálculo da estrutura eletrônica das substâncias estão os métodos baseados na aproximação de Hartree-Fock e na teoria do funcional da densidade (DFT), além de métodos semi-empíricos. Para os esse tipo de cálculo, estão disponíveis diversos pacotes de química computacional, cujos principais serão citados também nessa seção.

### 2.4.1 Teoria dos Orbitais e a Aproximação de Hartree-Fock e derivados

O método de Hartree-Fock (HF), baseia-se em obter uma solução aproximada da equação de Schrödinger (1926) para átomos e moléculas, apresentada a seguir, empregando algumas simplificações e aproximações (SZABO; OSTLUND, 1996).

$$H\psi = E\psi \quad (2.48)$$

onde  $\psi$  é a função de onda em estado estacionário,  $H$  é o operador Hamiltoniano e  $E$  representa a energia do sistema. A Equação 2.48 diz que um operador ( $H$ ) está atuando em uma função ( $\psi$ ) e, como resultado, obtém o produto entre uma constante ( $E$ ) e a função ( $\psi$ ). Portanto, esse tipo de expressão é conhecida como uma equação de autovalor (LEWARS, 2003).

O operador Hamiltoniano ( $H$ ) inclui os termos referentes a energia cinética dos elétrons, energias de atração entre núcleos e elétrons e de repulsão elétron-elétron e, no que se diz respeito a moléculas, de repulsão nuclear. A equação que representa o Hamiltoniano está mostrada a seguir:

$$H = - \sum_i^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_A^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 - \sum_i^N \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_A^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (2.49)$$

onde  $N$  e  $M$  representam o número total de elétrons e núcleos, respectivamente,  $M_A$  é a razão entre a massa dos núcleos  $A$  e a massa de um elétron,  $Z_A$  é o número atômico dos núcleos  $A$ . As distâncias elétron-elétron, núcleo-núcleo e elétron-núcleo são representadas, respectivamente, por  $r_{ij}$ ,  $r_{iA}$  e  $R_{AB}$ .

Os primeiros dois termos da expressão Equação 2.49 estão relacionados à energia cinética dos elétrons e dos núcleos, respectivamente. Os demais, representam os termos relacionados às energias potenciais, representando na ordem que são mostrados a energia de atração entre núcleo e elétron, energia de repulsão eletrônica e, por fim, a energia de repulsão entre núcleos.

Contudo, os núcleos são muito maiores e mais pesados que os elétrons, o que torna possível a consideração de que estes movem-se com velocidade muito inferior à dos elétrons. Uma boa aproximação é dizer que os elétrons movem-se em volta de um núcleo fixo, o que anula o segundo termo da Equação 2.49, pois a energia cinética dos núcleos, com essa simplificação, é negligenciável.

Com essa consideração, o último termo dessa mesma expressão é considerado como uma constante, uma vez que os núcleos constituintes da molécula são fixos, ou seja, a distância  $R_{AB}$  é constante, o que torna sua energia potencial (também) uma constante. Esse conjunto de simplificações é conhecido como *Aproximação de Born-Oppenheimer*.

Com isso, o operador Hamiltoniano resultante é chamado de *Hamiltoniano eletrônico* ( $H_e$ ), conforme é mostrado abaixo:

$$H_e = \sum_i^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_i^N \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.50)$$

e a equação de Schrödinger eletrônica fica descrita da seguinte maneira.

$$H_e \psi_e(r) = E_e \psi_e(r) \quad (2.51)$$

Contudo, a energia total do sistema é expressa através da soma de duas contribuições: a energia obtida através da equação eletrônica ( $E_e$ ) e da energia proveniente da repulsão nuclear ( $E_{RN}$ ), conforme é mostrado.

$$E_{TOTAL} = E_e + E_{RN} \quad (2.52)$$

Para a definição da função de onda para um sistema contendo  $N$  elétrons, é de suma importância definir o conceito de *orbital*, *orbital espacial*, *spin* e *spin orbital*.

Um orbital é definido como uma função de onda para uma única partícula, no caso, um elétron. Um orbital espacial ( $\psi_i(r)$ ), é uma função do vetor posição  $r$  e descreve a distribuição espacial de um elétron, tal que  $|\psi_i(r)|^2 dr$  é a probabilidade de se encontrar um elétron em um espaço infinitesimal  $dr$  em torno da posição  $r$ .

Para um elétron ser completamente definido é necessário, além de sua posição, especificar seu *spin*, onde  $\alpha(\omega)$  e  $\beta(\omega)$  representam, respectivamente, *spin up* e *spin down*. O conceito de orbital e spin, é possível definir uma outra função, conhecida como *spin orbital* ( $\chi(x)$ ), a qual inclui tanto as informações de posição, quanto as de spin de um determinado elétron  $x_i$ .

$$\chi(x) = \begin{cases} \psi(r)\alpha(\omega) \\ ou \\ \psi(r)\beta(\omega) \end{cases} \quad (2.53)$$

Para um sistema contendo apenas 1 elétron, a expressão do Hamiltoniano pode ser descrita por meio da seguinte expressão (CRAMER, 2004):

$$h(i) = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \sum_A^M \frac{Z_A}{r_{iA}} \quad (2.54)$$

Por meio de uma combinação de  $N$  operadores Hamiltonianos para sistemas monoelétrônicos  $h(i)$  (também conhecidos como orbitais de átomos hidrogenóides), é possível aproximar a expressão do Hamiltoniano de um sistema polieletrônico por intermédio da seguinte equação:

$$H = \sum_i^N h(i) \quad (2.55)$$

Desta forma, ainda precisa-se definir qual será a autofunção associada a esse operador Hamiltoniano. Como  $H$  é a simples soma de Hamiltonianos de sistemas monoelétrônicos, a função de onda ( $\psi$ ) é simplesmente o produto de funções de onda tipo *spin orbital* para cada elétron, conforme é mostrado. Essa função de onda é, então, chamada de *Produto Hartree* (HP).

$$\psi^{HP}(x_1, x_1, \dots, x_N) = \chi_1(x_1)\chi_2(x_2) \dots \chi_N(x_N) \quad (2.56)$$

Contudo, o produto Hartree não satisfaz o princípio antissimétrico, ou seja, uma função de onda deve ser antissimétrica no que se diz respeito à troca das coordenadas  $x$  de qualquer elétron (princípio de exclusão de Pauli):

$$\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = -\psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \quad (2.57)$$

Contudo, a condição de antissimetria é facilmente alcançada fazendo-se o uso de um *Determinante de Slater* para escrever a função de onda, como é mostrado a seguir para um sistema de 2 elétrons. Nesse exemplo, o determinante nada mais é que uma combinação apropriada de dois produtos Hartree, conforme é mostrado abaixo,

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_i(x_1)\chi_j(x_2) - \chi_j(x_1)\chi_i(x_2)) \quad (2.58)$$

onde o termo constante que multiplica o determinante de Slater é um fator de normalização. O sinal negativo garante que  $\psi(x_1, x_2)$  seja antissimétrica com relação à troca das coordenadas dos elétrons 1 e 2.

De uma maneira geral, para um sistema contendo  $N$  elétrons, o Determinante de Slater pode ser obtido através da seguinte expressão:

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = (N!)^{-1/2} \begin{vmatrix} \chi_i(x_1) & \chi_j(x_1) & \dots & \chi_k(x_1) \\ \chi_i(x_2) & \chi_j(x_2) & & \chi_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \chi_i(x_N) & \chi_j(x_N) & \dots & \chi_k(x_N) \end{vmatrix} \quad (2.59)$$

A partir do que foi apresentado até o momento, é possível descrever as principais considerações contidas na aproximação de Hartree-Fock. Inicialmente, ele resolve a equação de Schrödinger aproximada fazendo o uso de um operador Hamiltoniano eletrônico, obtido por meio da aproximação de Born-Oppenheimer. Além disso, o método de HF utiliza uma combinação de funções do tipo Determinante de Slater para a descrição da função de onda, o que despreza a correlação eletrônica, ou seja, cada elétron do sistema é independente entre si.

Em outras palavras, um sistema de  $N$  elétrons é descrito como a “soma” de  $N$  sistemas monoelétrônicos que se movem por volta de um campo, cujo núcleo permanece parado e num campo médio resultante da distribuição espacial de todos os outros elétrons (ALCÁCER, 2007).

### 2.4.1.1 Correlação Eletrônica - Perturbação de Møller-Plesset

Para contornar o problema da correlação eletrônica no método de Hartree-Fock, alguns métodos foram desenvolvidos. Os métodos ditos pós Hartree-Fock (HF) adicionam termos com os quais é possível obter-se o valor da energia de correlação eletrônica, que é obtida pela diferença entre a energia real do sistema e a energia de Hartree-Fock, como é mostrado abaixo.

$$E_{corr} = E - E_{HF} \quad (2.60)$$

Um dos métodos pós HF que faz a obtenção dessa energia de correlação é a *Teoria da Perturbação de Møller-Plesset* (MP) (MØLLER; PLESSET, 1934). O método parte do fato de que a energia real do sistema é dada como a soma de um determinado termo ao Hamiltoniano não perturbado ( $H^0$ ). Dessa forma, o Hamiltoniano  $H$  é constituído da seguinte maneira:

$$H = H^0 + H' \quad (2.61)$$

onde  $H^0$  é o Hamiltoniano de Hartree-Fock e a perturbação  $H'$  é a diferença entre o potencial de interação eletrônica exato e aquele potencial obtido por Hartree-Fock.

De maneira análoga, a energia total do sistema é calculada por meio da soma da energia do obtida pelo Hamiltoniano não perturbado de HF e dos termos de perturbações de  $N$  ordens (ALCÁCER, 2007), como é mostrado:

$$E = E^0 + E' + E'' + \dots + E^N \quad (2.62)$$

Um dos mais utilizados é a perturbação de Møller-Plesset de segunda ordem (MP2). Ao adicionar esse termo, o tempo de cálculo leva em torno de 3 a 5 vezes mais que o método de HF, contudo, na maioria dos casos apresenta mais precisão no que se diz respeito a ângulos e comprimentos de ligação.

## 2.4.2 Teoria do Funcional da Densidade

Outra metodologia usada na química quântica para a obtenção da estrutura eletrônica de moléculas e sólidos é a *Teoria do Funcional da Densidade* (DFT, do inglês *Density Functional Theory*). Essa teoria tem como base o fato da energia total do sistema

poder ser expressa por meio de um funcional da densidade eletrônica, incluindo todas as interações (tanto troca quanto correlação eletrônica).

Diferente do método de Hartree-Fock, em que a função de onda para um sistema de  $N$  elétrons é expressa por uma função de 4 coordenadas (sendo dessas, 3 espaciais e mais uma coordenada de *spin*), a DFT usa a densidade eletrônica ( $n(r)$ ), uma função de apenas 3 coordenadas espaciais (ALCÁCER, 2007).

De acordo com Koch e Holthausen (2001), a densidade eletrônica é definida como a probabilidade de encontrar qualquer um dos  $N$  elétrons em um elemento de volume  $dr_1$ . Em outras palavras,  $n(r)$  é uma densidade de probabilidade, porém é chamada de densidade eletrônica simplesmente por comodidade.

A densidade eletrônica  $n(r)$  é obtida pela solução de um sistema auxiliar de equações para um elétron, chamadas de equações de Kohn-Sham (KOHN; SHAM, 1965). São muito semelhantes àquelas apresentadas para o método de HF. A densidade eletrônica ( $n(r)$ ) pode ser expressa por intermédio da seguinte expressão:

$$n(r) = \sum_i^N |\psi^{KS}(r)|^2 \quad (2.63)$$

onde  $\psi^{KS}(r)$  são as soluções do sistema auxiliar, chamados de orbitais de Kohn-Sham.

Esse método busca encontrar uma solução para a densidade eletrônica, tal que o valor da energia do sistema expressa como um funcional da densidade seja a mínima, como pode ser observado abaixo:

$$E_0 = \min E[n(r)] \quad (2.64)$$

O funcional da densidade eletrônica é expresso por meio de quatro contribuições, no que se refere as interações entre partículas e também referente ao meio externo, como é mostrado abaixo:

$$E[n(r)] = T_S[n(r)] + J[n(r)] + E_{XC}[n(r)] + E_{Ne}[n(r)] \quad (2.65)$$

onde  $T_S[n(r)]$  representa o termo da energia cinética das partículas não interagentes,  $J[n(r)]$  é a contribuição eletrostática para a repulsão elétron-elétron;  $E_{XC}[n(r)]$  é o

termo de troca e correlação eletrônica e, por fim,  $E_{Ne}[n(r)]$  representa o potencial de interação com o meio externo.

No que se refere ao termo de troca e correlação eletrônica,  $E_{XC}[n(r)]$ , diversos autores desenvolveram modelos para obter uma representação apropriada. Existem diversos funcionais, desde aqueles ditos puros como, por exemplo o funcional de Becke (1988), um funcional que trata de quantificar a porção referente a energia de troca, e os funcionais de Perdew (1986) e Lee et al. (1988), que determinam a parte referente à correlação eletrônica.

Com isso, foram desenvolvidos funcionais ditos *híbridos*, os quais contem em sua formulação os diferentes funcionais puros, que é o caso do funcional *BP86* e *B3LYP*, que são híbridos envolvendo os funcionais de Becke (1988) para a troca e os funcionais de Perdew (1986) e Lee et al. (1988) para correlação, respectivamente.

### 2.4.3 Funções de Base - *Basis sets*

No que se diz respeito ao estudo de átomos e moléculas, é conveniente fazer uma aproximação das funções de onda (tanto para os métodos baseados na teoria de Hartree-Fock e também do funcional da densidade) através de uma combinação linear de funções matemáticas  $\phi_i(r)$ . Para o estudo de moléculas, geralmente são utilizadas funções Gaussianas, pois apresentam um decaimento exponencial da energia em função do raio atômico ( $r$ ). Ao conjunto dessas funções  $\phi_i(r)$  é dado o nome de *funções de base*, ou do termo em inglês *basis sets*. A expansão da função de onda é então definida por:

$$\psi(r) = \sum_i^N C_i \phi_i(r) \quad (2.66)$$

Existem diversos conjuntos de bases e estes diferem entre si no que se diz respeito ao seu tamanho, ou seja, quantas funções são utilizadas para representar os orbitais e, também, algumas incluem em sua formulação efeitos difusos e de polarização. Dentre as mais conhecidas estão as funções de *Pople* (BINKLEY et al., 1980; GORDON et al., 1982; PIETRO et al., 1982; KRISHNAN et al., 1980) e as de *Ahlrichs* (SCHÄFER et al., 1994).

Para exemplificar as funções desenvolvidas por Pople e colaboradores, tomaremos como exemplo as seguintes funções de base: STO-3G, 3-21G, 6-31G\* (ou 6-311G(d)) e 6-311G\* (ou 6-311G(d)), onde \* representa a inclusão de função de polarização. Efeitos difusos também podem ser adicionados, e as bases que tem esse tipo de efeito apresenta o sinal + em sua nomenclatura como, por exemplo, a base 6-311+G.

Conforme é apresentado por Lewars (2003), a base STO-3G (STO: *Slater Type Orbital*, cujo decaimento é relacionado com a exponencial de  $r$ ) é chamada de base mínima, a qual utiliza três Gaussianas para definir cada orbital e introduz o conceito de *contração de camadas* (do inglês, *contracted valence*), o qual constrói gaussianas contraídas a partir de outras primitivas, sendo que estas compartilham dos mesmos valores para seus expoentes. Para exemplificar, será tomado como exemplo o átomo de carbono, que possui uma camada  $s$  e uma  $sp$ . Em outras palavras, as Gaussianas  $2s$  e  $2p$  (pertencentes à camada  $2sp$ ) compartilham o mesmo expoente  $\alpha$  (porém diferente daquele usado para o orbital  $1s$ ), conforme é exemplificado abaixo:

$$\phi(2s) = C_{1s}e^{-\zeta_{1s}r} + C_{2s}e^{-\zeta_{2s}r} + C_{3s}e^{-\zeta_{3s}r} \quad (2.67a)$$

$$\phi(2p_x) = C_{1p}xe^{-\zeta_{1p}r} + C_{2p}xe^{-\zeta_{2p}r} + C_{3p}xe^{-\zeta_{3p}r} \quad (2.67b)$$

$$\phi(2p_y) = C_{1p}ye^{-\zeta_{1p}r} + C_{2p}ye^{-\zeta_{2p}r} + C_{3p}ye^{-\zeta_{3p}r} \quad (2.67c)$$

$$\phi(2p_z) = C_{1p}ze^{-\zeta_{1p}r} + C_{2p}ze^{-\zeta_{2p}r} + C_{3p}ze^{-\zeta_{3p}r} \quad (2.67d)$$

Para esse conjunto de função de base, é importante ressaltar que o valor de  $\zeta_{1s}$  é igual ao de  $\zeta_{1p}$ , assim como  $\zeta_{2s} = \zeta_{2p}$  e  $\zeta_{3s} = \zeta_{3p}$ .

Na Figura 2.2 está sendo mostrado o comportamento radial de algumas funções de base em coordenadas atômicas. A linha sólida, mais ao topo, ( $I$ ) representa a solução exata da equação de Schrödinger para um sistema monoelétrônico. A curva  $II$  é a representação dessa solução exata por meio de uma base contendo três funções combinadas. As curvas  $III$ ,  $IV$  e  $V$  são as gaussianas primitivas (que combinadas geram a curva  $II$ ), cujos fatores de decaimento exponencial ( $\zeta$ ) são iguais a 2,227660, 0,405771 e 0,109818 com fatores de contração ( $C$ ) iguais a 0,154329, 0,535328 e 0,444635, respectivamente.

As outras funções de base de Pople, apresentadas como exemplo, apresentam o conceito de valência divididas (ou, do inglês, *split valence*). Esse conceito considera



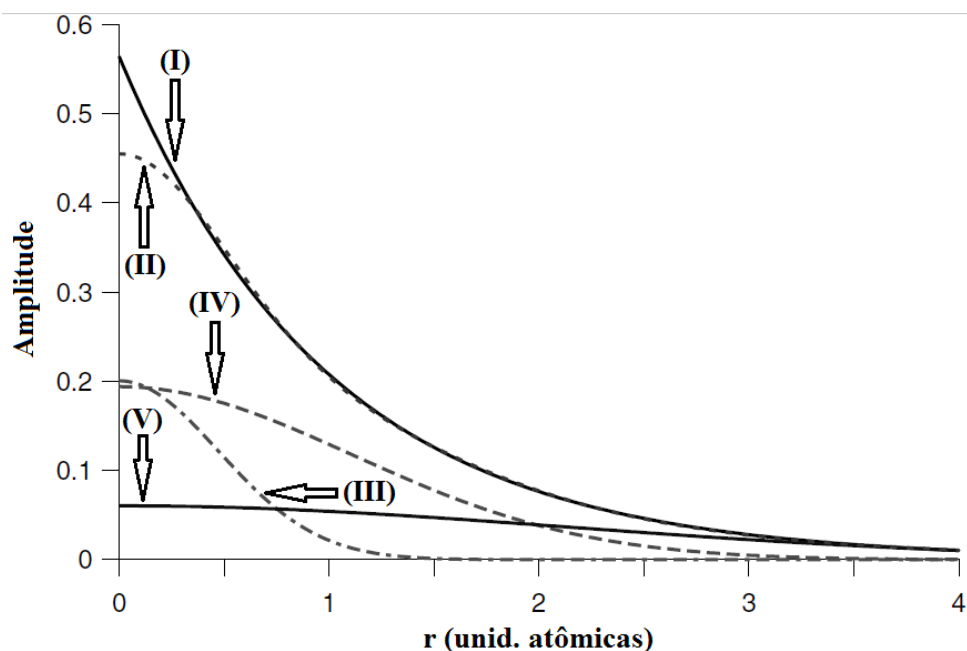


Figura 2.2: Decaimento de uma função de base ao longo do raio atômico, utilizando diferentes fatores de decaimento  $\zeta$  e amplitudes. Adaptado de Cramer (2004).

que o orbital central, ou seja, aquele mais próximo ao núcleo (*core orbital*) é representado por dada combinação de funções Gaussianas e, os orbitais de valência, por um outro conjunto de funções. Conforme o número de funções a serem utilizadas para a descrição dos orbitais de valências, as bases podem ser classificadas como *double-zeta* (caso apresente duas bases para cada orbital) ou *triple-zeta* (três bases para cada orbital) (SZABO; OSTLUND, 1996).

A função de base 3-21G utiliza uma função com três Gaussianas para a descrição do orbital central e duas funções para os orbitais de valência: uma função contendo duas Gaussianas e outra com apenas uma. As funções 6-31G\* e 6-311G\*, ambas apresentam, para o orbital central, uma função contendo 6 Gaussianas, porém, o que diferem entre si, são os orbitais de valência, onde na primeira são representados por 2 funções (um com três e outra com uma Gaussiana) e na segunda, por três funções (uma tripla e duas simples).

Além disso, essas duas últimas funções incluem efeitos de polarização, visto que apresentam \* em sua nomenclatura. Um orbital atômico pode se estender devido a esse efeito (chamado de efeito de polarização), ou seja, um orbital *s* pode polarizar em dada direção se estiver misturado a um orbital do tipo *p*. De maneira análoga, orbitais

$p$  podem polarizar se misturados com orbitais tipo  $d$ . Os pacotes de química quântica possuem internamente diversas funções para descrever os efeitos de polarização.

Tomando como exemplo as funções de base 6-31G\* e 6-31G\*\*. A primeira apresenta efeito de polarização do orbital  $d$  para todos os átomos (representado pela presença do \*), com exceção ao hidrogênio. A segunda, adicionada de um \*, inclui também a polarização do orbital  $p$  para o átomo de hidrogênio.

As funções que incluem efeitos difusos apresentam valores de  $\zeta$  no expoente muito pequenos, o que significa dizer que os elétrons podem se encontrar em uma posição muito distante do núcleo. Esse tipo de efeito é importante quando se trata de ânions e também átomos que apresentem alta eletronegatividade como, por exemplo, o flúor. Um exemplo desse tipo de função é a 6-31+G, onde o efeito difuso está presente para os orbitais  $s$  e  $p$  e também a função 6-31++G, que é semelhante a anterior, contudo, conta com efeito difuso para o hidrogênio também.

#### 2.4.4 Métodos Semi-empíricos

Depois de apresentar as duas principais classes de métodos utilizados para a obtenção da estrutura eletrônica, ainda existem outras formas de se conseguir essa mesma informação. Nesse sentido, entram os métodos *semi-empíricos*, os quais utilizam-se de diversas aproximações adicionais, com o intuito principal de reduzir a complexidade matemática e, até mesmo, tentar melhorar a precisão.

De um modo generalizado, esse tipo de método limita-se a elétrons de valência e não considera os orbitais mais próximos aos núcleos (também conhecidos pela expressão oriunda do inglês *core orbitals*).

Alcácer (2007) apresenta alguns exemplos de métodos semi-empíricos mais conhecidos. O primeiro método a ser mostrado é o de *Hückel simples*, que por sua vez aplica-se em moléculas com elétrons do tipo  $\pi$  em sistemas onde há dupla ligação conjugada. O método não considera de uma forma explícita as interações eletrônicas. O método de *Hückel estendido* é um dos mais utilizados para moléculas que não tenham estrutura planar e é muito semelhante ao *Hückel simples*, contudo, estende-se a todos

os elétrons.

Os métodos do tipo PPP (*Pariser-Parr-Pople*), são aplicados, também, a elétrons  $\pi$ , porém possuem um termo de interação entre os elétrons e faz o uso de um determinante do tipo *Slater* para as funções de onda. Esse método apresenta-se muito melhor que os de *Hückel* simples. Contudo, esse método faz a utilização de uma simplificação denotada como *ZDO* (do inglês, *zero differential overlap*), desta forma, ignorando portanto diversas integrais de repulsão elétron-elétron, o que simplifica os cálculos.

Os métodos de *CNDO* e *INDO* são métodos que não são muito utilizados, e são generalizações dos métodos PPP. Aplicam-se a moléculas planas e não planas e tratam apenas dos elétrons das camadas de valência. Os métodos *CNDO*, do inglês *complete neglect of difference overlap*, fazem o uso também das simplificações *ZDO* para todos os pares de orbitais sobrepostos e integrais de repulsão. Já o método *INDO* (do inglês *intermediate neglect of difference overlap*) não faz aproximações tão radicais.

Por fim, existem os métodos *paramétricos*, que são especialmente adaptados e envolvem energias de ligação, especialmente onde existem falhas dos métodos baseados em primeiros princípios. São baseados em parâmetros semi-empíricos e, a escolha adequada desses parâmetros, permite fazer uma compensação (parcial) dos erros envolvidos nos métodos de primeiros princípios. As parametrizações são realizadas de tal forma que o método forneça resultados precisos para entalpia de formação em fase gasosa, ou seja, os parâmetros são calibrados com essa propriedade a 298 K. O conjunto de parâmetros é obtido pela minimização nos erros de cálculos dessas entalpias, além da geometria e momento dipolar. Dentre os métodos paramétricos mais conhecidos, estão os *MINDO/3*, *MNDO*, *AMI*, *RM1*, *PM3*, *SAM1* e *MINDO/d*, cada qual com seu conjunto de parâmetros para cada substância (ALCÁCER, 2007). Além desses, Gerber e Soares (2013) apresentaram um método paramétrico alternativo, chamado de *POA1*, o qual possui parâmetros de dois dos métodos supracitados, o *AM1* e *RM1*.



# Capítulo 3

## Metodologia

### 3.1 Métodos para o Cálculo da Estrutura Eletrônica

Como apresentado no Capítulo 2, uma informação importante para a estimativa de valores de coeficiente de atividade em modelos do tipo COSMO são os perfis sigma. Como estes são gerados a partir de cálculos quânticos, é de suma importância avaliar quais teorias apresentam melhores resultados para esse tipo de cálculo. Dentre as apresentadas, foram escolhidos alguns métodos que se baseiam na aproximação de Hartree-Fock e também aqueles referentes à teoria do funcional da densidade (DFT).

Dentre os primeiros, selecionou-se o método de HF tradicional (SZABO; OTTLUND, 1996; LEVINE, 2000) e o MP2, que inclui efeitos de correlação eletrônica (HEAD-GORDON et al., 1988; SÆBØ; ALMLOF, 1989; FRISCH et al., 1990a; FRISCH et al., 1990b; HEAD-GORDON; HEAD-GORDON, 1994). Para a teoria do funcional da densidade, o funcional híbrido BP86 (BECKE, 1988; PERDEW, 1986), com o qual o modelo COSMO-RS (KLAMT, 1995) foi parametrizado, e o B3LYP (BECKE, 1988; LEE et al., 1988; VOSKO et al., 1980), o qual também é muito utilizado. Esses funcionais também foram utilizados para a criação dos perfis sigma contidos no banco de dados de Dortmund (DDB, 2017), apresentam diferentes propostas para o termo de correlação e troca do funcional da densidade.

Uma vez definidos os métodos que serão utilizados para o cálculo da estrutura eletrônica, é importante fazer uma seleção de alguns conjuntos de funções de base, as quais são utilizadas para a expansão das funções de onda e densidade eletrônica.

Foram selecionadas algumas funções de base de Pople e de Ahlrichs. Primeiramente, dentre os conjuntos de Pople, foi escolhida como a primeira opção a função 3-21G e 3-21++G(d,p), uma *split double zeta*, a primeira sem a consideração de efeitos difusos e de polarização e, a segunda, incluindo esses efeitos (BINKLEY et al., 1980; GORDON et al., 1982; PIETRO et al., 1982).

Posteriormente, partiu-se para a escolha de conjuntos de funções de bases maiores, ou seja, contendo um número maior de gaussianas. Para isso, também da classe de Pople, foi escolhida a 6-311G (KRISHNAN et al., 1980), a qual é uma *split triple zeta*. À essa base, considerou-se efeitos de polarização (o qual gera o conjunto 6-311G(d,p)) e também a combinação deste último efeito citado com aquele dito como efeito difuso, obtendo-se, assim, a base 6-311++G(d,p).

Dentre as funções do grupo de Ahlrichs (SCHÄFER et al., 1994), foram escolhidas duas funções, ambas do tipo *triple zeta*, com e sem efeito de polarização: TZV e TZVP, respectivamente. A última citada, juntamente com o funcional da densidade BP86, foi a combinação utilizada para a criação dos perfis sigma para a calibração do modelo COSMO-RS (KLAMT, 1995).

Tendo definido todas as teorias de cálculo e também os conjuntos de funções de base, serão testadas todas as combinações possíveis, ou seja, cada nível de teoria será testada com todos os conjuntos de base escolhidos.

Além dessas metodologias supracitadas, que são baseadas em primeiros princípios, um método semi-empírico foi aplicado para o cálculo das estruturas eletrônicas das moléculas. Para esse tipo de cálculo, são utilizados alguns modelos empíricos, ajustados muitas vezes com valores estimados a partir de cálculos de primeiros princípios. Com isso, tem-se um custo computacional muito mais reduzido, em outras palavras, é uma alternativa barata quando comparada àquelas apresentadas. Com isso, dentre os métodos semi-empíricos apresentados, utilizou-se o POA1, apresentado por Gerber e Soares (2013).

Para cada combinação de método quântico e função de base, a geometria das moléculas foi otimizada com os efeitos do COSMO. Esse processo de relaxação foi conduzido considerando que a molécula estivesse imersa em um solvente de raio igual

a 1,40 Å. Após da otimização da geometria, os perfis sigma foram obtidos por meio do pacote de química quântica GAMESS, que será apresentado com mais detalhes na próxima seção.

É de suma importância frisar que um dos fatores que serão levados em consideração para a escolha do método quântico para a obtenção do conjunto de perfis sigma é o custo computacional. Para todos os testes conduzidos, será computado o tempo total utilizado em cada método supracitado. Todos os testes serão conduzidos em um computador com processador Intel® Core™ i7-3770S @ 3.10 GHz e 8 GB de memória RAM com sistema operacional Ubuntu versão 16.04 LTS.

## 3.2 Pacotes de Química Quântica Computacional

Como o presente estudo visa a utilização de apenas ferramentas computacionais distribuídas de forma livre, optou-se por conduzir os cálculos quânticos envolvendo as metodologias apresentadas no pacote de química computacional *General Atomic and Molecular Electronic Structure System* (GAMESS), o qual possui livre acesso para a comunidade acadêmica (SCHMIDT et al., 1993), incluindo código fonte. A versão utilizada no presente estudo foi a *Dec 5, 2014*. O Código 3.1 apresenta um exemplo de script de comando para configurar e selecionar os tipos de métodos a serem considerados em cada cálculo.

No que tange os cálculos semi-empíricos, no caso do método POA1, foi utilizado um outro pacote de química computacional: o *Molecular Orbital PACkage* (MOPAC) que, da mesma forma que o GAMESS, possui licença gratuita (J. J. P. Stewart, 2016). Porém, o código fonte do pacote não é disponibilizado. Para a execução do MOPAC, é necessário a utilização, semelhante ao GAMESS, de um script inicial, conforme mostra o Código 3.2.

Com isso, obtêm-se perfis sigma utilizando os diferentes métodos de cálculo e também diferentes pacotes de química computacional. Além disso, perfis sigma já calculados foram utilizados com o intuito de realizar uma comparação com aqueles obtidos nesse estudo. Para isso, usou-se o banco de dados de perfis sigma VT-2005

(MULLINS et al., 2006), o qual contém 1432 compostos, a maioria dos quais são solventes e pequenas moléculas.

Código 3.1: *Script* de comando utilizado no pacote GAMESS. Linhas iniciadas com “!” são comentários.

---

```

1   $contrl scftyp=rhf $end

3   ! SELECIONAR ENTRE AS DIFERENTES TEORIAS
4   ! $contrl mplevl=0 $end
5   ! $contrl mplevl=2 $end
6   ! $contrl dfttyp=b3lyp $end
7   ! $contrl dfttyp=BP86 $end

9   $system timlim=10000 mwords=20 $end
10  $SCF DIRSCF=.TRUE. $end

12  ! DEFINIR O CONJUNTO DE FUNCOES DE BASE
13  ! 3-21G
14  ! $BASIS GBASIS=N21 NGAUSS=3 $END
15  ! 3-21++G(d,p)
16  ! $BASIS GBASIS=N21 NGAUSS=3 NDFUNC=1 NPFUNC=1 DIFFSP=.TRUE. DIFFS=.
    TRUE. $END
17  ! 6-311G
18  ! $BASIS GBASIS=N311 NGAUSS=6 $END
19  ! 6-311G(d,p)
20  ! $BASIS GBASIS=N311 NGAUSS=6 NDFUNC=1 NPFUNC=1 $END
21  ! 6-311++G(d,p)
22  ! $BASIS GBASIS=N311 NGAUSS=6 NDFUNC=1 NPFUNC=1 DIFFSP=.TRUE. DIFFS=.
    TRUE. $END
23  ! TZV
24  ! $BASIS GBASIS=KTZV $END
25  ! TZVP
26  ! $BASIS GBASIS=KTZVP $END

28  $guess guess=HUCKEL $end
29  $statpt projct=.FALSE. $end
30  $STATPT IFREEZ(1)=1,2,3 $END

32  ! OTIMIZA A GEOMETRIA COM EFEITOS DO COSMO E COORDENADAS INTERNAS
33  $statpt opttol=0.0005 nstep=50 $end
34  $contrl nzvar=1 $end
35  $zmat dlc=.t. auto=.t. $end
36  $contrl runtyp=OPTIMIZE maxit=200 $end

38  ! EXECUTA O COSMO EM UM CONDUTOR PERFEITO
39  $COSGMS PRFCND=.TRUE. $end

41  ! ESPECIFICA O RAI0 DO SOLVENTE
42  $COSGMS COSRAD = 1.4 $end

44  ! MEMORIA DISPONIVEL
45  $SYSTEM MWORDS=40 $END

```

---



Código 3.2: *Script* de comando utilizado no pacote MOPAC.

```
1 EPS=999.0
2 COSWRT
3 RSOLV=1.4
4 AM1
5 EXTERNAL=POA1.rm1
6 NSPA=92 VDW(H=1.416:C=2.006:N=1.829:O=1.7936:F=1.7346:S=2.124:P=2.124:
   Cl=2.065:Br=2.183:I=2.3364)
7 GNORM=0.1
8 RELSCF=0.1
```

### 3.3 Substâncias Seleccionadas para o Estudo

Como o objetivo principal do presente trabalho é criar um banco de dados para um grande conjunto de substâncias, primeiramente é necessário realizar os testes para os diferentes métodos quânticos apenas para um conjunto menor de substâncias. Isto se deve que a execução destes com um número muito elevado de moléculas torna o estudo inviável, pois o tempo requerido para todos os cálculos se torna muito elevado.

Para contornar esse problema, um subconjunto de moléculas pertencentes à diferentes classes químicas, como hidrocarbonetos (alifáticos, cíclicos, ramificados, aromáticos, etc.), cetonas, aldeídos, ésteres, éteres, dentro outros grupos, foi escolhido. Essas substâncias foram modeladas através do *software* Avogadro (HANWELL et al., 2012). No total, foram seleccionadas 36 moléculas para o estudo preliminar, listadas na Tabela 3.1.

### 3.4 Validação dos Perfis Sigma

Ao passo que se obtém o conjunto com os perfis sigma para as diferentes teorias e funções de base testadas, além daqueles obtidos pelo método semi-empírico e do banco de dados VT-2005, é necessário realizar a validação desses dados utilizando alguma propriedade mensurável, com o intuito de realizar as devidas comparações.

As propriedades que serão estimadas são os coeficientes de atividade em diluição infinita (IDAC, do inglês *Infinite Dilution Activity Coefficients*) para 250 misturas

Tabela 3.1: Sustâncias selecionadas para o cálculo da estrutura eletrônica envolvendo diferentes métodos quânticos.

Função Química	Moléculas
<b>Hidrocarbonetos</b>	<b>Saturados:</b> 2,2,3-trimetilbutano ;2,2,4-trimetilpentano; 2,3,4-trimetilpentano; 2,4-dimetilpentano; 2-metilpentano; ciclohexano; metilciclohexano; n-decano; n-heptano; n-hexano; n-nonano; n-octano; n-pentano.
	<b>Insaturados:</b> 1-buteno; 1-hepteno;1-hexeno.
	<b>Aromáticos:</b> benzeno; tolueno.
<b>Cetonas</b>	acetona (propanona); metil-etil-cetona.
<b>Haletos orgânicos</b>	1,2-dicloroetano; clorofórmio; tetracloreto de carbono.
<b>Aldeídos</b>	isobutiraldeído; n-butiraldeído.
<b>Ésteres</b>	acetato de etila; acetato de metila.
<b>Éteres</b>	dietil éter; dimetil éter; metil-n-butil éter.
<b>Nitrilas</b>	isobutironitrila; n-butironitrila.
<b>Outros</b>	trietilamina; tetrahidrofurano; dimetilsulfóxido; água.

binárias diferentes, totalizando 689 pontos experimentais. Esses valores foram coletados e apresentados nos trabalhos de Soares e Gerber (2013) e Soares et al. (2013) e suas respectivas referências estão listadas na Tabela B.1 do Apêndice B. Para tal, o modelo COSMO-SAC (LIN; SANDLER, 2002) foi a opção escolhida para esses cálculos, pois os perfis sigma contidos no banco da VT-2005 foram validados utilizando esse mesmo modelo de coeficiente de atividade.

### 3.4.1 Parâmetros Estimados

Como, para esse estudo, foram escolhidos hidrocarbonetos e outras substâncias que não formam ligações de hidrogênio entre si, optou-se por utilizar o modelo

COSMO-SAC (LIN; SANDLER, 2002) sem os parâmetros referentes a esse tipo de ligação intermolecular. Essa escolha facilita o estudo, pois são menos parâmetros que necessitam ser calibrados. Além disso, estão disponíveis versões modificadas deste modelo na literatura (COSMO-SAC 2010, com modificações apresentadas no trabalho de Chen et al. (2016), por exemplo). Essa nova versão do COSMO-SAC apresenta uma modificação para o termo da dependência com a temperatura e inclui novos parâmetros para descrever as interações de ligação de hidrogênio, o que o torna menos sensível à influência dos métodos de cálculo quântico empregados, conforme as conclusões apresentadas por Chen et al. (2016). Isso dificultaria a sua utilização para validar a influência do método quântico. Como, no presente trabalho, foi utilizada formulação original do modelo COSMO-SAC, apenas misturas que não apresentam ligação de hidrogênio foram consideradas. Para isso, apenas valores de IDAC de misturas binárias que não formem ligação de hidrogênio foram calculados. De acordo com Lin e Sandler (2002), para desprezar as ligações de hidrogênio é necessário definir o valor da energia de ligação de hidrogênio ( $C_{HB}$ ) como sendo nula ou, ainda, impor um valor de sigma de corte para ligação de hidrogênio ( $\sigma_{HB}$ ) mais elevado. No presente trabalho, escolheu-se a segunda opção, a qual o valor do sigma de corte foi mantido fixo em  $0,10 \text{ e } \text{Å}^{-2}$ , um valor bem elevado quando comparado aquele apresentado por Lin e Sandler, cujo valor é  $0,0084 \text{ e } \text{Å}^{-2}$ .

Sendo assim, o valor da constante de ligação de hidrogênio ( $C_{HB}$ ) foi mantido fixo em  $85\,000,00 \text{ kCal mol}^{-1} \text{ Å}^4 \text{ e}^{-2}$ , o qual apresenta-se muito próximo do valor apresentado por Lin e Sandler (2002) em seu trabalho. Foram estimados os valores de apenas dois parâmetros: o raio do segmento de superfície padrão ( $r_{\text{eff}}$ ) e o fator de polarização ( $f_{\text{pol}}$ ). O raio médio do segmento de área superficial ( $r_{\text{avg}}$ ) foi mantido fixo em  $1,50 \text{ Å}$  para todas as estimações de parâmetros. Para chegar nesse valor, foram feitos estudos prévios que variaram o  $r_{\text{avg}}$  e verificou-se em qual valor obteve-se o menor desvio médio absoluto (AAD). No Capítulo 4 será apresentado um gráfico de variação do desvio com relação ao valor do raio médio para um dos métodos de química quântica analisados, o qual mostra um mínimo desvio quando o raio médio é  $1,50 \text{ Å}$ .

Para a calibração do modelo, serão utilizados os 689 pontos experimentais de IDAC (como mencionado anteriormente), cujas referências estão apresentadas Tabela B.1 do Apêndice B. Após a calibração do modelo e a estimativa dos parâmetros, foram

construídos gráficos diagonais contendo valores de IDAC calculados e também aqueles experimentais (Figura 3.1). Essas diagonais consistem em plotar no eixo das abscissas os valores de logaritmo natural de IDAC experimentais e, no eixo das ordenadas, o logaritmo natural dos valores calculados pelo modelo. Quanto mais próximos os pontos se apresentarem da diagonal (Figura 3.1(b)), menor será o desvio e, por consequência, uma maior correlação é observada.

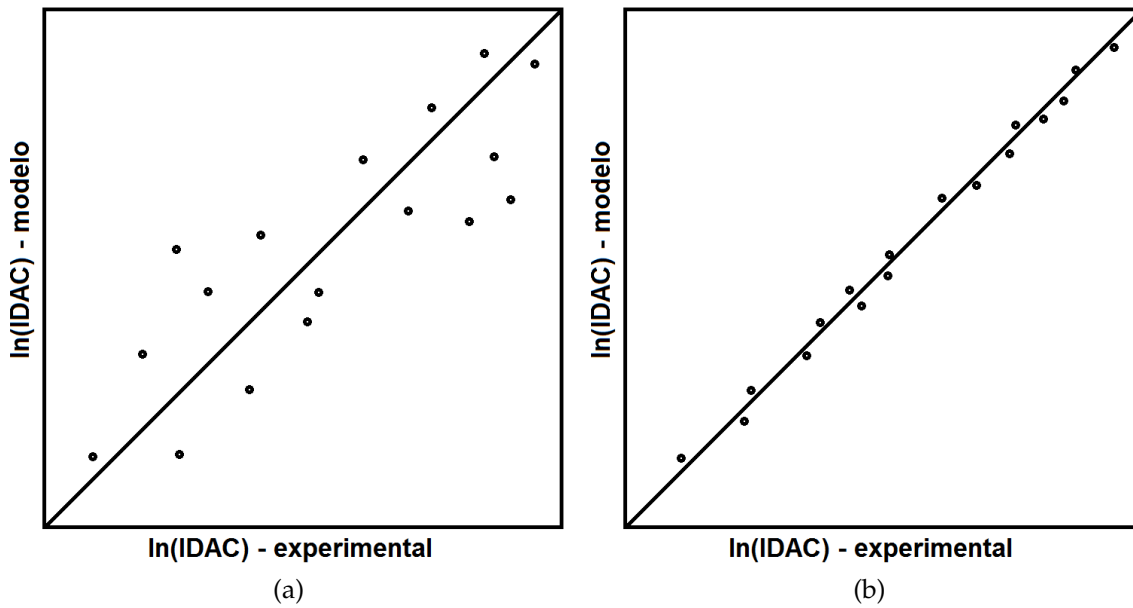


Figura 3.1: Imagem ilustrativa das diagonais de IDAC utilizadas para verificação da precisão dos valores de IDAC calculados em relação aos dados experimentais. Os valores em (a) apresentam desvios maiores quando comparados aqueles ilustrados em (b), pois os primeiros estão mais distantes da diagonal.

No processo de estimação dos parâmetros, será feito o uso de um método de otimização local de Nelder e Mead (1965). Como critério de otimização, será feita a minimização da função objetivo que consiste no erro médio absoluto (AAD, do inglês *Average Absolute Deviation*) entre os valores de logaritmo natural de IDAC calculados pelo modelo e aqueles obtidos por intermédio de dados experimentais apresentados na literatura. A expressão da função objetivo está mostrada a seguir.

$$AAD = \frac{1}{NP} \sum_{i=1}^{NP} |\ln IDAC_{mod} - \ln IDAC_{exp}| \quad (3.1)$$

Essas diagonais serão construídas para todos os conjuntos de perfis sigma ob-

tidos: utilizando os diferentes métodos quânticos do pacote GAMESS; utilizando o método semi-empírico POA1 do *software* MOPAC e também aqueles armazenados no banco de dados VT-2005. Além disso, a nível de comparação, no que se diz respeito à precisão do modelo COSMO-SAC, diagonais contendo valores de IDAC estimados através do modelo UNIFAC(Do) serão geradas. Esse modelo é utilizado em grande proporção na indústria e servirá como parâmetro comparativo para a qualidade das correlações das diagonais.

### 3.5 Construção de Diagramas de Equilíbrio

Uma vez estimados os parâmetros universais do COSMO-SAC utilizando os perfis sigma calculados através das diferentes teorias empregadas no estudo, é possível aplicar esse modelo na construção de diagramas de equilíbrio de fases. Serão construídos diagramas de equilíbrio líquido-vapor (ELV) e também líquido-líquido (ELL).

Os dados de ELV coletados da literatura apresentam-se em baixas (ou moderadas) pressões, o que torna válida a consideração da lei de Raoult modificada. Em outras palavras, é feita a consideração da fase vapor como sendo um gás ideal e apenas a não-idealidade da fase líquida é descrita. A equação utilizada, a qual representa a Lei de Raoult Modificada é dada por:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}} \quad (3.2)$$

onde  $y_i$  e  $x_i$  são as composições do componente  $i$  nas fases vapor e líquida, respectivamente;  $P$  é a pressão total do sistema e  $P_i^{\text{sat}}$  é a pressão de saturação do componente  $i$  em dada temperatura. Os valores de pressão de saturação foram obtidos do banco de dados do simulador de processos *iiSE* (VRTECH, 2017).

Com os dados de composição do líquido em dada temperatura, é estimado o valor do coeficiente de atividade  $\gamma_i$  utilizando um modelo de Gibbs em excesso. Por conseguinte, calcula-se a pressão total do sistema, rearranjando a Equação 3.2, como mostrado abaixo:

$$P = \sum_i^N x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}} \quad (3.3)$$

Uma vez obtida a pressão do sistema, isola-se  $y_i$  e estima-se o valor da fração molar do vapor, como é mostrado a seguir:

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (3.4)$$

O fluxograma apresentado na Figura 3.2, é uma forma esquemática e simplificada dos cálculos explanados acima, os quais utilizando a Lei de Raoult Modificada para cálculos de equilíbrios líquido-vapor.

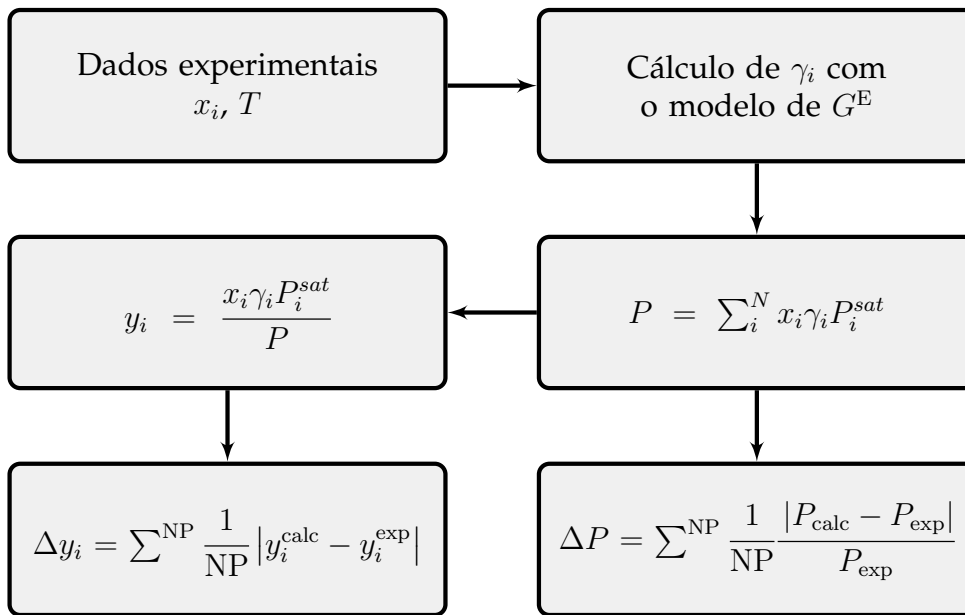


Figura 3.2: Fluxograma para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor e desvios da pressão e composição do vapor de sistemas em baixas pressões.

No que se diz respeito ao ELL, os cálculos de equilíbrio são realizados utilizando o critério de igualdade de fugacidades de ambas as fases, conforme é apresentado abaixo:

$$\hat{f}_i^\alpha = \hat{f}_i^\beta = \dots = \hat{f}_i^\pi \quad (3.5)$$

Essa expressão pode ser reescrita em termos dos coeficientes de atividade e também das frações molares das fases, como segue:

$$x_i^\alpha \gamma_i^\alpha = x_i^\beta \gamma_i^\beta = \dots = x_i^\pi \gamma_i^\pi \quad (3.6)$$

Em misturas binárias, o método de Rachford e Rice (1952), o qual foi criado para a resolução de problemas de equilíbrio líquido-vapor, apresenta bons resultados nos cálculos de equilíbrio líquido-líquido. Para isso, um problema do tipo *flash* é resolvido para a obtenção da fração vaporizada ( $v$ ):

$$1 - \sum_{i=1}^N \frac{K_i z_i}{1 + v(K_i - 1)} = 0 \quad (3.7)$$

para um valor fixo de  $K_i$ , sendo:

$$K_i \equiv \frac{y_i}{x_i} \quad (3.8)$$

onde  $z_i$ ,  $y_i$  e  $x_i$  representam as composições em termos de fração molar do componente  $i$  da alimentação e nas fases menos e mais densas, respectivamente;  $N$  diz respeito ao número de componentes da mistura e  $v$  é a fração da alimentação na fase de composições  $y_i$ .

Para aplicar em LLE, é conveniente usar  $y_i = x_i^\alpha$ ,  $x_i = x_i^\beta$  e  $K_i = \gamma_i^\beta / \gamma_i^\alpha$ , obtido pela Equação 3.6. A Equação 3.7 pode então ser solucionada por qualquer método numérico. Uma vez que  $v$  for obtido, recalculam-se  $x_i^\alpha$  e  $x_i^\beta$ , da seguinte forma:

$$x_i^\alpha = \frac{z_i}{\frac{1-v}{K_i} + v} \quad (3.9)$$

$$x_i^\beta = \frac{z_i - vx_i^\alpha}{1 - v} \quad (3.10)$$

A partir dos novos valores de  $x_i^\alpha$  e  $x_i^\beta$ , os valores referentes a  $K_i$  são atualizados e soluciona-se novamente a Equação 3.7. O método é continuado até que seja atingida a convergência, que, no presente trabalho, adotou-se como a tolerância no módulo da diferença dos valores calculados em cada iteração. O fluxograma do algoritmo para a resolução do método de Rachford e Rice (1952) está apresentado na Figura 3.3.

Tanto para equilíbrio líquido-vapor (ELV), quanto para líquido-líquido (ELL), dados experimentais disponíveis na literatura foram coletados. Isso foi feito com o intuito de plotá-los juntamente com aqueles preditos pelos modelos e construir diagramas de equilíbrio.

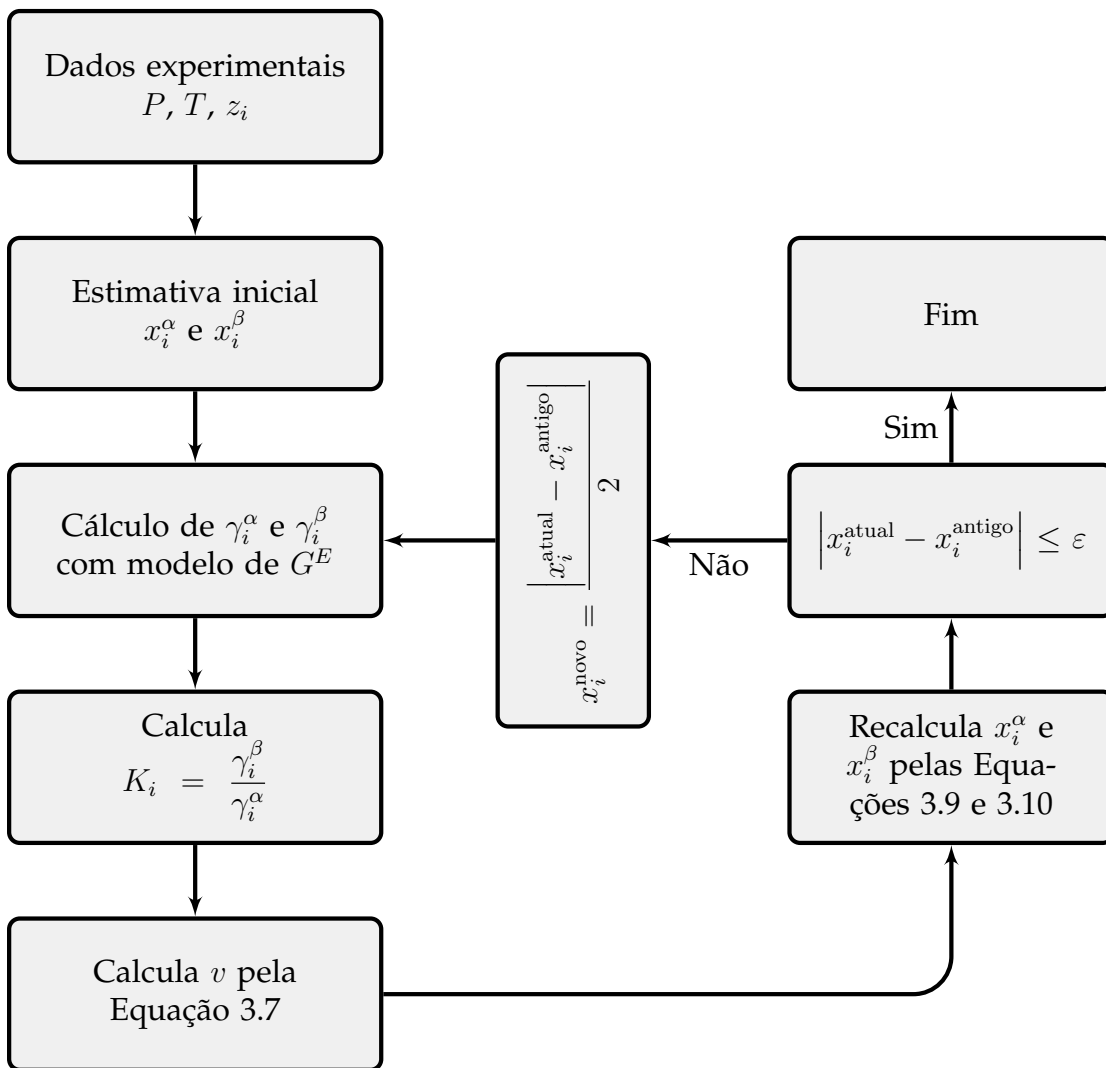


Figura 3.3: Fluxograma do método tipo Rachford-Rice utilizado neste trabalho para a solução de problemas de equilíbrio líquido-líquido.



# Capítulo 4

## Resultados e Discussão

Nesta seção, serão apresentados os resultados obtidos através dos testes realizados com as diferentes combinações de teorias de química quântica e bases de funções apresentados no Capítulo 3. Esses resultados englobam as correlações das diagonais de IDAC para todos os testes e também o tempo computacional total necessário para finalizar os cálculos para o conjunto de moléculas da Tabela 3.1. Além disso, estarão mostrados gráficos de diagramas de equilíbrio líquido-vapor (ELV) e líquido-líquido (ELL) para os métodos que apresentarem menores desvios aos dados experimentais de IDAC.

Os perfis sigma e a superfície de carga para a molécula de acetona, utilizando os diferentes conjuntos de base para o método HF estão mostrados na Figura 4.1. Observa-se regiões com densidade de carga induzida negativa próximo aos átomos de hidrogênio (região azul) e positiva em volta do oxigênio (região vermelha). Regiões neutras (verdes) também estão presentes e estão alocadas nas proximidades dos átomos de carbono. Nota-se que as distribuições parecem similares, dificultando a utilização direta dos perfis sigma como critério de avaliação. Por esse motivo, utilizou-se uma outra métrica (valores de IDAC, no caso desse trabalho) para avaliar qual método de cálculo quântico obteria o melhor conjunto de perfis sigma.

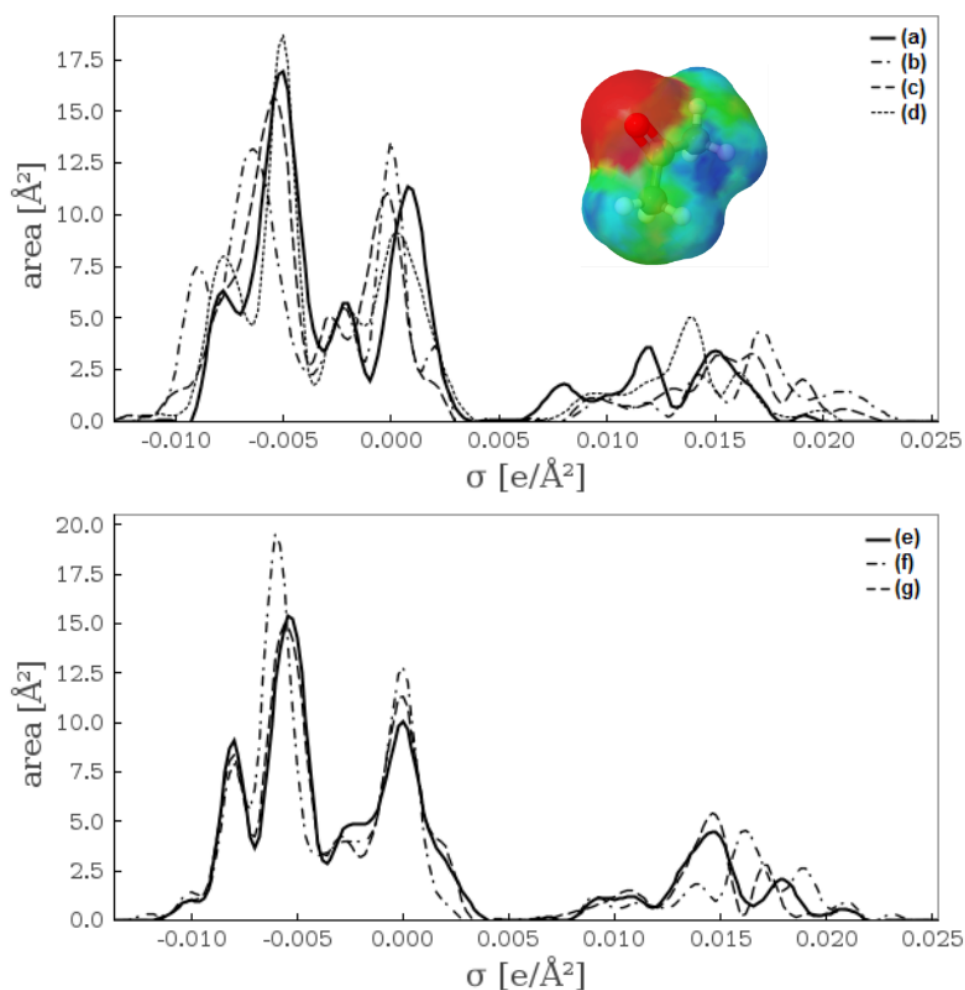


Figura 4.1: Perfil sigma para a molécula de acetona obtido por HF com diferentes funções de base: (a) 3-21G; (b) 3-21++G(d,p); (c) 6-311G; (d) 6-311G(d,p); (e) 6-311G++(d,p); (f) TZV; (g) TZVP.

## 4.1 Avaliação das Correlações e Tempo Computacional

Os resultados obtidos para a verificação de qual conjunto de base e nível de teoria geram melhores perfis sigma para utilização no modelo COSMO-SAC estão apresentados na Tabela 4.1. Os valores de tempo apresentados nessa tabela referem-se aqueles utilizados no cálculo dos perfis sigma para o conjunto das 36 moléculas apresentadas na Tabela 3.1.

Tabela 4.1: Resumo dos resultados obtidos para estimações dos valores de IDAC e tempo computacional para os modelos e métodos de química quântica testados.

		Parâmetros Ajustados				
		$f_{\text{pol}}$	$r_{\text{eff}}$ (Å)	$R^2$	AAD	Tempo (h)
3-21G	HF	2,0500	0,6541	0,7884	0,2916	2,31
	MP2	2,0202	0,7947	0,6653	0,3648	6,63
	B3LYP	3,7014	0,5631	0,7543	0,3192	9,65
	BP86	22,3722	0,2296	0,7001	0,3579	11,08
3-21G++(d,p)	HF	1,4551	0,6967	0,9048	0,2189	7,32
	MP2	1,4275	0,8617	0,8981	0,2284	47,13
	B3LYP	1,7521	0,7030	0,9110	0,2152	26,43
	BP86	1,9005	0,6848	0,9043	0,2120	30,16
6-311G	HF	1,1610	0,8496	0,9281	0,1975	3,94
	MP2	1,4474	0,9213	0,9041	0,2290	21,61
	B3LYP	1,3917	0,8882	0,9304	0,1997	15,53
	BP86	1,5583	0,8317	0,9288	0,1939	17,16
6-311G(d,p)	HF	1,4744	0,8609	0,9505	0,1641	9,83
	MP2	1,8655	0,9039	0,9284	0,1998	85,50
	B3LYP	1,9047	0,8252	0,9413	0,1713	30,95
	BP86	2,0653	0,7973	0,9370	0,1771	32,35
6-311++G(d,p)	HF	1,3366	0,8632	0,9550	0,1587	24,96
	MP2	1,6240	0,9034	0,9417	0,1796	197,11
	B3LYP	1,4861	0,8900	0,9503	0,1667	57,24
	BP86	1,5861	0,8610	0,9500	0,1659	61,52
TZV	HF	1,0725	0,8551	0,9331	0,1860	8,18
	MP2	1,4502	0,8870	0,9066	0,2212	49,64
	B3LYP	1,2670	0,8788	0,9335	0,1946	21,33
	BP86	1,2998	0,8954	0,9348	0,1922	25,42
TZVP	HF	1,3999	0,8583	0,9559	0,1555	16,70
	MP2	1,6628	0,9021	0,9382	0,1820	150,24
	B3LYP	1,5685	0,8710	0,9502	0,1657	38,49
	BP86	1,6664	0,8498	0,9427	0,1777	43,34
VT-2005	DMOL3	2,8550	0,6550	0,9517	0,1584	—
POA1	MOPAC	1,7089	1,1091	0,8689	0,2545	—
UNIFAC (Do)	—	—	—	0,9742	0,0867	—

A Figura 4.2 apresenta o comportamento da função objetivo (desvio médio absoluto - AAD) com relação ao valor do parâmetro  $r_{avg}$ . Embora seja mostrado para apenas uma combinação de teoria quântica e função de base, esse comportamento manteve-se em todas as demais. É possível notar que o desvio apresenta-se menor quando  $r_{avg}$  assume o valor de 1,50 Å. Isso indica que, nessa condição, o modelo possui melhor precisão em suas predições. Com isso, para a estimação dos demais parâmetros ( $f_{pol}$  e  $r_{eff}$ ), foi mantido fixo o raio médio em 1,50 Å para todos os testes.

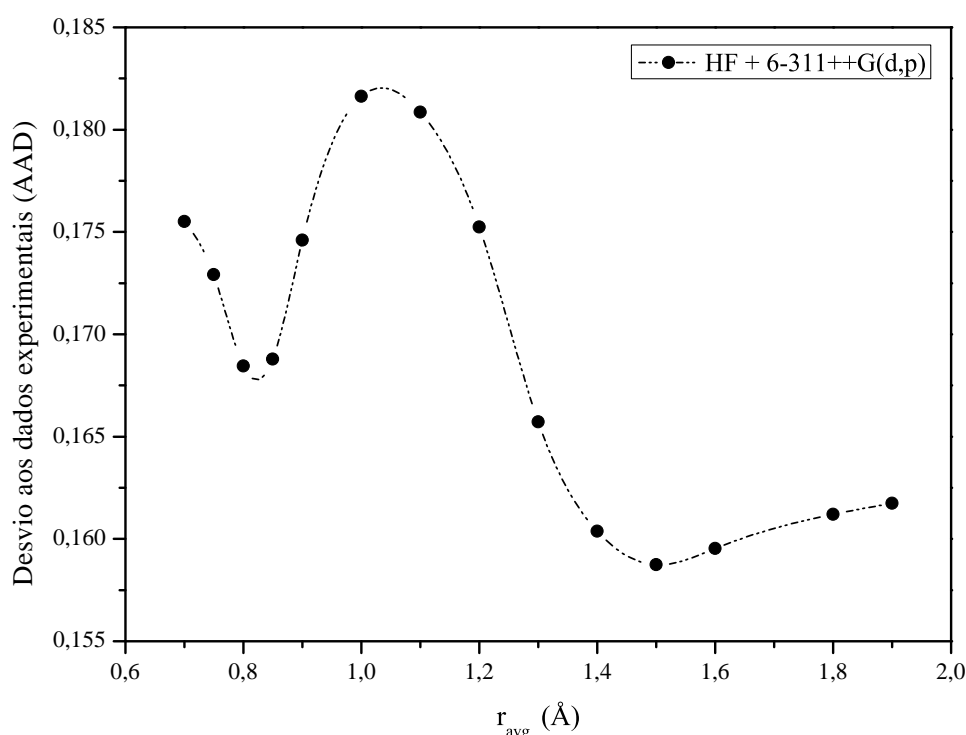


Figura 4.2: Gráfico do desvio médio absoluto em relação ao valor do parâmetro  $r_{avg}$  para o método de HF com a função de base 6-311++G(d,p).

É possível observar em primeiro momento, apenas analisando o valor da correlação, que, dentre aquelas estudadas, os resultados de perfis sigma que geram valores de logaritmo natural de IDAC mais próximos daqueles obtidos experimentalmente, é o método HF com TZVP como função de base. A diagonal do logaritmo dos valores de IDAC calculados pelo modelo versus aqueles experimentais apresentaram a correlação mais próxima à unidade, com valor igual a 0,9559.

As Figuras 4.3 e 4.4 apresentam gráficos do desvio médio absoluto (AAD) dos dados de IDAC, calculado por meio da Equação 3.1, com relação aos valores experimentais, para as diferentes combinações de teorias de cálculo quântico e conjuntos de funções de base distintos. É possível notar, em primeiro momento, que a base de função menor (3-21G) apresenta o maior desvio com relação às demais, para todas as quatro teorias testadas. Quando aumenta-se o número de funções na base, observa-se que a eficácia aumenta, ou seja, desvios menores são vistos para todos os casos. Essa tendência é percebida até a função 6-311++G(d,p), a qual possui uma combinação de um número maior de gaussianas (com relação à primeira citada) e também inclui efeitos difusos e de polarização.

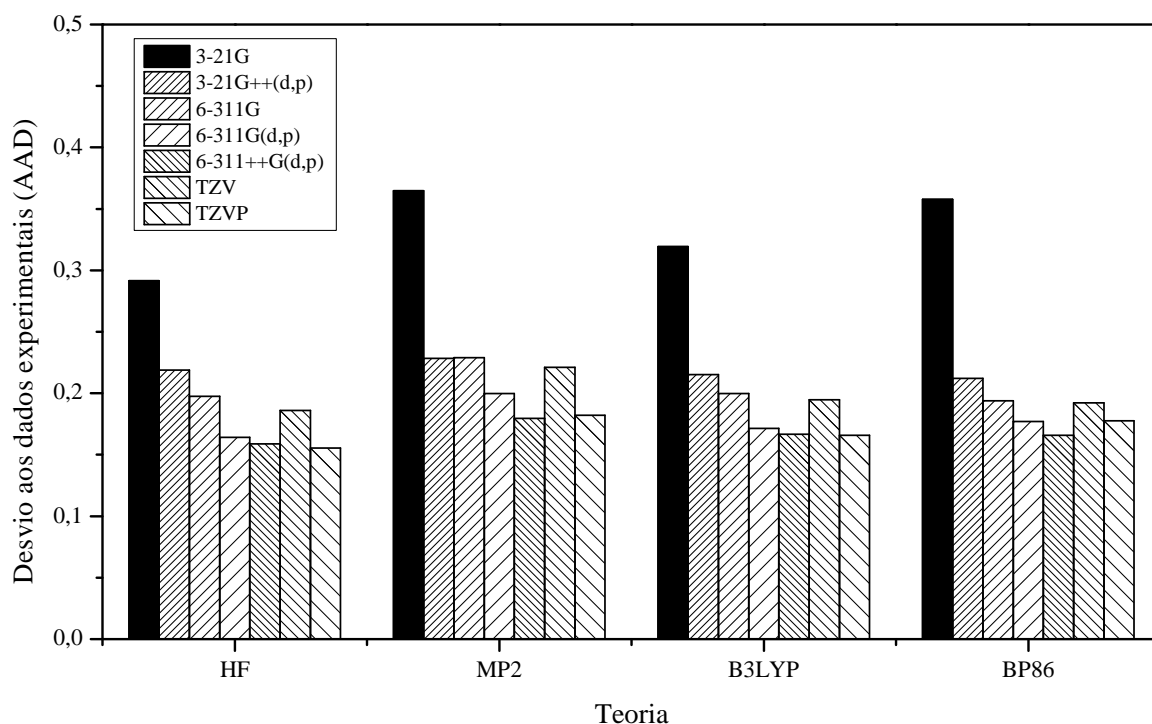


Figura 4.3: Gráfico do desvio médio absoluto em relação aos dados experimentais para os diferentes métodos de cálculo testados.

A função TZV apresenta valores de desvio médio absoluto (AAD) semelhantes daqueles observados ao se utilizar a função de base 6-311G. Isso se deve ao fato de essas duas bases serem muito semelhantes (funções do tipo *triple zeta* sem efeitos de

polarização), porém desenvolvidas por grupos de pesquisadores diferentes. O mesmo se aplica para as bases TZVP e 6-311G(d,p), as quais são muito próximas (são funções do tipo *triple zeta* e incluem efeitos de polarização). Uma outra informação importante que se pode retirar dessa figura é que, variando-se as teorias e mantendo-se fixa algum conjunto de base, observa-se que o desvio não tem grande alteração, o que permite observar que o fator determinante para a precisão dos cálculos usando o perfil sigma é a escolha de uma boa base que possibilite boa qualidade na expansão das funções de onda.

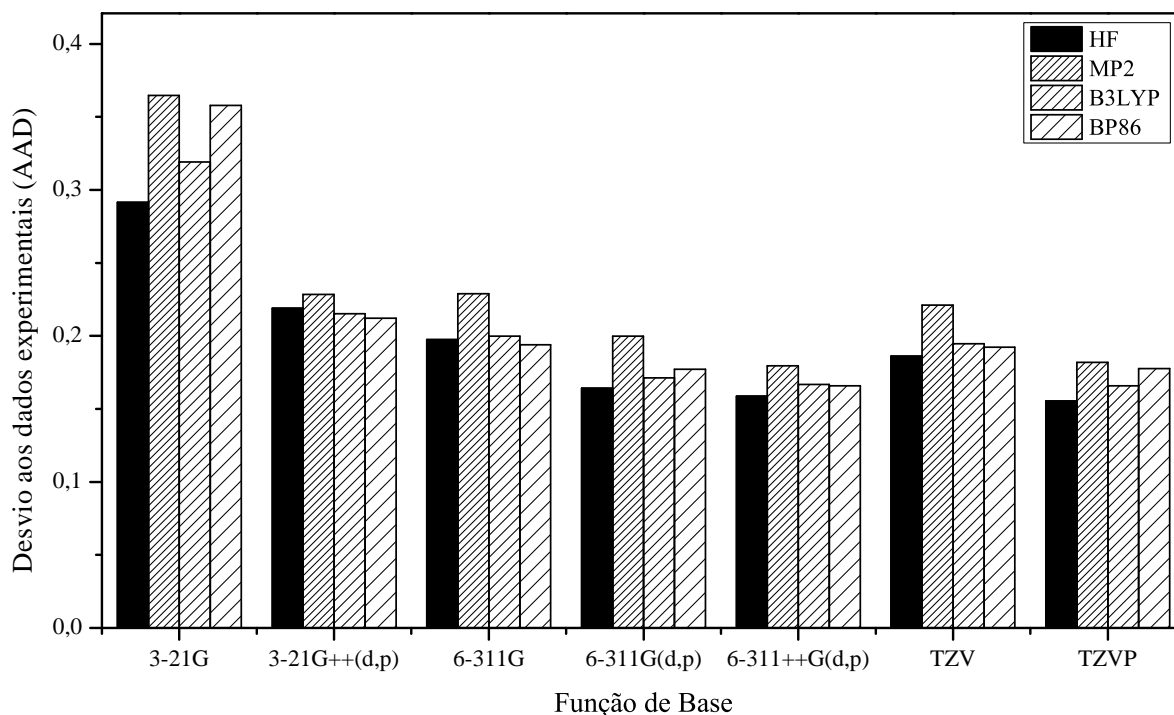


Figura 4.4: Gráfico do desvio médio absoluto em relação aos dados experimentais para os diferentes métodos de cálculo testados.

Outro fator muito importante a ser avaliado é o custo computacional empregado em cada cálculo das estruturas eletrônicas envolvidas no estudo. Isso é de suma importância, pois, ao ser criado o banco de dados para um grande número de moléculas, é importante que as informações de perfis sigma lá contidas sejam confiáveis (apresentem boa precisão para cálculos de equilíbrio), além do processo de obtenção

dessas informações não ser muito custoso. Busca-se, então, um equilíbrio entre precisão e tempo computacional. As Figuras 4.5 e 4.6 apresentam o tempo computacional em função dos diferentes métodos de cálculo.

Observa-se na Figura 4.5 que o método que utiliza a perturbação de Møller-Plesset de segunda ordem (MP2) apresenta os tempos computacional mais elevados. Porém, ao se retirar essa perturbação, ou seja, utilizando o método de HF puro, observa-se uma redução significativa no tempo computacional. Os tempos totais de cálculo para os métodos que são baseados na teoria do funcional da densidade (BP86 e B3LYP), mostram-se como os intermediários aos outros dois. Além disso, pode-se observar na Figura 4.6 que, quanto maior o número de gaussianas e incluir efeitos difusos e de polarização em sua implementação, o tempo computacional apresenta-se mais elevado.

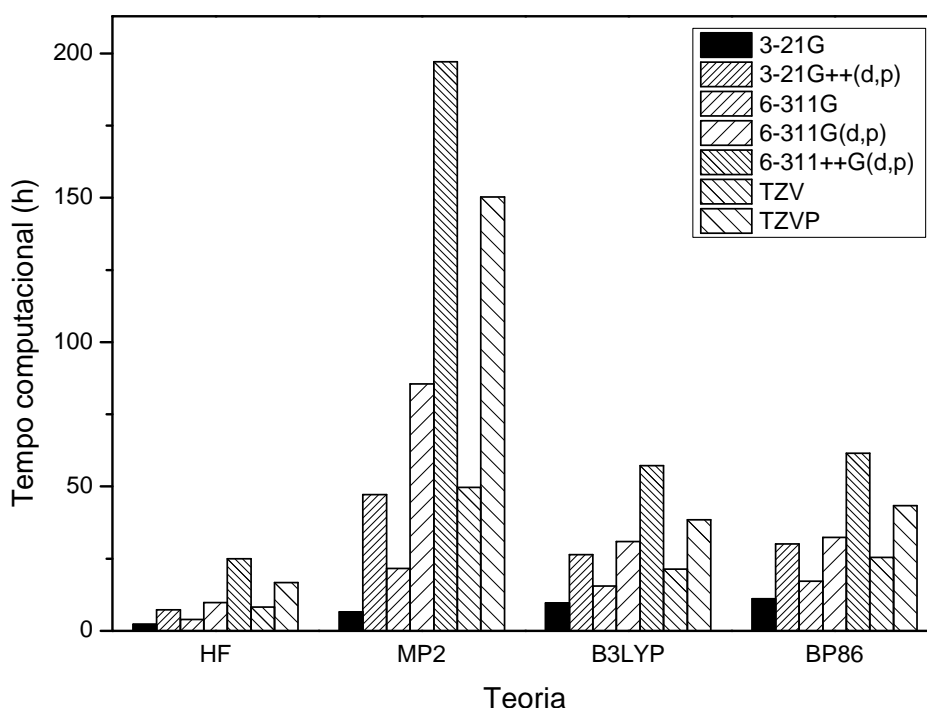


Figura 4.5: Gráfico do tempo computacional total utilizado para os diferentes métodos de cálculo testados.

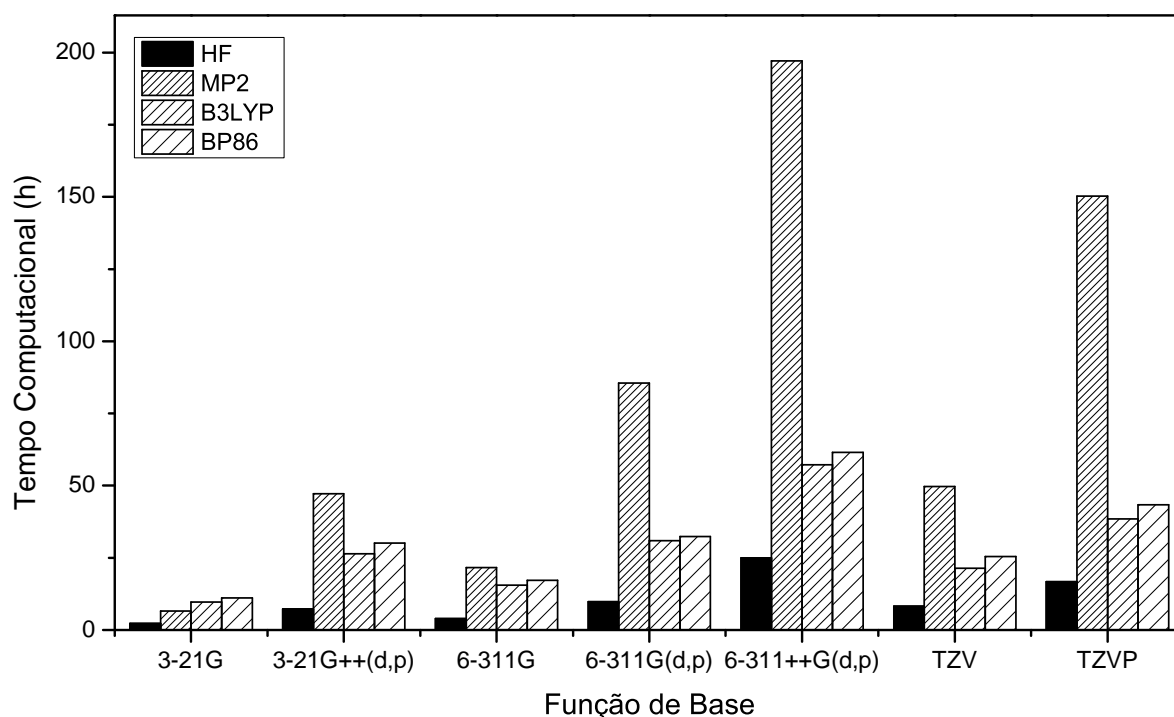


Figura 4.6: Gráfico do tempo computacional total utilizado para os diferentes métodos de cálculo testados.

## 4.2 Diagonais de IDAC

Outra comparação, com o intuito de verificar a eficácia de cada combinação de método quântico e funções de base, são os gráficos de diagonal de IDAC. Nesses diagramas, são plotados os dados experimentais juntamente com aqueles preditos pelo modelo. Quanto mais próximos os pontos ficarem da diagonal, mais preciso foi o cálculo. Nas Figuras 4.7 e 4.8 estão apresentadas as diagonais de IDAC para o método de HF. Através dessas figuras, é possível obter outra comprovação visual de como o resultado é afetado com a modificação da função de base. Com funções de base maiores, ou seja, com maior número de gaussianas e com a adição de outros efeitos (efeitos difusos e de polarização), a resposta aos dados experimentais de IDAC é melhor. Em outras palavras, os pontos aproximam-se mais da diagonal principal, o que indica uma maior precisão na predição dos valores de IDAC.



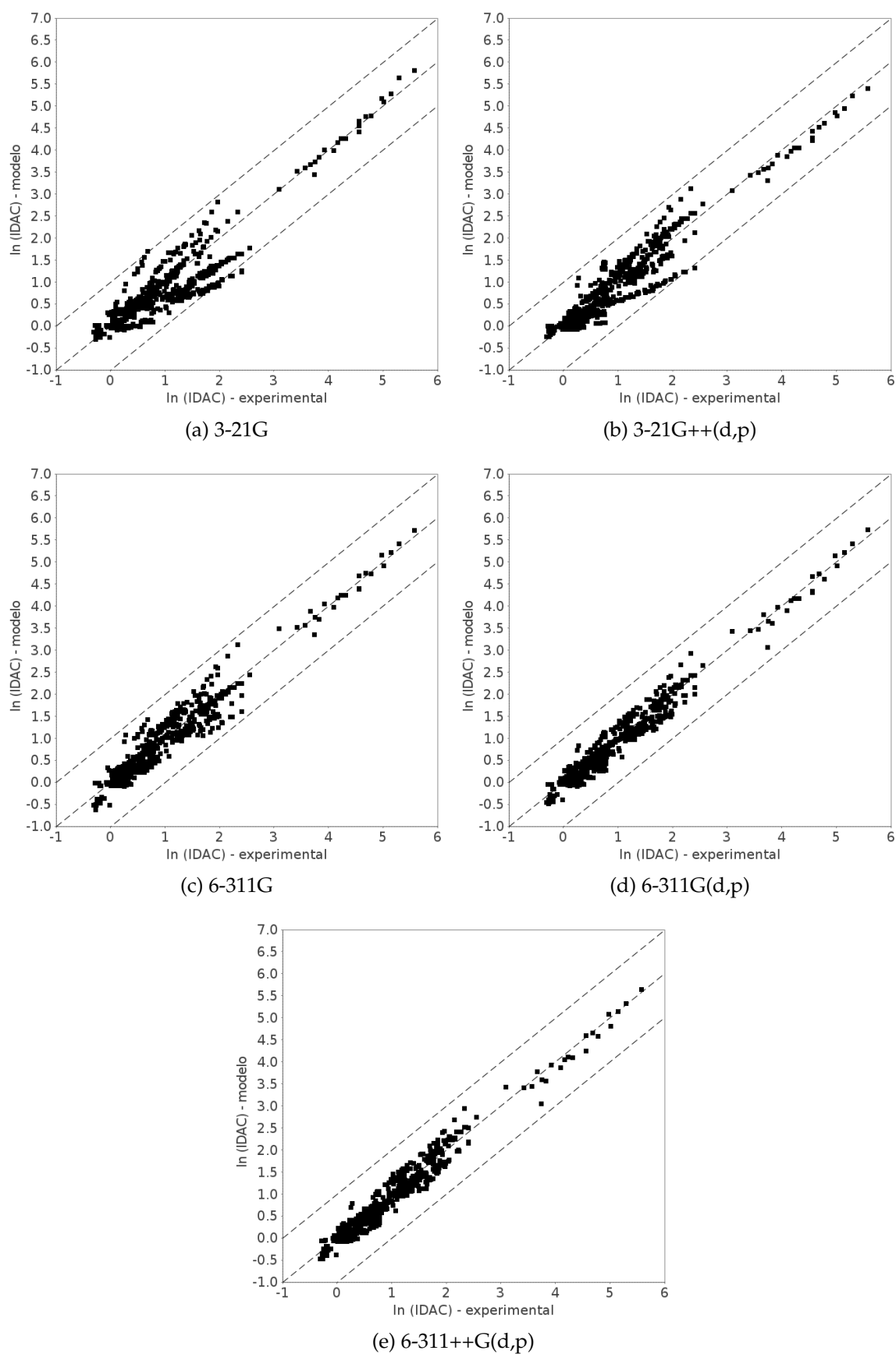


Figura 4.7: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock utilizando os conjuntos de funções de base de Pople.

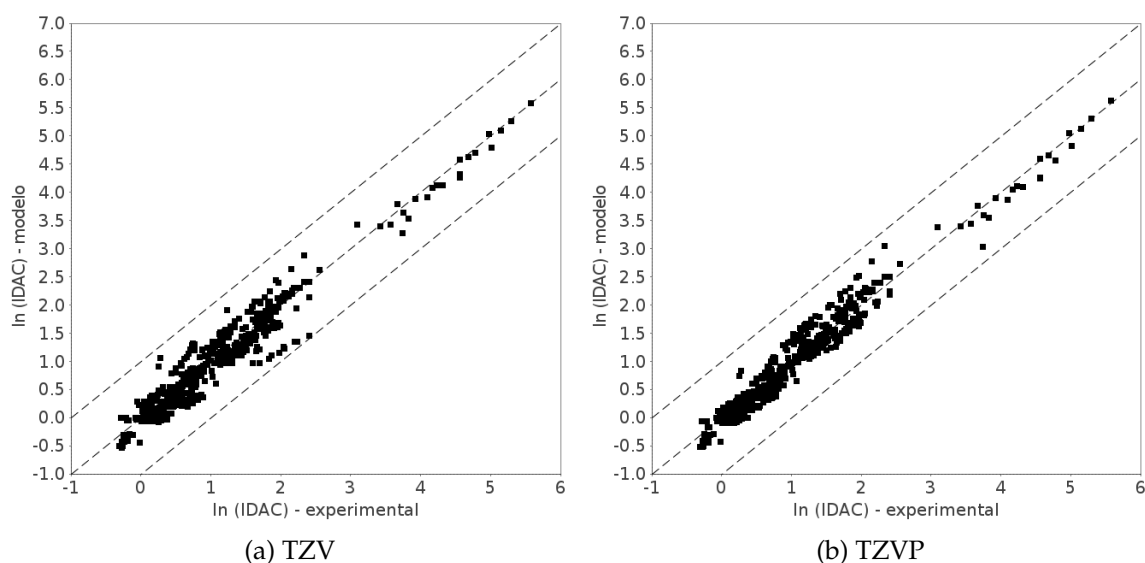


Figura 4.8: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock utilizando os conjuntos de funções de base de Ahlrichs.

De maneira análoga, foram plotadas as diagonais de IDAC para uma mesma função de base (6-311G(d,p)) com as diferentes teorias utilizadas nos cálculos envolvendo o pacote GAMESS (Figura 4.9). Nota-se que não há grandes diferenças nos comportamentos dos pontos apresentados. Confirmando mais uma vez que a escolha de uma boa função de base é de suma importância para os cálculos quânticos.

Como explanado anteriormente, foi observado que as funções de base apresentaram um impacto maior no cálculo final dos valores de IDAC, então procura-se encontrar uma metodologia que seja menos custosa, ou seja, apresente menor custo computacional (obviamente, com o menor desvio possível). Observando-se mais atentamente os resultados apresentados pelo método de HF, nota-se que essa opção juntamente com a função de base TZVP apresenta o menor valor de desvio dentre todos os testes. Porém essa mesma teoria, juntamente com as bases 6-311G(d,p) e 6-311++G(d,p), apresentaram desvios ligeiramente maiores (cerca de 5,53% e 2,06% maior, respectivamente), e uma redução no tempo computacional de 41,14% para a base 6-311G(d,p) e um aumento de 49,46% para a base 6-311G++(d,p). A partir disso, pode-se sugerir que a combinação do método de Hartree-Fock (HF) juntamente com o conjunto de função de base 6-311G(d,p) é uma boa escolha para ser utilizada na criação do banco de dados de perfis sigma. Essa combinação apresenta uma boa relação entre custo computacio-

nal e precisão com relação aos dados experimentais.

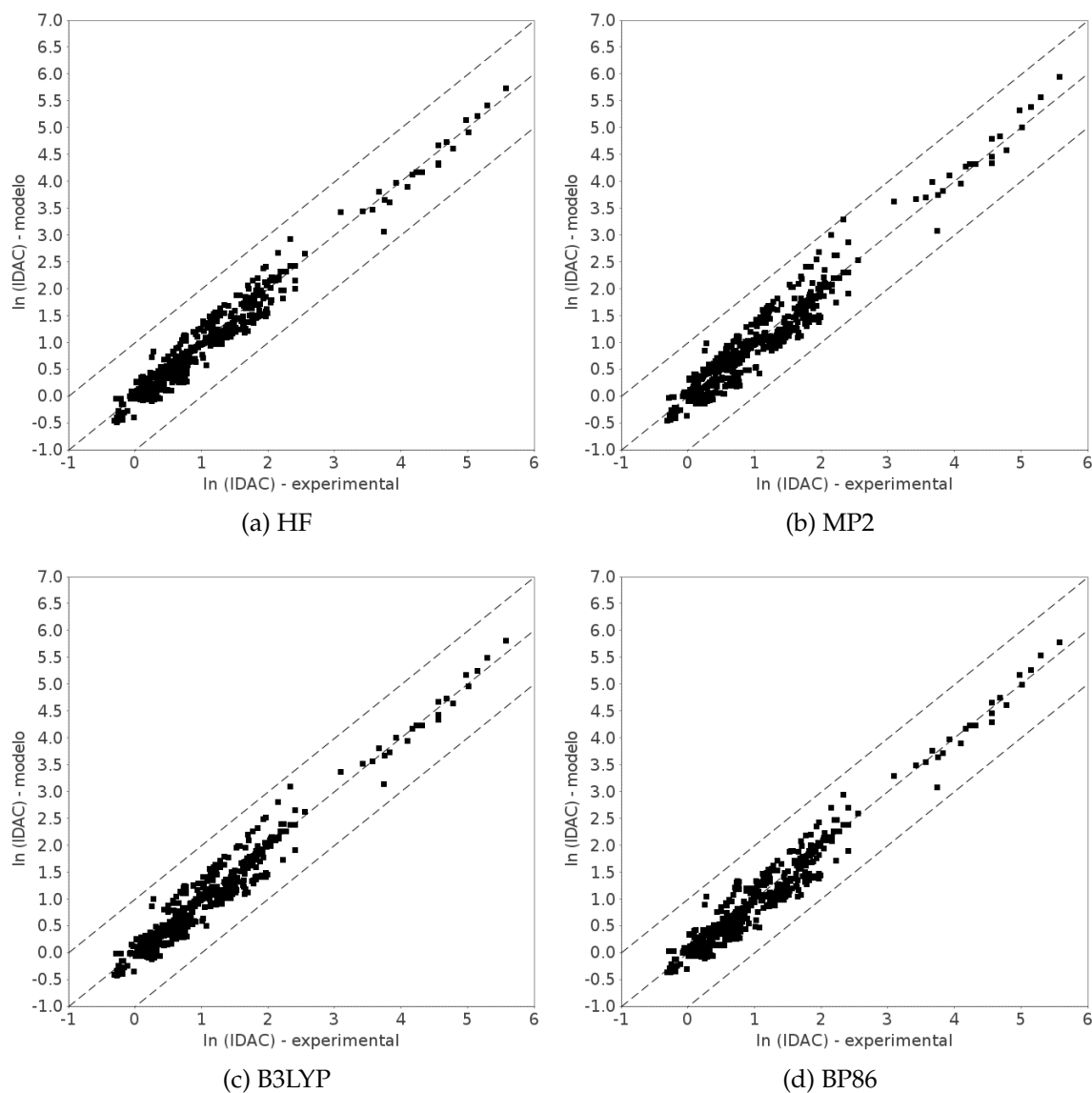


Figura 4.9: Comparação entre as diagonais de IDAC para as diferentes teorias utilizando 6-311G(d,p) como conjunto de funções de base.

Outra comparação, não menos importante, pode ser feita para verificar a precisão do modelo COSMO-SAC utilizando os perfis sigma pertencentes ao banco de dados criado nesse trabalho em frente a outros métodos. Predições de IDAC foram comparadas com aquelas obtidas pelo modelo COSMO-SAC usando perfis sigma disponíveis em outros banco de dados (VT-2005) (MULLINS et al., 2006) e também fazendo-se o uso do modelo UNIFAC(Do) (JAKOB et al., 2006). Esses resultados já foram apresen-

tados também na Tabela 4.1.

Na Figura 4.10(a), os resultados foram obtidos utilizando os perfis sigma gerados por meio do método semi-empírico POA1 (GERBER; SOARES, 2013) (fazendo-se o uso do pacote de química computacional MOPAC). Os métodos semi-empíricos são considerados uma alternativa menos custosa quando comparado à outras abordagens utilizadas nesse trabalho, como pode ser visto na Figura 4.10(c). Os resultados obtidos com os perfis sigma contidos no banco de dados VT-2005 estão apresentados na Figura 4.10(b). Finalmente, os resultados do modelos UNIFAC(Do) são mostrados na Figura 4.10(d). O modelo empíricos UNIFAC(Do) é capaz de prever muito bem os dados de IDAC, uma vez que a maioria desses dados estão provavelmente inclusos nas correlações de sua matriz de parâmetros. Contudo, esse modelo necessita de novos parâmetros de interação para cada novo grupo funcional não incluído em conjunto de parâmetros. COSMO-SAC, por outro lado, é um tipo de modelo preditivo que necessita apenas de informações da substância pura.

As diagonais de IDAC obtidas por meio dos perfis sigma existentes no banco de dados VT-2005 apresentam uma boa correlação, com valores de  $R^2$  e desvio médio absoluto (AAD) próximos daqueles obtidos com o método utilizado nesse trabalho (HF + 6-311G(d,p)). Essa comparação indica que o banco de dados criado conduz a resultados confiáveis utilizando o modelo COSMO-SAC.

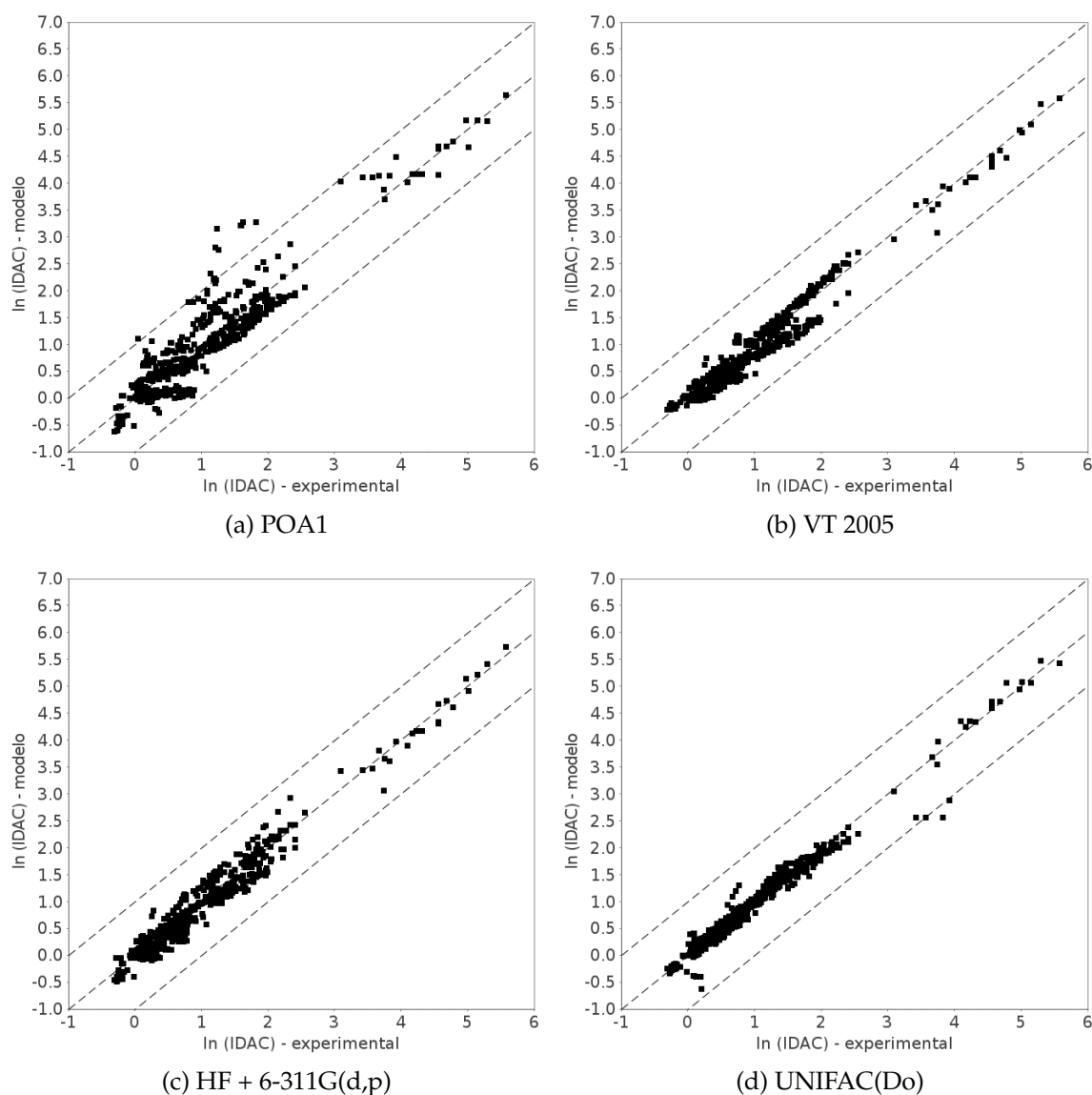


Figura 4.10: Comparação entre as diagonais de IDAC para diferentes métodos e modelos.

### 4.3 Diagramas de Equilíbrio

Nesta seção do trabalho, serão apresentados alguns diagramas de equilíbrio obtidos através dos conjuntos de perfis sigma calculados pelos métodos que apresentaram os três maiores valores de correlação. Vale ressaltar que, embora esteja apresentados curvas para 3 diferentes métodos, para a criação do banco de dados será apenas utilizado a teoria de Hartree-Fock juntamente com o conjunto de funções de base

6-311G(d,p), pois apresentou uma ótima relação entre desvio e custo computacional, dentre aqueles avaliados.

### 4.3.1 Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV)

#### 4.3.1.1 Hidrocarboneto + Hidrocarboneto

Para esse tipo de mistura, contendo apenas hidrocarbonetos, espera-se um comportamento mais próximo da idealidade na fase líquida. Isso se deve ao fato de as substâncias envolvidas em cada tipo de combinação binária apresentarem estruturas muito semelhantes ou, em outras palavras, apenas carbono e hidrogênio. Isso pode ser observado por intermédio da Figura 4.11

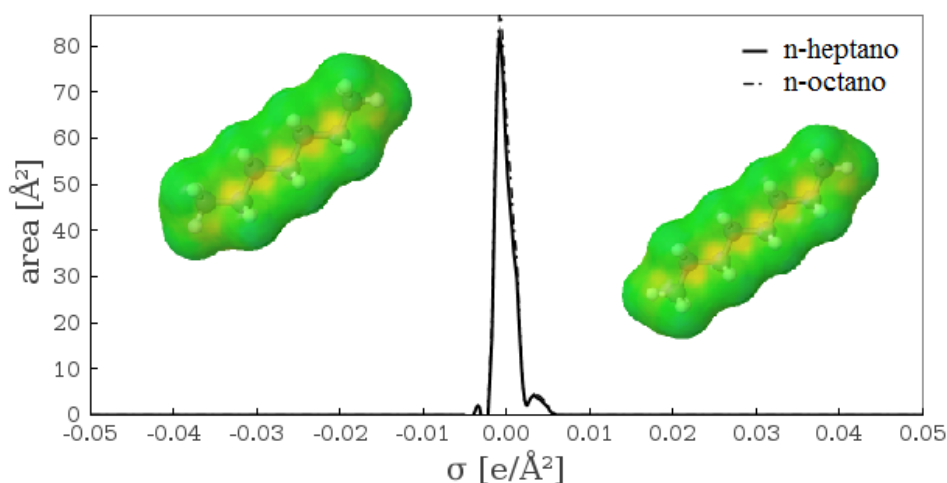


Figura 4.11: Perfil sigma e superfície para as moléculas de (1) n-heptano e (2) n-octano.

A Figura 4.12 ilustra dois diferentes diagramas de equilíbrio sob temperatura constante em baixas pressões para misturas contendo apenas hidrocarbonetos. É possível observar que, para as duas misturas, os dados experimentais são muito bem representados pelo modelo COSMO-SAC utilizando a parametrização e perfis sigma para os três métodos cuja correlação foi mais elevada (HF com 6-311G(d,p), 6-311++G(d,p) e TZVP).

O mesmo acontece nos diagramas mostrados na Figura 4.13. Isso se deve ao fato de que todas as moléculas são relativamente semelhantes, ou seja, compostas apenas

por átomos de carbono e hidrogênio. Isso faz com que esse tipo de mistura apresente valores de coeficiente de atividade que não diferem significativamente da unidade (baixos desvios da idealidade). Então, para esse tipo de dado, o modelo consegue prever muito bem o comportamento das substâncias quando em mistura.

Além disso, pode-se notar que, todos os três conjuntos de perfis sigma com suas respectivas parametrizações, praticamente tem as curvas sobrepostas, ou seja, não apresentaram grande diferença na predição dos dados de equilíbrio. Isso pode ser explicado pelo fato de essas moléculas serem quimicamente semelhantes e o peso nesta modelagem ser, aparentemente, o termo combinatorial de Staverman-Guggenheim.

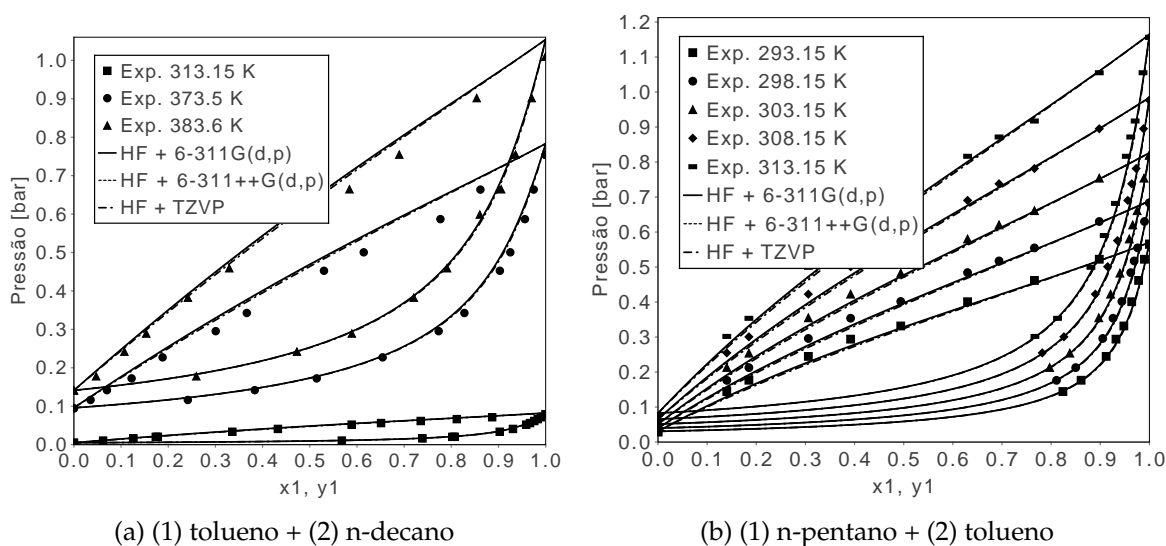


Figura 4.12: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo outras combinações de hidrocarbonetos. Dados experimentais de Góral (1994), Willman e Teja (1985), Li et al. (1972).

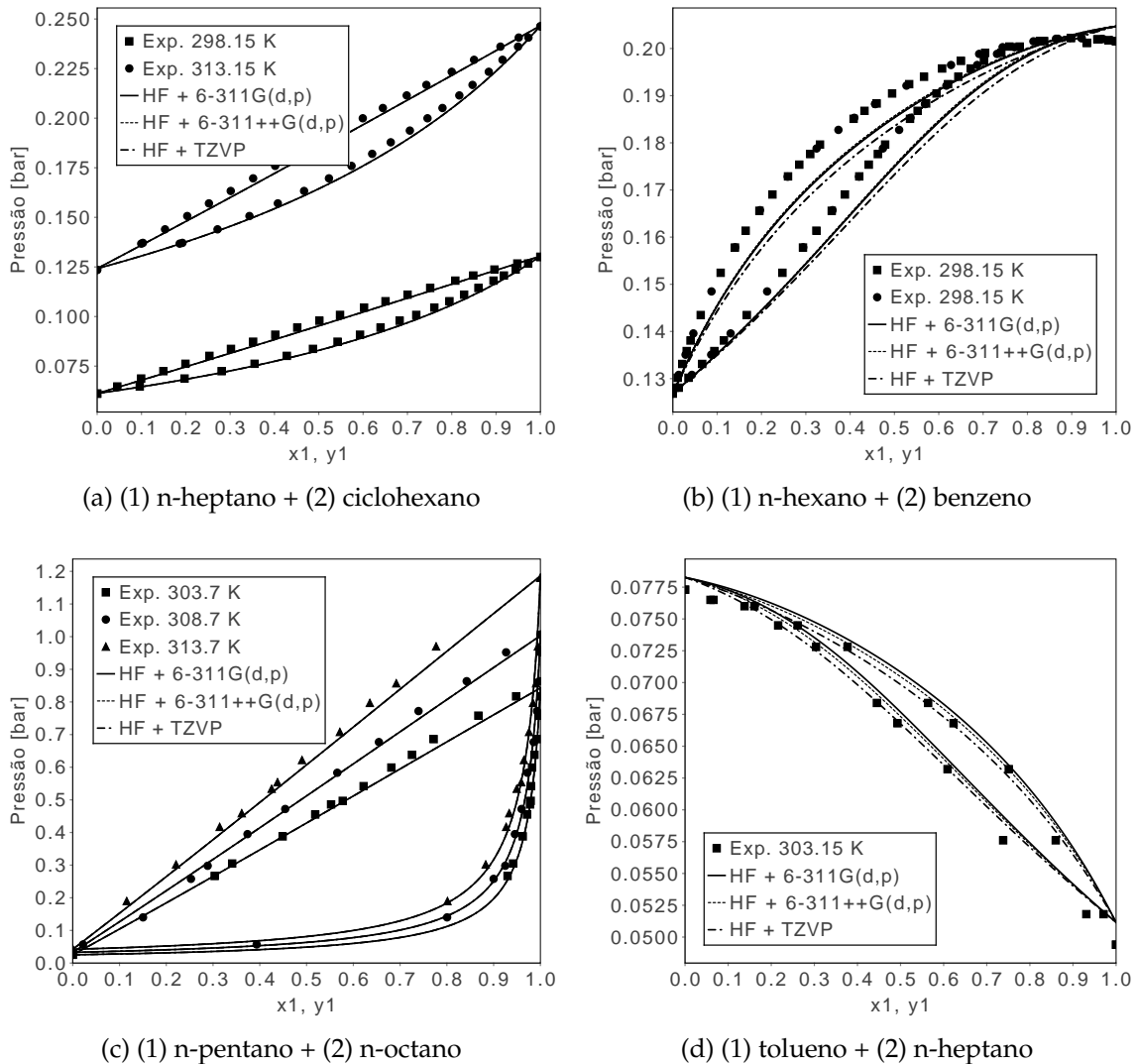


Figura 4.13: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos. Dados experimentais de CHERIC (2016a), CHERIC (2016b), Murray e Martin (1975), Nikheli (1987), Ashcroft et al. (1979).

#### 4.3.1.2 Hidrocarboneto + Cetona

No caso dessas misturas espera-se um comportamento com desvio positivo com relação à Lei de Raoult. Isso se deve ao fato de as substâncias envolvidas em cada tipo de combinação binária apresenta estruturas diferentes, ou seja, uma apenas composta de átomos de carbono e hidrogênio em sua estrutura (o que faz com que a molécula tenha praticamente apenas regiões neutras) e outras, no caso das cetonas, apresentam densidades de cargas induzidas positivas, como mostra a Figura 4.14



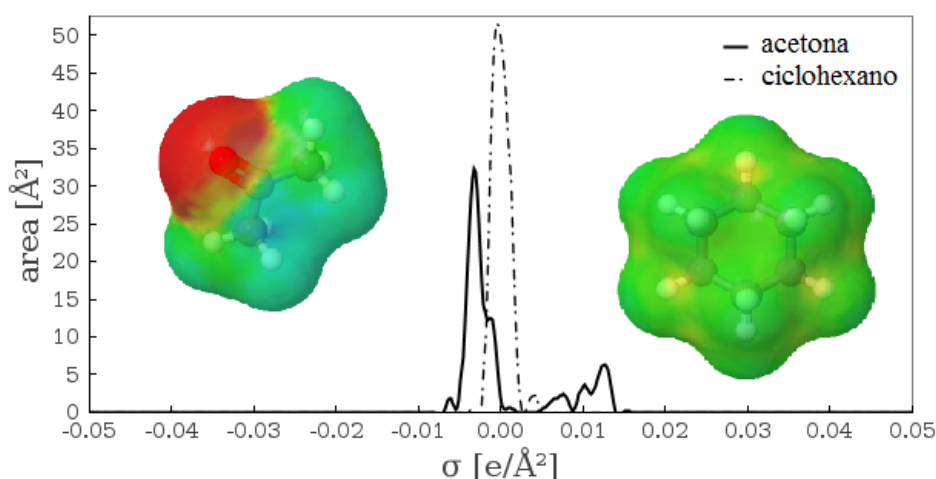


Figura 4.14: Perfil sigma e superfície para as moléculas de acetona (propanona) e ciclohexano.

A Figura 4.15 apresenta diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas binárias de acetonas com hidrocarbonetos em baixas pressões. Como pode ser observado, os três métodos testados e ditos como os três melhores dentre os demais, apresentam diferenças entre si na predição dos valores de equilíbrio, diferentemente do que foi observado para misturas entre hidrocarbonetos.

É possível observar que, para os diagramas de equilíbrios mostrados nas Figuras 4.15(a), 4.15(b) e 4.15(c) os modelos apresentaram um desvio considerável no que se diz respeito aos dados experimentais. Por outro lado, o comportamento dos dados de equilíbrio é mantido, ou seja, o modelo consegue prever, por exemplo, as concentrações azeotrópicas. Isso é importante, pois, quando é tratado de um tipo de equilíbrio que seja desconhecido, é possível obter-se uma ideia de como as substâncias comportam-se quando em mistura.

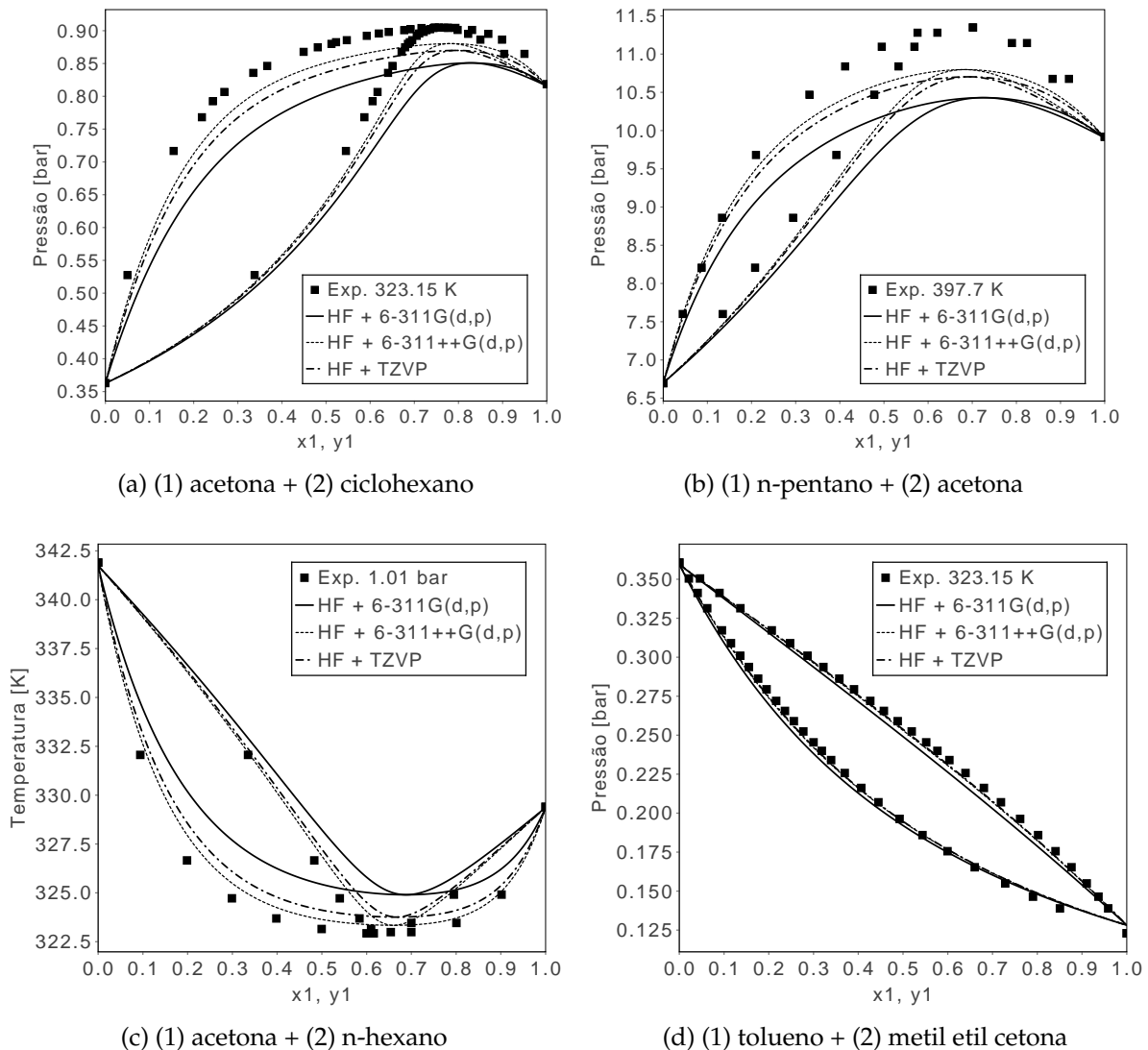


Figura 4.15: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos e cetonas. Dados experimentais de Colin et al. (1984), Campbell et al. (1986), Kudryavtseva e Susarev (1963), Peña et al. (1978).

#### 4.3.1.3 Hidrocarboneto + Aldeído

De uma maneira muito semelhante no que ocorre para as misturas entre cetonas e hidrocarbonetos, para as combinações binárias entre aldeídos e hidrocarbonetos espera-se encontrar desvios positivos com relação à Lei de Raoult. Da mesma forma, uma classe de molécula apresenta apenas regiões com densidade de carga neutra (hidrocarbonetos) e outra com regiões com densidade de carga induzida positiva (região

em vermelho), como verificado na Figura 4.16.

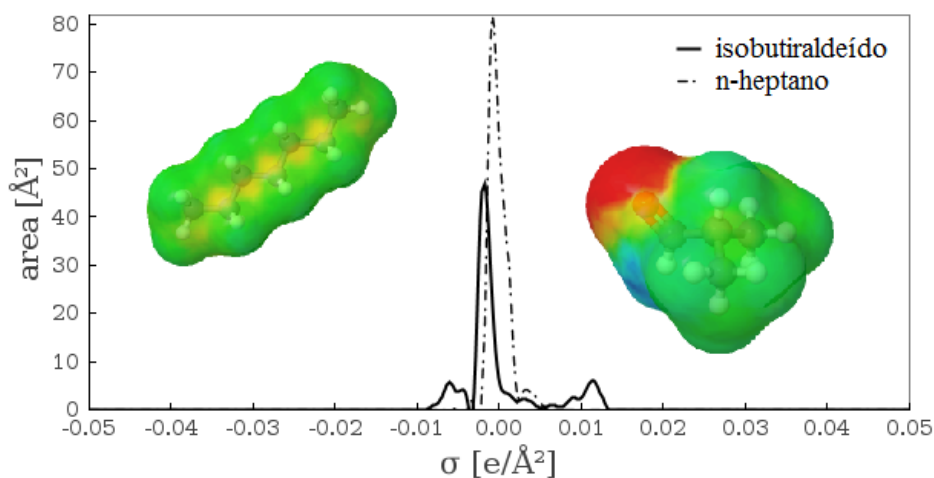
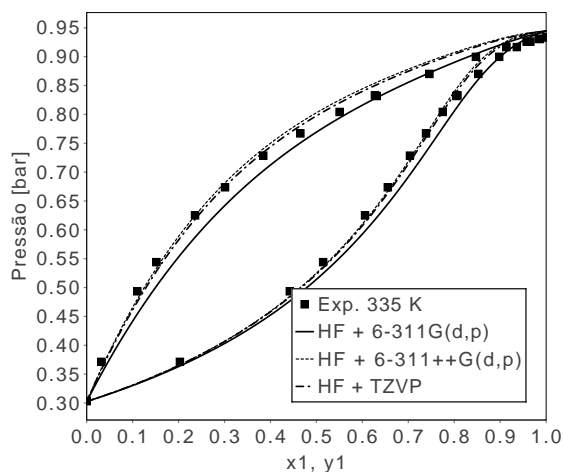


Figura 4.16: Perfil sigma e superfície para as moléculas de isobutiraldeído e n-heptano.

No que se diz respeito ao equilíbrio entre hidrocarboneto e aldeído, está apresentado o diagrama ELV do isobutiraldeído com n-heptano a 335 K através da Figura 4.17.



(a) (1) isobutiraldeído + (2) n-heptano

Figura 4.17: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para mistura contendo hidrocarboneto e aldeído. Dados experimentais de Shealy e Sandler (1985).

Para esse caso, os métodos que utilizaram as funções de base 6-311++G(d,p) e TZVP mostraram-se com uma melhor precisão quando comparadas a 6-311G(d,p). Contudo, o último método (sendo o escolhido para a construção do banco de dados) prevê de forma satisfatória os dados de equilíbrio, mesmo apresentando ligeiro desvio.

#### 4.3.1.4 Hidrocarboneto + Éster

Em misturas que contenham combinações entre hidrocarbonetos e ésteres, é esperado um comportamento não ideal da solução, cujo desvios são positivos com relação à lei de Raoult. O que foi apresentado, no que se refere à distinção entre as moléculas de cetonas e aldeídos, também é válido para os ésteres. A Figura 4.18 mostra as superfícies de carga e os perfis sigma das moléculas de acetato de etila e 1-hexeno.

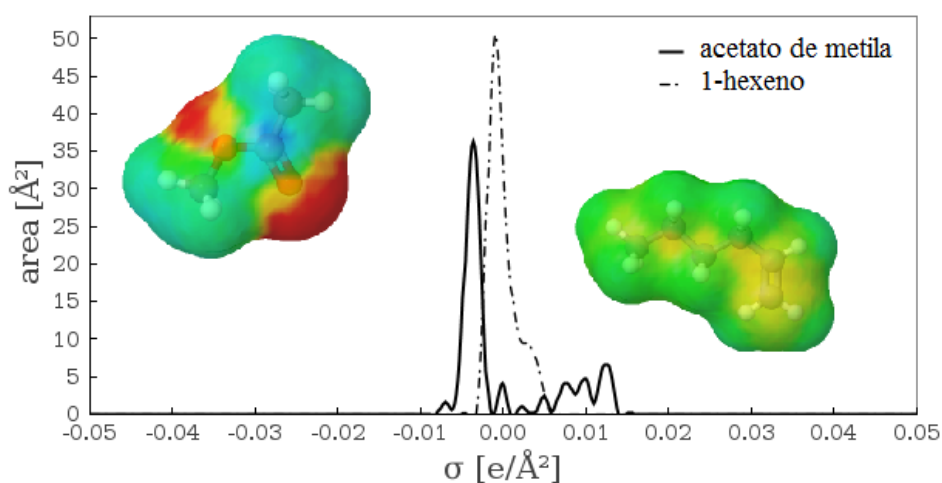
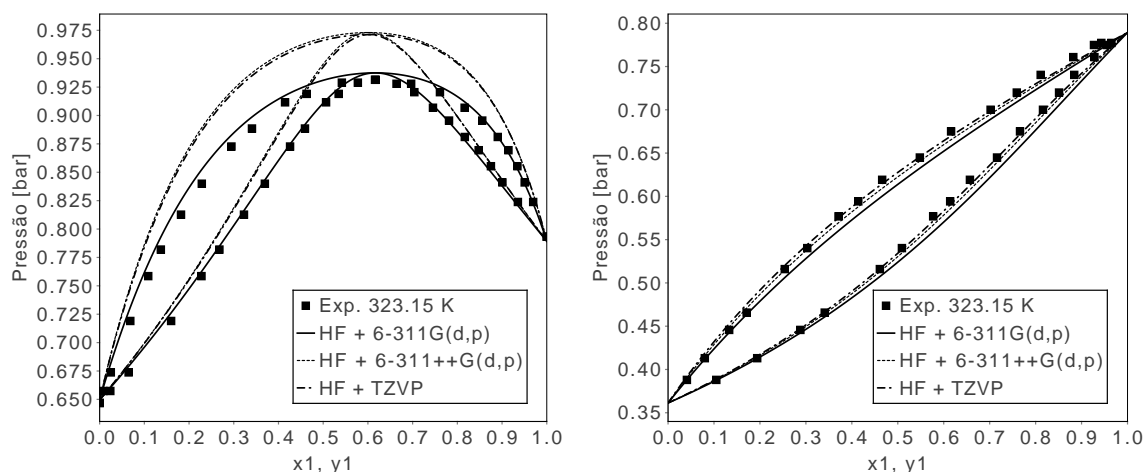


Figura 4.18: Perfil sigma e superfície para as moléculas de acetato de metila e 1-hexeno.

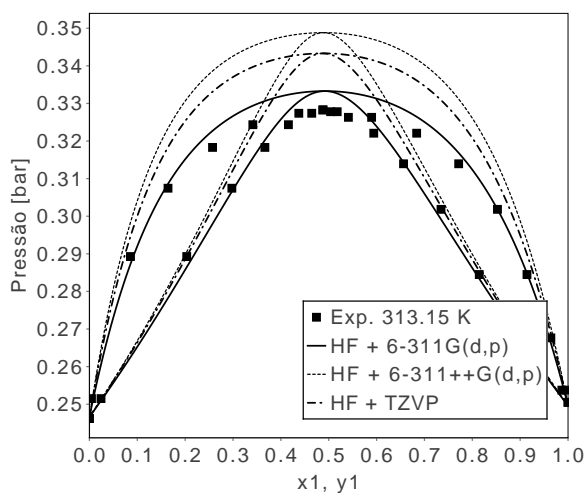
Os diagramas de equilíbrio líquido-vapor apresentados na Figura 4.19 representam misturas envolvendo hidrocarbonetos com ésteres a temperatura constante. Estão sendo mostrados dois diferentes ésteres: acetatos de metila e etila.

Nota-se que os diagramas representados pelas Figuras 4.19(a) e 4.19(c) apresentam desvios maiores aos dados experimentais, quando comparados ao diagrama da Figura 4.19(b). É interessante ressaltar que, mesmo quando os perfis obtidos com outros métodos quânticos (HF com as bases 6-311++G(d,p) e TZVP) levam a maiores desvios, HF com 6-311G(d,p) apresenta o menor desvio aos dados experimentais, como é mostrado nas Figuras 4.19(a) e 4.19(c).



(a) (1) acetato de metila + (2) 1-hexeno

(b) (1) acetato de metila + (2) benzeno



(c) (1) acetato de etila + (2) ciclohexano

Figura 4.19: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos e ésteres. Dados experimentais de Gmehling (1983), NAGATA e HAYASHIDA (1970), Wu e Sandler (1988).

#### 4.3.1.5 Hidrocarboneto + Éter

Por fim, para os éteres também são esperados desvios positivos com relação à Lei de Raoult (quando em mistura com hidrocarbonetos), uma vez que suas moléculas aparentam uma região de carga induzida positiva, mostrada na Figura 4.20.

Como é possível observar, a Figura 4.21 ilustra diagramas ELV entre hidrocarbo-

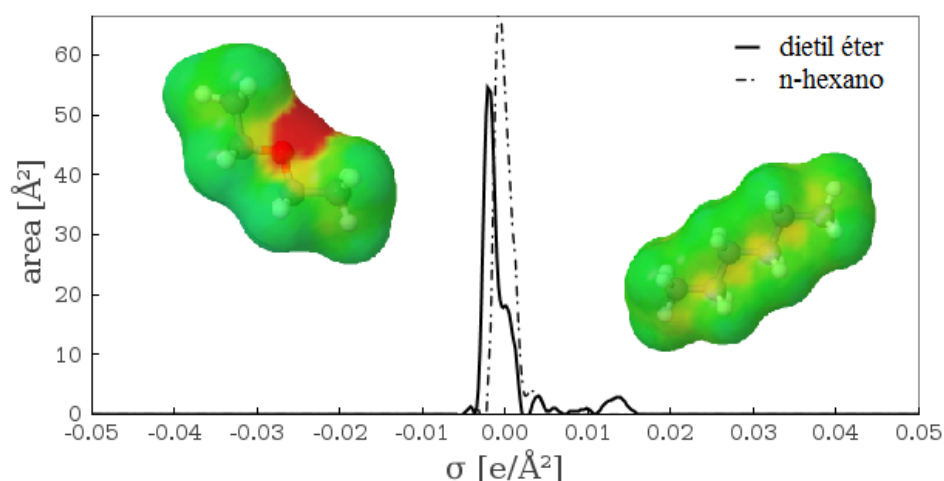
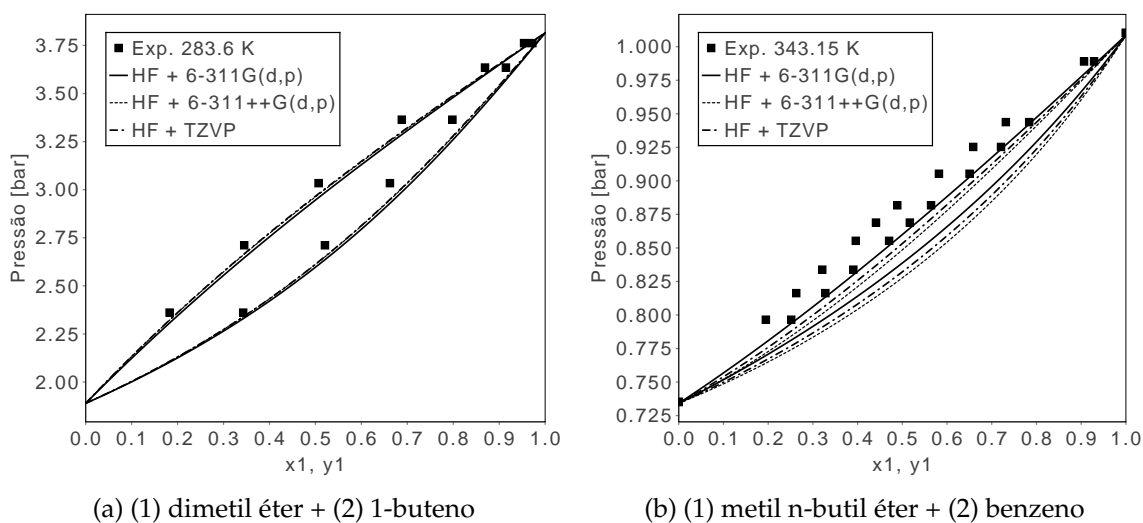


Figura 4.20: Perfil sigma e superfície para as moléculas de dietil éter e n-hexano.

netos e alguns éteres para os três métodos quânticos que apresentaram melhor relação entre desvio e tempo computacional.



(a) (1) dimetil éter + (2) 1-buteno

(b) (1) metil n-butil éter + (2) benzeno

Figura 4.21: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo diferentes combinações de hidrocarbonetos e éteres. Dados experimentais de Fernández et al. (1987), Treszczanowicz e Lu (1986).

O primeiro diagrama (4.21(a)) é o que mostra a melhor correlação aos dados experimentais, embora os valores de equilíbrio que foram preditos estão ligeiramente subestimados com relação aos valores reais. O mesmo ocorre na Figura 4.21(b), porém os desvios apresentados são mais elevados. Contudo, de uma maneira análoga ao que foi mostrado para as misturas de ésteres e hidrocarbonetos, o modelo, de certa forma,

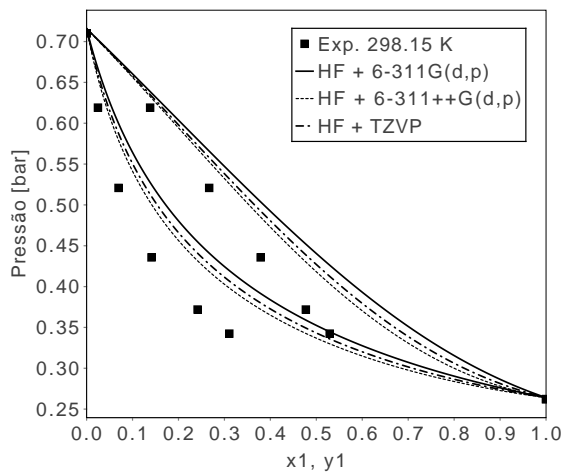
mostra a tendência dos pontos experimentais.

#### 4.3.1.6 Outras Misturas

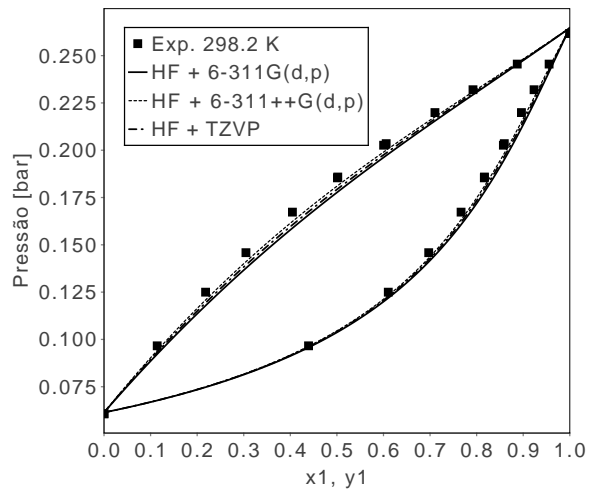
O modelo foi testado, também, com outros tipos de misturas binárias, as quais não se encaixam nas classificações anteriores. Dentre elas então misturas contendo haletos (como é o caso do clorofórmio) e sulfóxido (no caso, dimetilsulfóxido). Esses diagramas estão mostrados na Figura 4.22.

Nota-se que as Figuras 4.22(b) e 4.22(d) demonstram que o modelo, para as três configurações de cálculo quântico mostradas, apresenta precisão na estimação dos dados de equilíbrio. Contudo, para as outras duas, observa-se desvios consideráveis, onde na primeira (Figura 4.22(a)) o comportamento das substância é mantido, contudo, na segunda (Figura 4.22(c)) a tendência é observada, porém o modelo apresenta desvios mais significativos.

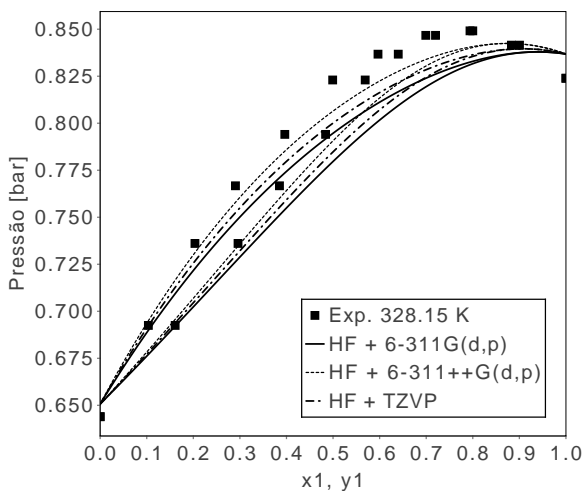
É importante ressaltar que, a mistura mostrada na Figura 4.22(a), apresenta ligação de hidrogênio, visto que os desvios da lei de Raoult são negativos. De acordo com Lin e Sandler (2002), o modelo COSMO-SAC apresenta resultados não satisfatórios no que diz respeito a misturas contendo compostos clorados, especificamente o clorofórmio. Estes compostos apresentam alta polarização nos átomos de hidrogênio durante os cálculos do COSMO. Desta maneira, uma possível solução para reduzir esse efeito seria “desligar” o termo referente a ligação de hidrogênio do modelo. Como no presente trabalho não se considerou esse tipo de interação intermolecular, foi possível utilizar essa mistura e calcular os valores de equilíbrio. Contudo, é visto que para esse sistema, o modelo apresenta desvios consideráveis com relação aos dados experimentais.



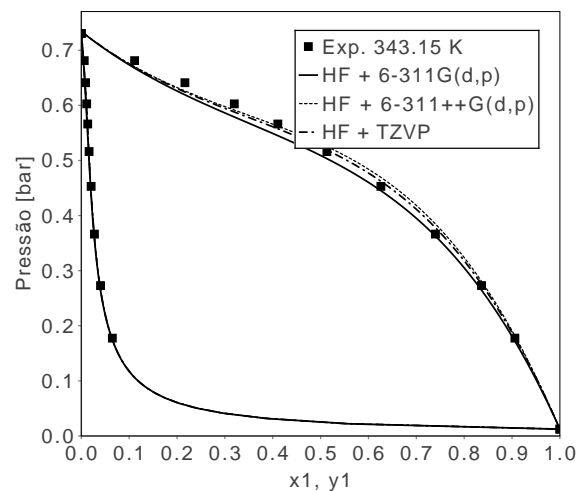
(a) (1) clorofórmio + (2) dietil éter



(b) (1) clorofórmio + (2) n-heptano



(c) (1) clorofórmio + (2) n-hexano



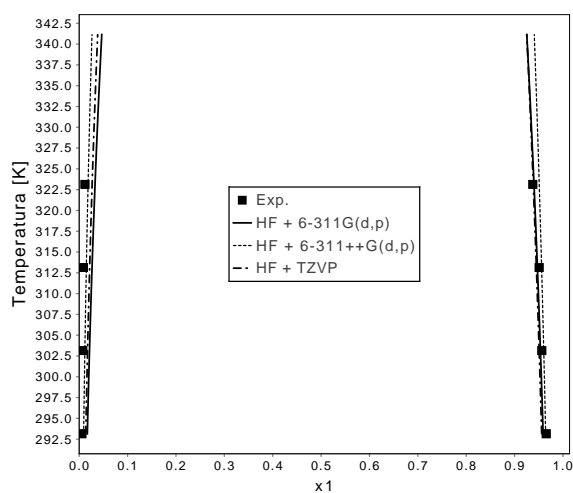
(d) (2) dimetilsulfóxido + (2) benzeno

Figura 4.22: Diagramas de equilíbrio líquido-vapor para misturas contendo outros tipos de combinações de substâncias. Dados experimentais de Handa e Jones (1975), Bissell e Williamson (1975), Kudryavtseva e Susarev (1963), CHERIC (2016c).

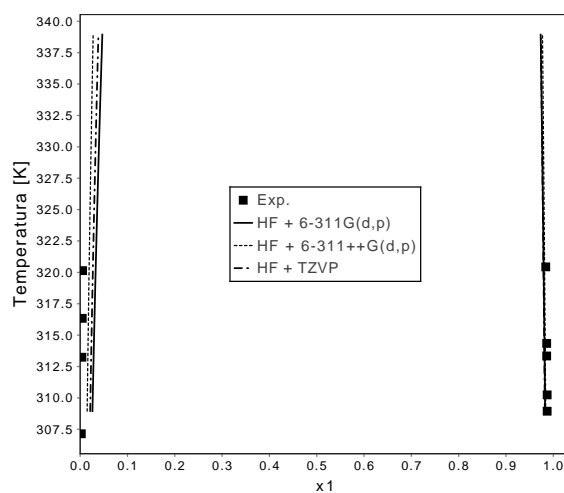
### 4.3.2 Equilíbrio Líquido-Líquido (ELL)

Conforme pode ser observado nas diagonais de IDAC, mostradas na Seção 4.2, existem pontos que apresentam valores elevados de logaritmo natural de IDAC que, dentre as misturas estudadas, representam as combinações de dimetilsulfóxido com hidrocarbonetos. Com altos valores de  $\ln IDAC$  há indícios da existência de equilíbrio entre duas fases líquidas. Esses diagramas estão mostrados na Figura 4.23.

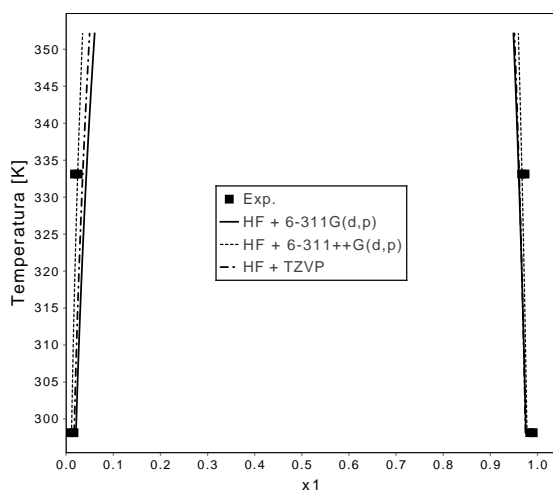




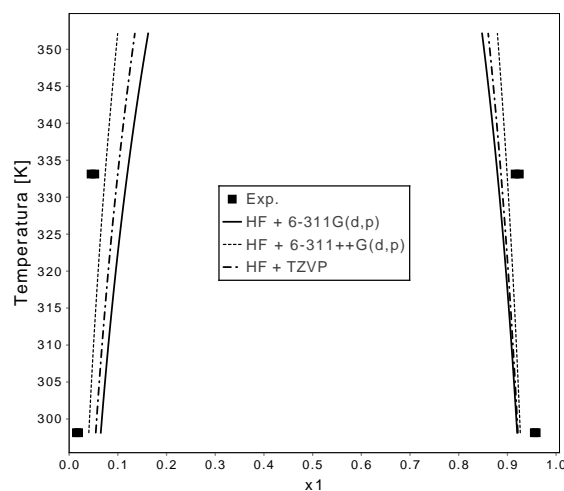
(a) (1) dimetilsulfóxido + (2) ciclohexano



(b) (1) dimetilsulfóxido + (2) n-heptano



(c) (1) dimetilsulfóxido + (2) n-hexano



(d) (1) dimetilsulfóxido + (2) 1-hexeno

Figura 4.23: Diagramas de equilíbrio líquido-líquido para misturas contendo dimetilsulfóxido com diferentes substâncias. Dados experimentais de Nissema (1970), Heinrich e Dožanský (1975), Renon e Prausnitz (1968).

Nota-se que, para as três combinações de cálculo quântico mostradas nos diagramas, o modelo COSMO-SAC conseguiu estimar de forma satisfatória os dados de equilíbrio entre as duas fases líquidas presentes, com exceção do gráfico representado pela Figura 4.23(d), que apresentou maiores desvios na predição de dados de equilíbrio.

## 4.4 Banco de Dados

Após a realização de todos os testes, como mencionado anteriormente, avaliou-se qual combinação de método de cálculo quântico e base de funções apresentou perfis sigma mas satisfatórios. Para isso, valores de IDAC foram estimados por meio do modelo COSMO-SAC e verificou-se a correlação com dados experimentais. A teoria de Hartree-Fock (HF) juntamente com a função de base 6-311G(d,p) apresentou o melhor custo benefício entre precisão e tempo computacional. Fazendo-se o uso desse método, foram gerados perfis sigma e estes depositados em um repositório *online* do GitHub, conforme mostra a Figura 4.24.

LVPP sigma profile database for COSMO-type models

6 commits   1 branch   0 releases   1 contributor   MIT

Branch: master   New pull request   Create new file   Upload files   Find file   Clone or download

fabricio keys.gamess		Latest commit f96a059 10 seconds ago
mol	Fixed file name	4 months ago
sigma	teste	7 minutes ago
.project	create .project	4 months ago
LICENSE.md	Added license	4 months ago
keys.gamess	keys.gamess	just now

Help people interested in this repository understand your project by adding a README.   Add a README

Figura 4.24: Interface do banco de dados criado no GitHub.

Nesse banco de dados pode ser encontrado, além de todos os perfis sigma de diversas substâncias pertencentes a diferentes grupos e funções químicas (totalizando um conjunto de 430 perfis), os arquivos iniciais dessas moléculas, cuja extensão é *\*.mol* e são os arquivos que contém informações iniciais das moléculas, como número, tipo e disposição dos átomos. Também está depositado nesse repositório o *script* de comandos utilizado para executar o GAMESS com a configuração de HF + 6-311G(d,p). É importante ressaltar que todas as informações lá contidas estão disponíveis de forma gratuita para o uso pela comunidade acadêmica, de tal forma que a quantidade de dados lá contida pode ser expandida, visto que foram utilizados apenas ferramentas gratuitas. A página do repositório pode ser acessada por meio do seguinte endereço

eletrônico: <https://github.com/lvpp/sigma.git>.

A partir dos 430 perfis sigma obtidos utilizando o método de cálculo supracitado (HF + 6-311G(d,p)) e o conjunto de parâmetros estimados, foi possível obter dados de IDAC para um conjunto de 1110 tipos de misturas diferentes, totalizando 2629 pontos experimentais. O gráfico de diagonal de IDAC, mostrado na Figura 4.25, foi obtido sem estimar novamente os parâmetros do modelo e, como dito anteriormente, foram utilizados aqueles previamente estimados e apresentados na Tabela 4.1. As referências dos dados experimentais de IDAC utilizados estão mostradas na Tabela B.2 do Apêndice B.

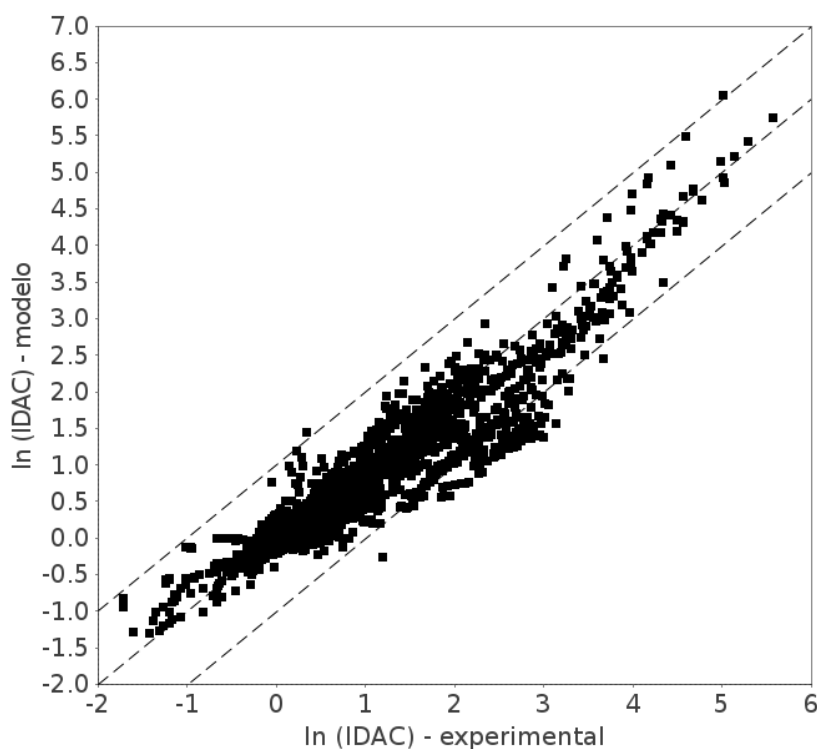


Figura 4.25: Diagonal de IDAC utilizando os perfis sigma do banco de dados, o qual foi criado no GitHub.

É possível observar que grande parte dos dados preditos encontram-se no limite de tolerância de uma unidade logarítmica, apresentando coeficiente de correlação e desvio médio absoluto iguais a 0,8064 e 0,2845, respectivamente. Pelo fato do modelo ser totalmente preditivo, o resultado obtido é muito satisfatório, o que torna possível a utilização do COSMO-SAC, juntamente com o conjunto de perfis sigma gerado, para a predição e estudos de cálculos de equilíbrio.



# Capítulo 5

## Conclusões e Trabalhos Futuros

### 5.1 Conclusões

Com o intuito da criação de um novo banco de dados de perfis sigma para uso em modelos tipo COSMO, diferentes conjuntos de funções de base e de teorias para o cálculo da estrutura eletrônica foram testados e avaliados. A eficácia de cada método de cálculo foi verificada através da predição de valores de coeficientes de atividade a diluição infinita (IDAC) para misturas binárias que não apresentam ligação de hidrogênio, fazendo-se o uso do modelo COSMO-SAC. Para cada combinação de teoria e base, alguns dos parâmetros universais do modelo foram recalibrados. Além disso, avaliou-se também o tempo computacional para a obtenção das estruturas moleculares em cada teste.

Com base nos resultados obtidos e apresentados neste trabalho, pode-se concluir que o modelo COSMO-SAC apresentou um bom desempenho na predição dos valores de IDAC avaliados. Com relação aos métodos de cálculos utilizados, a teoria de Hartree-Fock utilizando como função de base TZVP mostrou-se como a melhor combinação, dentre as estudadas, para a geração dos perfis sigma, pois apresentou menores desvios aos dados experimentais.

Contudo, esse mesmo método quântico com outras funções de base (6-311G(d,p) e 6-311++G(d,p)), mostraram resultados muito semelhantes quando comparados ao que foi obtido com a base TZVP, porém com diferentes custos computacionais. Com isso, a melhor relação entre correlação aos dados experimentais e tempo computacional

total foi obtida com o método de HF e a base 6-311G(d,p). Essa combinação foi a escolhida para a construção do banco de dados. Outra informação muito importante que se pode extrair dos resultados é a influência das bases de funções. A conclusão é que as funções de base tem uma maior influência no resultado do que o próprio método em si (HF, MP2, BP86, B3LYP, etc. . .). Os resultados sugerem que a escolha de uma função de base mais completa é de suma importância para a obtenção de bons resultados.

A partir dos resultados obtidos, foram gerados os perfis sigma para um número maior de substâncias, e essa informação foi depositada em um banco de dados aberto e extensível, criado na plataforma do GitHub. Com isso, outros autores da comunidade acadêmica poderão utilizar, criar novos perfis sigma referentes a outras substâncias e depositar tais informações nesse banco de dados.

## 5.2 Trabalhos Futuros

Como o principal objetivo para trabalhos futuros está a expansão, aprimoramento e melhor organização das informações contidas no banco de dados inicialmente criados (classificação das moléculas por grupos e subgrupos conforme classes químicas, por exemplo). Serão criados arquivos de comando que possibilitem que o usuário, de forma automatizada, possa calcular as estruturas eletrônicas das substâncias a partir de seu próprio computador, caso não deseje realizar o *download* dos perfis sigma já existentes ou necessite de uma substância que não esteja no repositório. Além disso, o estudo de misturas que apresentem interações intermoleculares do tipo ligação de hidrogênio, serão melhores exploradas em trabalhos futuros, como estas não foram consideradas no presente trabalho.

# Referências Bibliográficas

- AHLRICH, R.; BÄR, M.; HÄSER, M.; HORN, H.; KÖLMEL, C. Electronic structure calculations on workstation computers: The program system turbomole. *Chemical Physics Letters*, v. 162, n. 3, p. 165–169, 1989. ISSN 00092614.
- ALCÁCER, L. *Introdução à Química Quântica Computacional*. Lisboa: IST Press Director, 2007. 304 p. ISBN 9789728469559.
- ALESSI, P.; KIKIC, I.; FREDENSLUND, A.; RASMUSSEN, P. UNIFAC and infinite dilution activity coefficients. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 60, n. 2, p. 300–304, apr 1982. ISSN 00084034.
- ASHCROFT, S. J.; CLAYTON, A. D.; SHEARN, R. B. Isothermal vapor-liquid equilibria for the systems toluene-n-heptane, toluene-propan-2-ol, toluene-sulfolane, and propan-2-ol-sulfolane. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 24, n. 3, p. 195–199, jul 1979. ISSN 0021-9568.
- BECKE, A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review A*, v. 38, n. 6, p. 3098–3100, 1988. ISSN 10502947.
- BERMUDEZ, A.; FOCO, G.; BOTTINI, S. B. Infinite Dilution Activity Coefficients in Tributyl Phosphate and Triacetin. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 45, n. 6, p. 1105–1107, nov 2000. ISSN 0021-9568.
- BINKLEY, J. S.; POPLE, J. a.; HEHRE, W. J. Self-Consistent Molecular-Orbital Methods. 21. Small Split-Valence Basis-Sets for 1st-Row Elements. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 102, n. 3, p. 939–947, 1980. ISSN 0002-7863.
- BISSELL, T.; WILLIAMSON, A. Vapour pressures and excess Gibbs energies of n-hexane and of n-heptane + carbon tetrachloride and + chloroform at 298.15 K. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 7, n. 2, p. 131–136, feb 1975. ISSN 00219614.
- BOUILLOT, B.; TEYCHENÉ, S.; BISCANS, B. An evaluation of COSMO-SAC model and its evolutions for the prediction of drug-like molecule solubility: Part 1. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 52, n. 26, p. 9276–9284, 2013. ISSN 08885885.
- CAMPBELL, S. W.; WILSAK, R. A.; THODOS, G. Isothermal vapor-liquid equilibrium measurements for the n-pentane-acetone system at 372.7, 397.7, and 422.6 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 31, n. 4, p. 424–430, oct 1986. ISSN 0021-9568.
- CASTELLS, C. B.; EIKENS, D. I.; CARR, P. W. Headspace Gas Chromatographic Measurements of Limiting Activity Coefficients of Eleven Alkanes in Organic Solvents at 25 C. 1. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 45, n. 2, p. 369–375, mar 2000. ISSN 0021-9568.

- CHEN, W. L.; HSIEH, C. M.; YANG, L.; HSU, C. C.; LIN, S. T. A Critical Evaluation on the Performance of COSMO-SAC Models for Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibrium Predictions Based on Different Quantum Chemical Calculations. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 55, n. 34, p. 9312–9322, 2016. ISSN 15205045.
- CHENG, J.-S.; TANG, M.; CHEN, Y.-P. Correlation and comparison of the infinite dilution activity coefficients in aqueous and organic mixtures from a modified excess Gibbs energy model. *Fluid Phase Equilibria*, v. 217, n. 2, p. 205–216, mar 2004. ISSN 03783812.
- CHERIC. *Binary Vapor-Liquid Equilibrium Data*. 2016. Disponível em: <<https://www.cheric.org/research/kdb/hcvle/showvle.php?vleid=1593>>.
- CHERIC. *Binary Vapor-Liquid Equilibrium Data*. 2016. Disponível em: <<https://www.cheric.org/research/kdb/hcvle/showvle.php?vleid=1592>>.
- CHERIC. *Binary Vapor-Liquid Equilibrium Data*. 2016. Disponível em: <<https://www.cheric.org>>.
- COLIN, A. C.; COMPOSTIZO, A.; Díaz Peña, M. Excess Gibbs energy and excess volume of (cyclohexane + 2-propanone) and of (cyclohexane+2-butanone). *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 16, n. 5, p. 497–502, may 1984. ISSN 00219614.
- CRAMER, C. J. *Essentials of Computational Chemistry Theories and Models*. [S.l.: s.n.], 2004. 334–342 p. ISSN 09642633. ISBN 0470091819.
- DALLINGA, L.; SCHILLER, M.; GMEHLING, J. Measurement of activity coefficients at infinite dilution using differential ebulliometry and non-steady-state gas-liquid chromatography. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 38, n. 1, p. 147–155, jan 1993. ISSN 0021-9568.
- DDB. *Dortmund Data Bank*. 2017. Disponível em: <[www.ddbst.com](http://www.ddbst.com)>.
- DELLEY, B. From molecules to solids with the DMol3 approach. *Journal of Chemical Physics*, v. 113, n. 18, p. 7756–7764, 2000. ISSN 00219606.
- DERR, E. L.; DEAL, C. Analytical Solutions of Groups: Correlation of Activity Coefficients Through Structural Group Parameters. *Chem. E. Symp*, v. 1, n. 32, p. 3–40, 1969.
- FERNÁNDEZ, M. P.; NOLES, J.; ZOLLWEG, J.; STREETT, W. Fluid phase equilibria for the binary system dimethyl ether / 1-butene. *Fluid Phase Equilibria*, v. 36, p. 91–97, oct 1987. ISSN 03783812.
- FRANKE, R.; HANNEBAUER, B. On the influence of basis sets and quantum chemical methods on the prediction accuracy of COSMO-RS. *Physical chemistry chemical physics : PCCP*, v. 13, n. 48, p. 21344–50, 2011. ISSN 1463-9084.
- FREDENSLUND, A.; JONES, R. L.; PRAUSNITZ, J. M. Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. *AIChE Journal*, v. 21, n. 6, p. 1086–1099, nov 1975. ISSN 0001-1541.
- FRISCH, M. J.; HEAD-GORDON, M.; POPLE, J. A. A direct MP2 gradient method. *Chemical Physics Letters*, v. 166, n. 3, p. 275–280, 1990. ISSN 00092614.



- FRISCH, M. J.; HEAD-GORDON, M.; POPL, J. A. Semi-direct algorithms for the MP2 energy and gradient. *Chemical Physics Letters*, v. 166, n. 3, p. 281–289, 1990. ISSN 00092614.
- FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E.; ROBB, M. A.; CHEESEMAN, J. R.; SCALMANI, G.; BARONE, V.; MENNUCCI, B.; PETERSON, G. A.; NAKATSUJI, H.; CARICATO, M.; LI, X.; HRATCHIAN, H. P.; IZMAYLOV, A. F.; BLOINO, J.; ZHENG, G.; SONNENBERG, J. L.; HADA, M.; EHARA, M.; TOYOTA, K.; FUKUDA, R.; HASEGAWA, J.; ISHIDA, M.; NAKAJIMA, T.; HONDA, Y.; KITAO, O.; NAKAI, H.; VREVEN, T.; MONTGOMERY Jr., J. A.; PERALTA, J. E.; OGLIARO, F.; BEARPARK, M.; HEYD, J. J.; BROTHERS, E.; KUDIN, K. N.; STAROVEROV, V. N.; KOBAYASHI, R.; NORMAND, J.; RAGHAVACHARI, K.; RENDELL, A.; BURANT, J. C.; IYENGAR, S. S.; TOMASI, J.; COSSI, M.; REGA, N.; MILLAM, J. M.; KLENE, M.; KNOX, J. E.; CROSS, J. B.; BAKKEN, V.; ADAMO, C.; JARAMILLO, J.; GOMPERS, R.; STRATMANN, R. E.; YAZYEV, O.; AUSTIN, A. J.; CAMMI, R.; POMELLI, C.; OCHTERSKI, J. W.; MARTIN, R. L.; MOROKUMA, K.; ZAKRZEWSKI, V. G.; VOTH, G. A.; SALVADOR, P.; DANNENBERG, J. J.; DAPPRICH, S.; DANIELS, A. D.; FARKAS, Ö.; FORESMAN, J. B.; ORTIZ, J. V.; CIOSLOWSKI, J.; FOX, D. J. Gaussian-09 Revision E.01. 2009. Gaussian Inc. Wallingford CT 2009.
- FUKUCHI, K.; MIYOSHI, K.; ARAI, Y. Measurement and correlation of infinite dilution activity coefficients of ethers in alkanes. *Fluid Phase Equilibria*, v. 136, n. 1-2, p. 135–139, nov 1997. ISSN 03783812.
- GERBER, R. P.; SOARES, R. d. P. Prediction of Infinite-Dilution Activity Coefficients Using UNIFAC and COSMO-SAC Variants. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 16, p. 7488–7496, aug 2010. ISSN 0888-5885.
- GERBER, R. P.; SOARES, R. P. Assessing the reliability of predictive activity coefficient models for molecules consisting of several functional groups. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 30, n. 1, p. 1–11, mar 2013. ISSN 0104-6632.
- GMEHLING, J. Isothermal vapor-liquid equilibria in binary systems formed by esters with alkenes. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 28, n. 1, p. 27–30, jan 1983. ISSN 0021-9568.
- GMEHLING, J. From UNIFAC to Modified UNIFAC to PSRK with the Help of DDB. *Fluid Phase Equilibria*, v. 107, p. 1–29, 1995.
- GMEHLING, J.; TIEGS, D.; MEDINA, A.; SOARES, M.; BASTOS, J.; ALESSI, P.; KIKIC, I.; SCHILLER, M.; MENKE, J. *Dechema Chemistry Data Series*. [S.l.]: Deutsche Gesellschaft für Chemisches Apparatewesen., 1986.
- GÓRAL, M. Vapour-liquid equilibria in non-polar mixtures. III. Binary mixtures of alkylbenzenes and n-alkanes at 313.15 K. *Fluid Phase Equilibria*, v. 102, n. 2, p. 275–286, dec 1994. ISSN 03783812.
- GORDON, M. S.; BINKLEY, J. S.; POPL, J. A.; PIETRO, W. J.; HEHRE, W. J. Self-consistent molecular-orbital methods. 22. Small split-valence basis sets for second-row elements. *Journal of the American Chemical Society*, v. 104, n. 10, p. 2797–2803, 1982. ISSN 0002-7863.
- HANDA, Y. P.; JONES, D. E. Vapor Pressures of Triethylamine + Chloroform and of Diethyl Ether + Chloroform at 298.15 K. *Canadian Journal of Chemistry*, v. 53, n. 21, p. 3299–3304, nov 1975. ISSN 0008-4042.

- HANWELL, M. D.; CURTIS, D. E.; LONIE, D. C.; VANDERMEERSCH, T.; ZUREK, E.; HUTCHISON, G. R. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, v. 4, n. 1, p. 17, 2012. ISSN 1758-2946.
- HEAD-GORDON, M.; HEAD-GORDON, T. Analytic MP2 frequencies without fifth-order storage. Theory and application to bifurcated hydrogen bonds in the water hexamer. *Chemical Physics Letters*, v. 220, n. 1-2, p. 122–128, 1994. ISSN 00092614.
- HEAD-GORDON, M.; POPLE, J. A.; FRISCH, M. J. MP2 energy evaluation by direct methods. *Chemical Physics Letters*, v. 153, n. 6, p. 503–506, 1988. ISSN 00092614.
- HEINRICH, J.; DOJČANSKÝ, J. Activity coefficients in binary systems of limited mutual solubility. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, v. 40, n. 4, p. 940–946, 1975. ISSN 0010-0765.
- HSIEH, C.-M.; SANDLER, S. I.; LIN, S.-T. Improvements of COSMO-SAC for vapor–liquid and liquid–liquid equilibrium predictions. *Fluid Phase Equilibria*, v. 297, n. 1, p. 90–97, oct 2010. ISSN 03783812.
- J. J. P. Stewart. *MOPAC2016*. Colorado Springs, CO, USA: Stewart Computational Chemistry, 2016.
- JAKOB, A.; GREENSEMANN, H.; LOHMANN, J.; GMEHLING, J. Further Development of Modified UNIFAC (Dortmund): Revision and Extension 5. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 45, n. 23, p. 7924–7933, nov 2006. ISSN 0888-5885.
- KIKIC, I.; ALESSI, P.; RASMUSSEN, P.; FREDENSLUND, A. On the combinatorial part of the UNIFAC and UNIQUAC models. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 58, n. 2, p. 253–258, apr 1980. ISSN 00084034.
- KLAMT, A. Conductor-like Screening Model for Real Solvents: A New Approach to the Quantitative Calculation of Solvation Phenomena. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 99, n. 7, p. 2224–2235, feb 1995. ISSN 0022-3654.
- KLAMT, A.; JONAS, V.; BURGER, T.; LOHRENZ, J. C. W. Refinement and Parametrization of COSMO-RS. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 102, n. 26, p. 5074–5085, jun 1998. ISSN 1089-5639.
- KLAMT, A.; SCHÜÜRMAN, G. COSMO: a new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, n. 5, p. 799–805, 1993. ISSN 0300-9580.
- KOCH, W.; HOLTHAUSEN, M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. [S.l.: s.n.], 2001. 294 p. ISSN 14337851. ISBN 3527303723.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, v. 140, n. 4A, 1965. ISSN 0031899X.
- KORETSKY, M. D. *Engineering and Chemical Thermodynamics*. 2. ed. Hoboken: Wiley, 2013. 704 p. ISBN 978-1-118-54974-2.
- KRISHNAN, R.; BINKLEY, J. S.; SEEGER, R.; POPLE, J. A. Self-consistent molecular orbital methods. XX. A basis set for correlated wave functions. *The Journal of Chemical Physics*, v. 72, n. 1, p. 650–654, 1980. ISSN 00219606.

- KUDRYAVTSEVA, L. S.; SUSAREV, M. P. Liquid-Vapor Equilibrium in the Systems Acetone-Hexane and Hexane-Ethyl Alcohol at 35, 45 and 55 and 760 mm of Hg. *J. Appl. Chem. USSR*, v. 36, p. 1419–1424, 1963.
- LAAR, J. J. van. Die Schmelz- oder Erstarrungskurven ben binaren Systemen, wenn die feste Phase ein Gemisch der beiden Komponenten ist, und eine Verbindung auftritt. *Z. Phys. Chem.*, v. 66, p. 197–237, 1909.
- LARSEN, B. L.; RASMUSSEN, P.; FREDENSLUND, A. A modified UNIFAC group-contribution model for prediction of phase equilibria and heats of mixing. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 26, n. 11, p. 2274–2286, nov 1987. ISSN 0888-5885.
- LAZZARONI, M. J.; BUSH, D.; ECKERT, C. A.; FRANK, T. C.; GUPTA, S.; OLSON, J. D. Revision of MOSCED Parameters and Extension to Solid Solubility Calculations. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 44, n. 11, p. 4075–4083, may 2005. ISSN 0888-5885.
- LEE, C.; YANG, W.; PARR, R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, v. 37, n. 2, p. 785–789, 1988. ISSN 01631829.
- LEONHARD, K.; VEVERKA, J.; LUCAS, K. A comparison of mixing rules for the combination of COSMO-RS and the Peng-Robinson equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, v. 275, n. 2, p. 105–115, 2009. ISSN 03783812.
- LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*. 2000. 102 p.
- LEWARS, E. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. p. 471, 2003. ISSN 0717-6163.
- LEWIS, G. N. The Law of Physico-Chemical Change. *Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences*, v. 37, n. 3, p. 49, 1901. ISSN 01999818.
- LI, I. P. C.; WONG, Y.-W.; CHANG, S.-D.; LU, B. C. Y. Vapor-liquid equilibria in systems n-hexane-benzene and n-pentane-toluene. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 17, n. 4, p. 492–498, oct 1972. ISSN 0021-9568.
- LIN, S.-T.; SANDLER, S. I. A Priori Phase Equilibrium Prediction from a Segment Contribution Solvation Model. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 41, n. 5, p. 899–913, 2002. ISSN 0888-5885.
- MIYANO, Y.; UNO, S.; TOCHIGI, K.; KATO, S.; YASUDA, H. Henry's Law Constants and Infinite Dilution Activity Coefficients of Propane, Propene, Butane, 2-Methylpropane, 1-Butene, 2-Methylpropene, trans -2-Butene, cis -2-Butene, 1,3-Butadiene, Dimethylether, Chloroethane, 1,1-Difluoroethane, and Hexane in Tetrah. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 52, n. 6, p. 2245–2249, nov 2007. ISSN 0021-9568.
- MØLLER, C.; PLESSET, M. S. Note on an approximation treatment for many-electron systems. *Physical Review*, v. 46, n. 7, p. 618–622, 1934. ISSN 0031899X.
- MULLINS, E.; LIU, Y. A.; GHADERI, A.; FAST, S. D. Sigma profile database for predicting solid solubility in pure and mixed solvent mixtures for organic pharmacological compounds with COSMO-based thermodynamic methods. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 47, n. 5, p. 1707–1725, 2008. ISSN 08885885.

- MULLINS, E.; OLDLAND, R.; LIU, Y. A.; WANG, S.; SANDLER, S. I.; CHEN, C.-C.; ZWOLAK, M.; SEAVEY, K. C. Sigma-Profile Database for Using COSMO-Based Thermodynamic Methods. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 45, n. 12, p. 4389–4415, jun 2006. ISSN 0888-5885.
- MURRAY, R.; MARTIN, M. A continuous-dilution device for the measurement of static vapour pressures of binary liquid mixtures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 7, n. 9, p. 839–846, sep 1975. ISSN 00219614.
- MUZENDA, E. From UNIQUAC to Modified UNIFAC Dortmund : A Discussion. *3rd International Conference on Medical Sciences and Chemical Engineering (ICMSCE'2013)*, n. 5, p. 32–41, 2013.
- NAGATA, I.; HAYASHIDA, H. VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM DATA FOR THE TERNARY SYSTEMS: METHYL ACETATE-2-PROPANOL-BENZENE AND METHYL ACETATE-CHLOROFORM-BENZENE. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 3, n. 2, p. 161–166, 1970. ISSN 1881-1299.
- NAGATA, I.; KOYABU, J. Phase Equilibria by effective UNIFAC group-contribution method. *Thermochimica Acta*, v. 48, n. 1-2, p. 187–211, sep 1981. ISSN 00406031.
- NELDER, J. A.; MEAD, R. A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal*, v. 7, n. 4, p. 308–313, jan 1965. ISSN 0010-4620.
- NIKHELI, A. H. D. E. *Phase equilibria in mixtures containing alkanes and alcohols*. 277 p. Tese (Doutorado) — Loughborough University of Technology Library, 1987.
- NISSEMA, A. *Thermodynamic excess functions of the ternary system dimethyl sulphoxide - cyclohexane - benzene*. Helsinki: Suomalainen Tiedeakatemia, 1970. 153 p.
- PEÑA, M. D.; COLIN, A.; COMPOSTIZO, A. Isothermal liquid-vapour equilibria 1. The binary systems formed by toluene + methyl ethyl ketone, + methyl propyl ketone, and + methyl isobutyl ketone. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 10, n. 4, p. 337–341, apr 1978. ISSN 00219614.
- PERDEW, J. P. Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas. *Physical Review B*, v. 33, n. 12, p. 8822–8824, 1986. ISSN 01631829.
- PIETRO, W. J.; FRANCL, M. M.; HEHRE, W. J.; DEFREES, D. J.; POPLE, J. A.; BINKLEY, J. S. Self-Consistent Molecular-Orbital Methods.24. Supplemented Small Split-Valence Basis-Sets for 2nd-Row Elements. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 104, n. 1980, p. 5039–5048, 1982. ISSN 0002-7863.
- PÖLLMANN, P.; LÖBBECKE, M. UNIFAC activity coefficient derivatives. *Gas Separation & Purification*, v. 10, n. 3, p. 177–180, jan 1996. ISSN 09504214.
- PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. de. *Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria*. 3. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1999. ISBN 0139777458.
- RACHFORD, H.; RICE, J. Procedure for Use of Electronic Digital Computers in Calculating Flash Vaporization Hydrocarbon Equilibrium. *Journal of Petroleum Technology*, v. 4, n. 10, p. 19–3, oct 1952. ISSN 0149-2136.
- RENON, H.; PRAUSNITZ, J. M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. *AIChE Journal*, v. 14, n. 1, p. 135–144, jan 1968. ISSN 0001-1541.

- SÆBØ, S.; ALMLOF, J. Avoiding the integral storage bottleneck in LCAO calculations of electron correlation. *Chemical Physics Letters*, v. 154, n. 1, p. 83–89, jan 1989. ISSN 00092614.
- SCHACHT, C. S.; ZUBEIR, L.; LOOS, T. W. de; GROSS, J. Application of Infinite Dilution Activity Coefficients for Determining Binary Equation of State Parameters. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 16, p. 7646–7653, aug 2010. ISSN 0888-5885.
- SCHÄFER, A.; HUBER, C.; AHLRICHS, R. Fully optimized contracted Gaussian basis sets of triple zeta valence quality for atoms Li to Kr. *The Journal of Chemical Physics*, v. 100, n. 8, p. 5829, 1994. ISSN 00219606.
- SCHMIDT, M. W.; BALDRIDGE, K. K.; BOATZ, J. A.; ELBERT, S. T.; GORDON, M. S.; JENSEN, J. H.; KOSEKI, S.; MATSUNAGA, N.; NGUYEN, K. A.; SHYJUN, S. U.; DUPUIS, M.; MONTGOMERY, J. A. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. v. 14, n. 11, p. 1347–1363, 1993.
- SCHRÖDINGER, E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review*, v. 28, n. 6, p. 1049–1070, 1926. ISSN 0031899X.
- SCHULT, C. J.; NEELY, B. J.; ROBINSON, R.; GASEM, K.; TODD, B. A. Infinite-dilution activity coefficients for several solutes in hexadecane and in n-methyl-2-pyrrolidone (NMP): experimental measurements and UNIFAC predictions. *Fluid Phase Equilibria*, v. 179, n. 1-2, p. 117–129, mar 2001. ISSN 03783812.
- SHEALY, G. S.; SANDLER, S. I. Vapor-liquid equilibria of  $\{x\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}+(1-x)\text{C}_7\text{H}_{16}\}(\text{l})$  and  $\{x\text{CH}_3\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5+(1-x)\text{C}_7\text{H}_{16}\}(\text{l})$ . *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 17, n. 2, p. 143–150, feb 1985. ISSN 00219614.
- SMITH, J. M.; NESS, H. C. V.; ABBOTT, M. M. *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*. Sétima edição. [S.l.]: LTC, 2007.
- SOARES, R. d. P.; GERBER, R. P. Functional-Segment Activity Coefficient Model. 1. Model Formulation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 52, n. 32, p. 11159–11171, aug 2013. ISSN 0888-5885.
- SOARES, R. d. P.; GERBER, R. P.; POSSANI, L. F. K.; STAUDT, P. B. Functional-Segment Activity Coefficient Model. 2. Associating Mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 52, n. 32, p. 11172–11181, aug 2013. ISSN 0888-5885.
- SZABO, A.; OSTLUND, N. S. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. 1996. 480 p.
- THOMAS, E. R.; NEWMAN, B. A.; LONG, T. C.; WOOD, D. A.; ECKERT, C. A. Limiting activity coefficients of nonpolar and polar solutes in both volatile and nonvolatile solvents by gas chromatography. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 27, n. 4, p. 399–405, oct 1982. ISSN 0021-9568.
- TRESZCZANOWICZ, T.; LU, B. C.-Y. Isothermal vapour-liquid equilibria for 11 examples of (an ether + a hydrocarbon). *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 18, n. 3, p. 213–220, mar 1986. ISSN 00219614.
- VOSKO, S. H.; WILK, L.; NUSAIR, M. Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. *Canadian Journal of Physics*, v. 58, n. 8, p. 1200–1211, 1980. ISSN 0008-4204.

- VOUTSAS, E. C.; TASSIOS, D. P. Prediction of Infinite-Dilution Activity Coefficients in Binary Mixtures with UNIFAC. A Critical Evaluation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 35, n. 4, p. 1438–1445, jan 1996. ISSN 0888-5885.
- VRTECH, T. I. *Simulador iiSE*. 2017. Disponível em: <<http://vrtech.com.br/pt/simulador-iise/>>.
- WEIDLICH, U.; GMEHLING, J. A modified UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, hE, and  $\gamma_{\infty}$ . *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 26, n. 7, p. 1372–1381, jul 1987. ISSN 0888-5885.
- WILLIAMS-WYNN, M. D.; LETCHER, T. M.; NAIDOO, P.; RAMJUGERNATH, D. Activity coefficients at infinite dilution of organic solutes in N-formylmorpholine and N-methylpyrrolidone from gas-liquid chromatography. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 61, p. 154–160, jun 2013. ISSN 00219614.
- WILLMAN, B.; TEJA, A. S. Vapor-liquid equilibria in toluene + m-xylene, toluene + n-decane, and n-decane + m-xylene mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 30, n. 1, p. 116–119, jan 1985. ISSN 0021-9568.
- WILSON, G. Vapor-Liquid Equilibrium. XI. A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing. *Journal of the American Chemical Society*, v. 86, n. 2, p. 127–130, 1964. ISSN 0002-7863.
- WU, H. S.; SANDLER, S. I. Vapor-liquid equilibria of tetrahydrofuran systems. *Journal of Chemical & Engineering Data*, v. 33, n. 2, p. 157–162, apr 1988. ISSN 0021-9568.
- XIONG, R.; SANDLER, S. I.; BURNETT, R. I. An improvement to COSMO-SAC for predicting thermodynamic properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 53, n. 19, p. 8265–8278, 2014. ISSN 15205045.

# Apêndice A

## Resultados detalhados para os Coeficientes de Atividade em Diluição Infinita

Neste apêndice estão apresentados todos os resultados de coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC) para os 28 métodos de cálculo quântico testados envolvendo HF e DFT. Além destes, estão sendo mostrados os gráficos obtidos pelo método semi-empírico POA1 (GERBER; SOARES, 2013), pelos perfis sigma do banco de dados VT-2005 (MULLINS et al., 2006). Para todas essas diagonais, foi usado o modelo de atividade COSMO-SAC (LIN; SANDLER, 2002). Por fim, uma última diagonal, a qual foi obtida pelo modelo UNIFAC(Do) (JAKOB et al., 2006) também está apresentada.

## A.1 HARTREE-FOCK

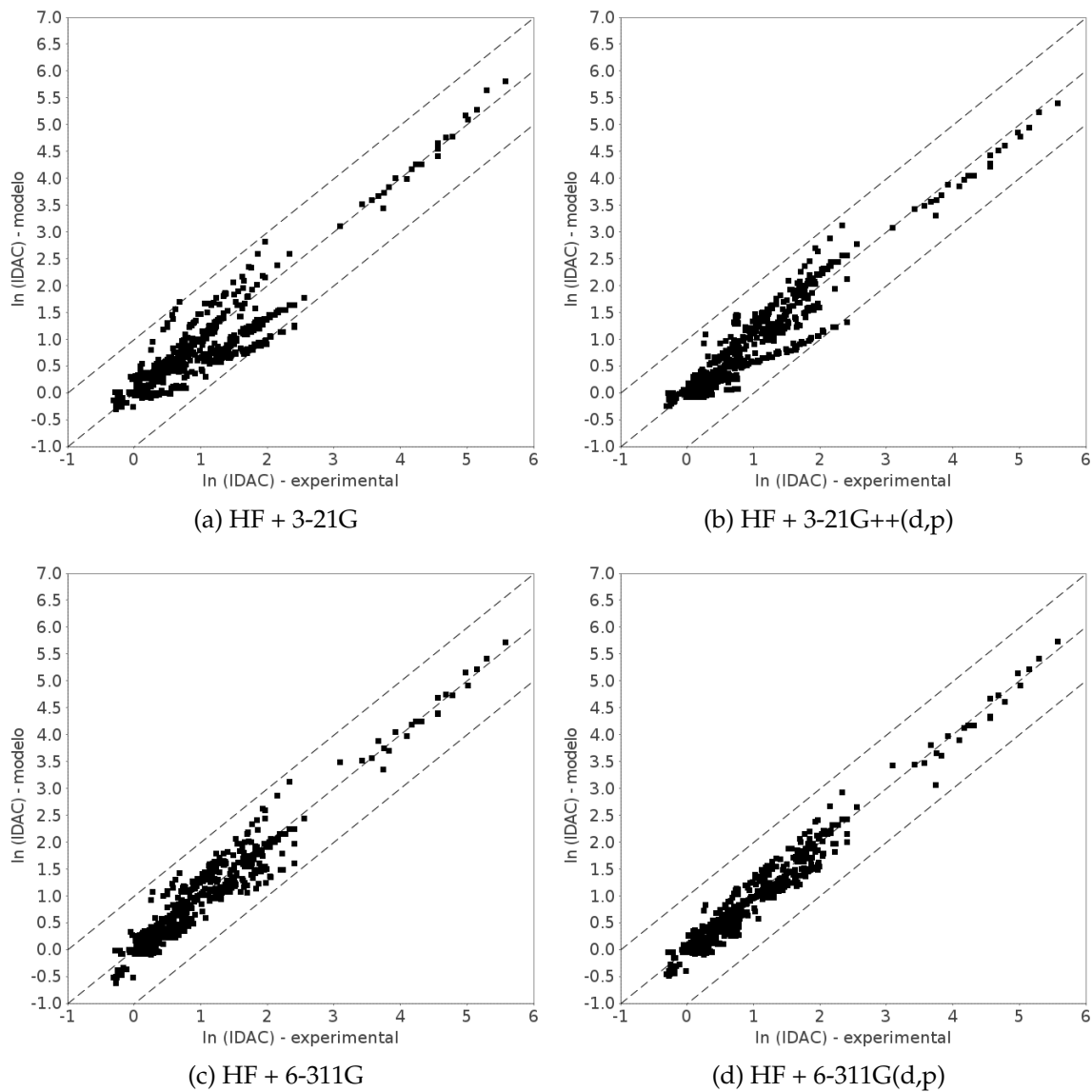


Figura A.1: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock



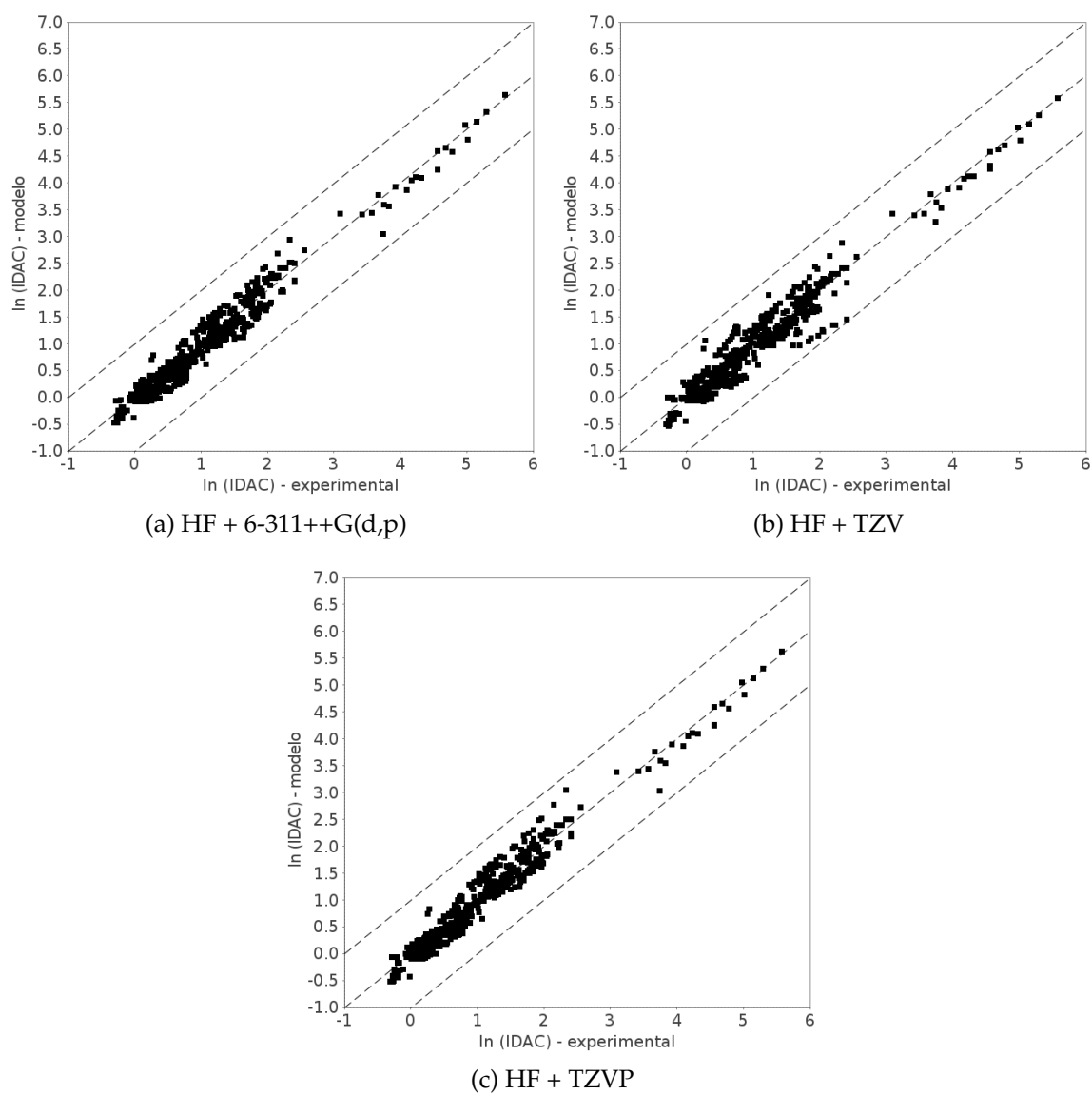


Figura A.2: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de Hartree-Fock

## A.2 MP2

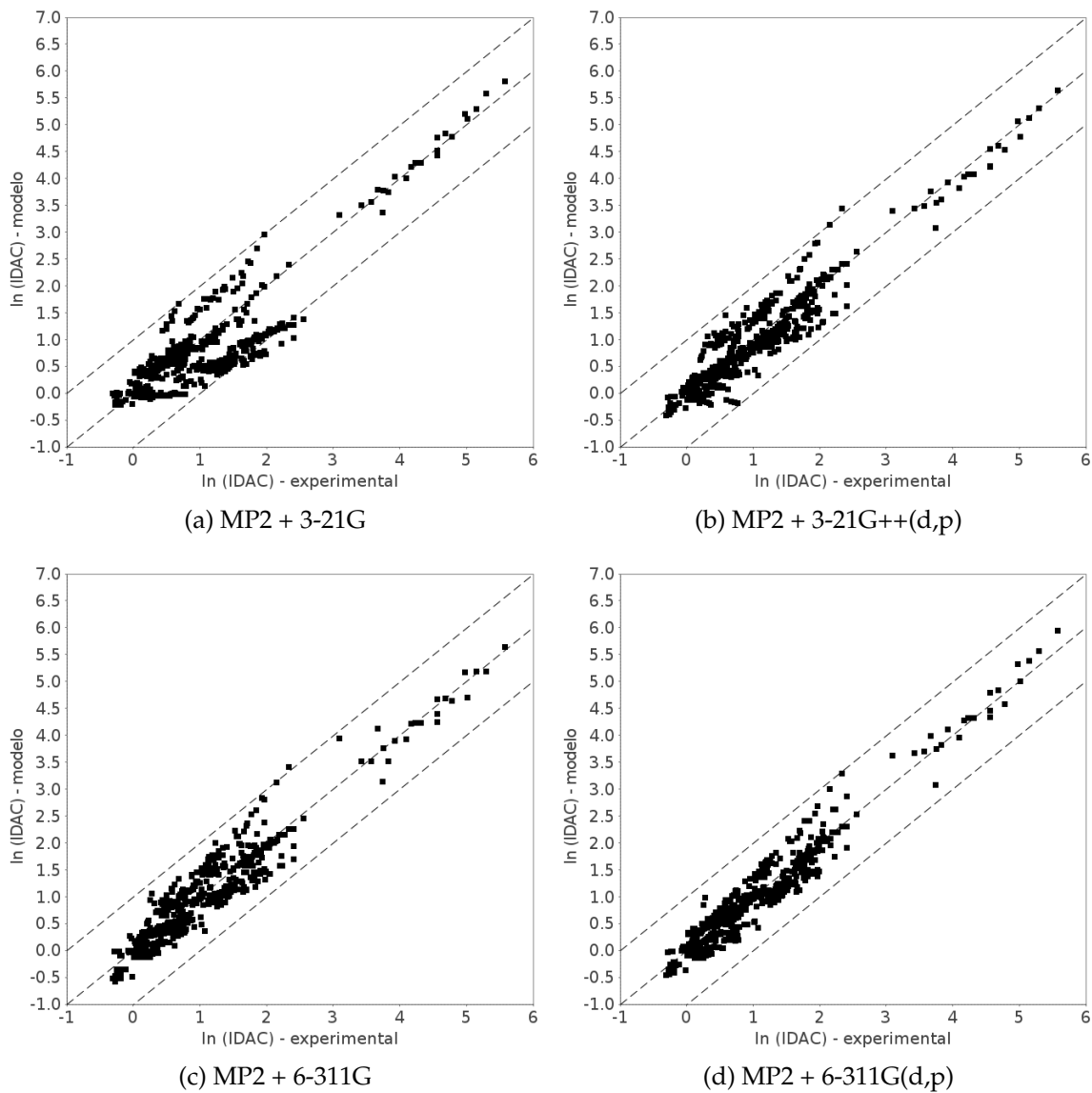


Figura A.3: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de MP2

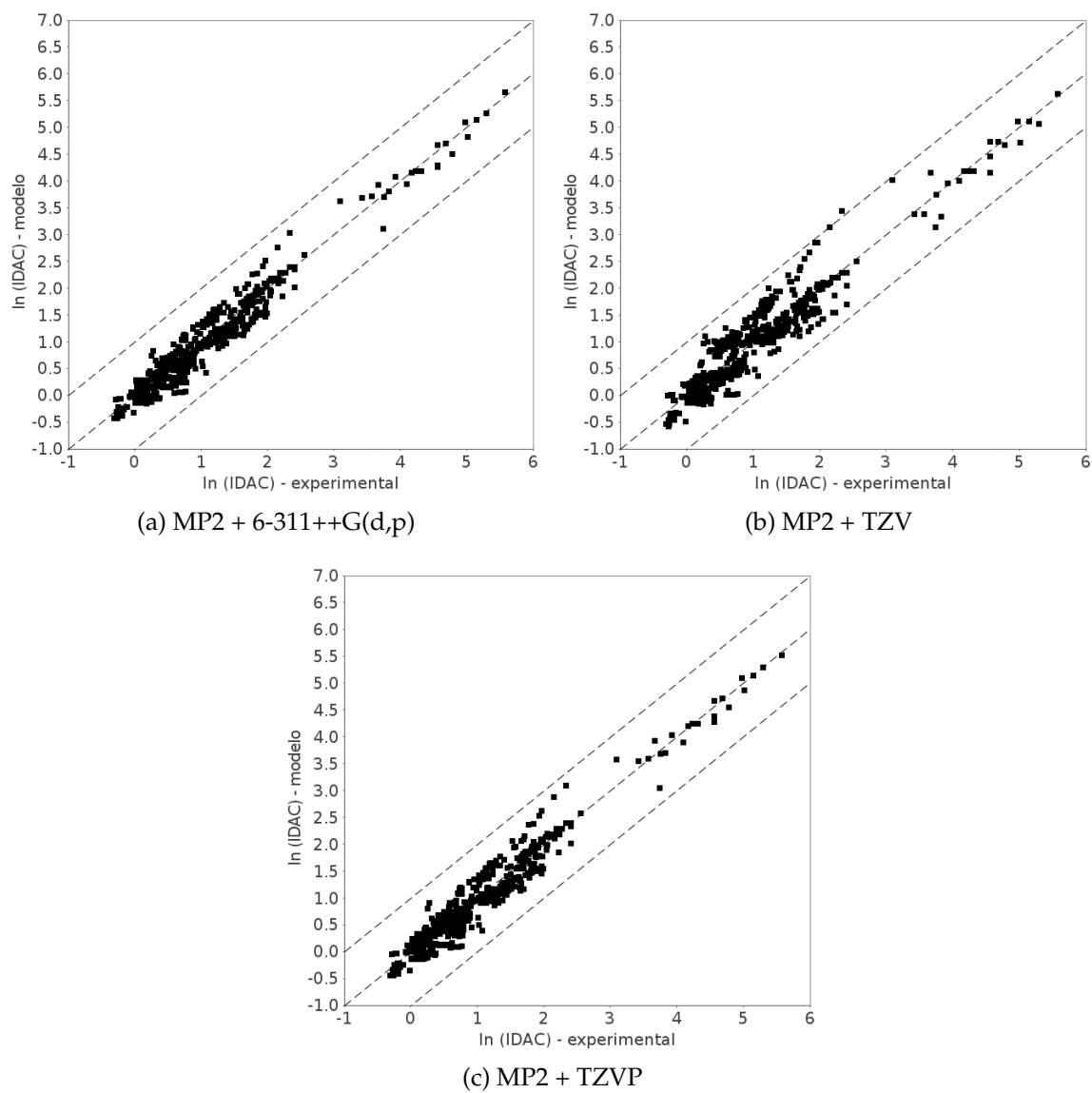


Figura A.4: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de MP2

### A.3 B3LYP

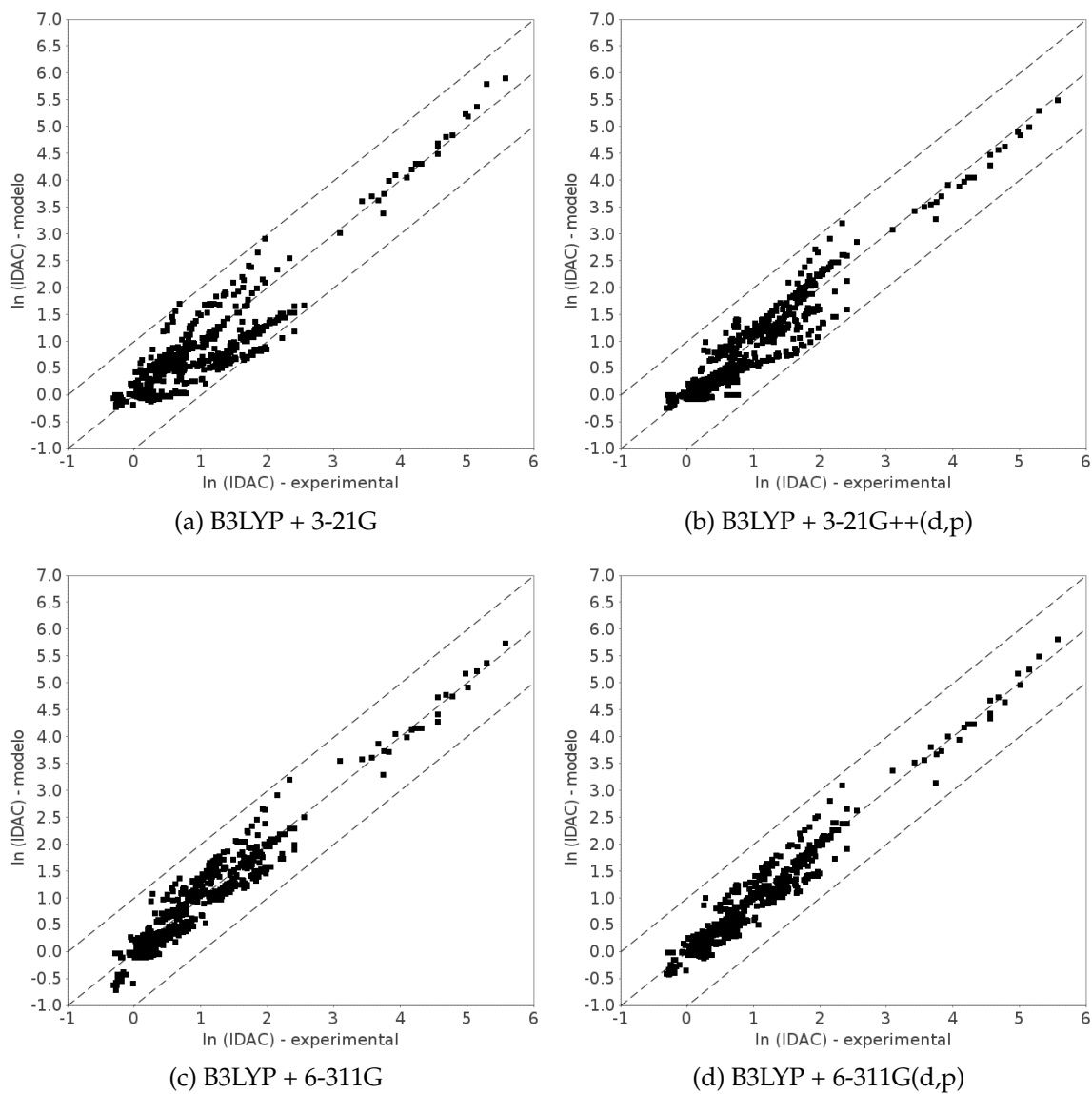


Figura A.5: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de B3LYP

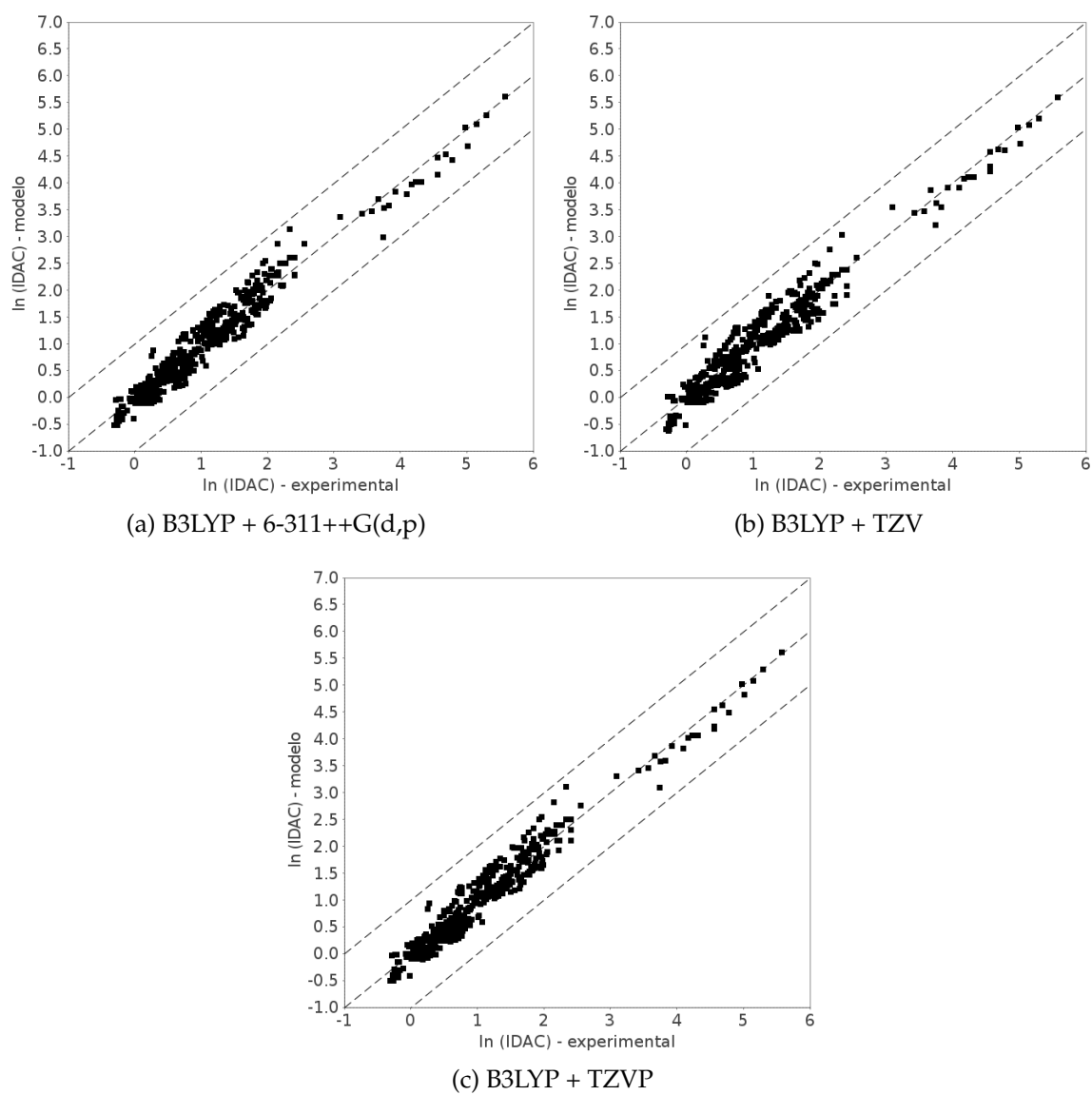


Figura A.6: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de B3LYP

## A.4 BP86

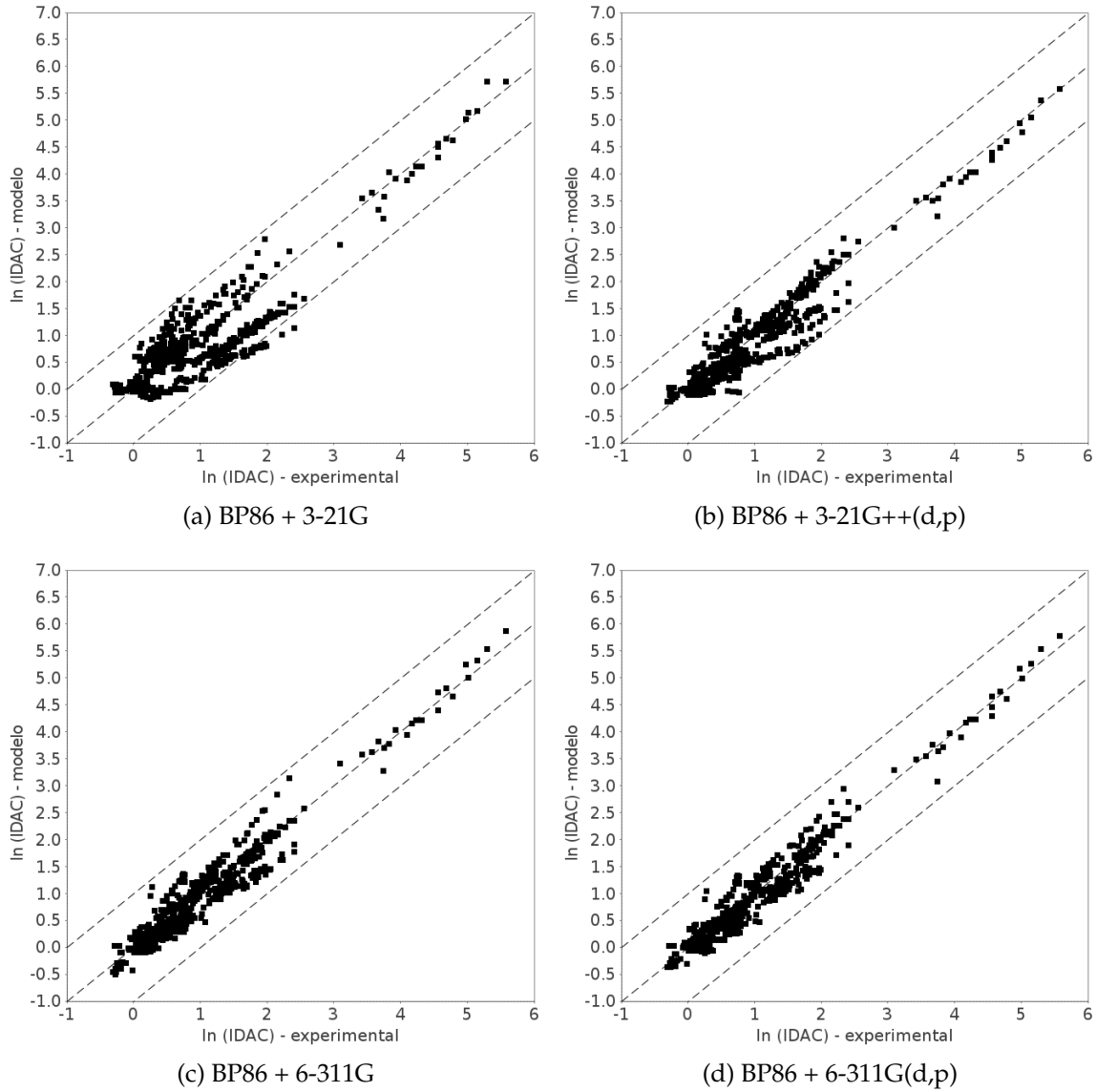


Figura A.7: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de BP86

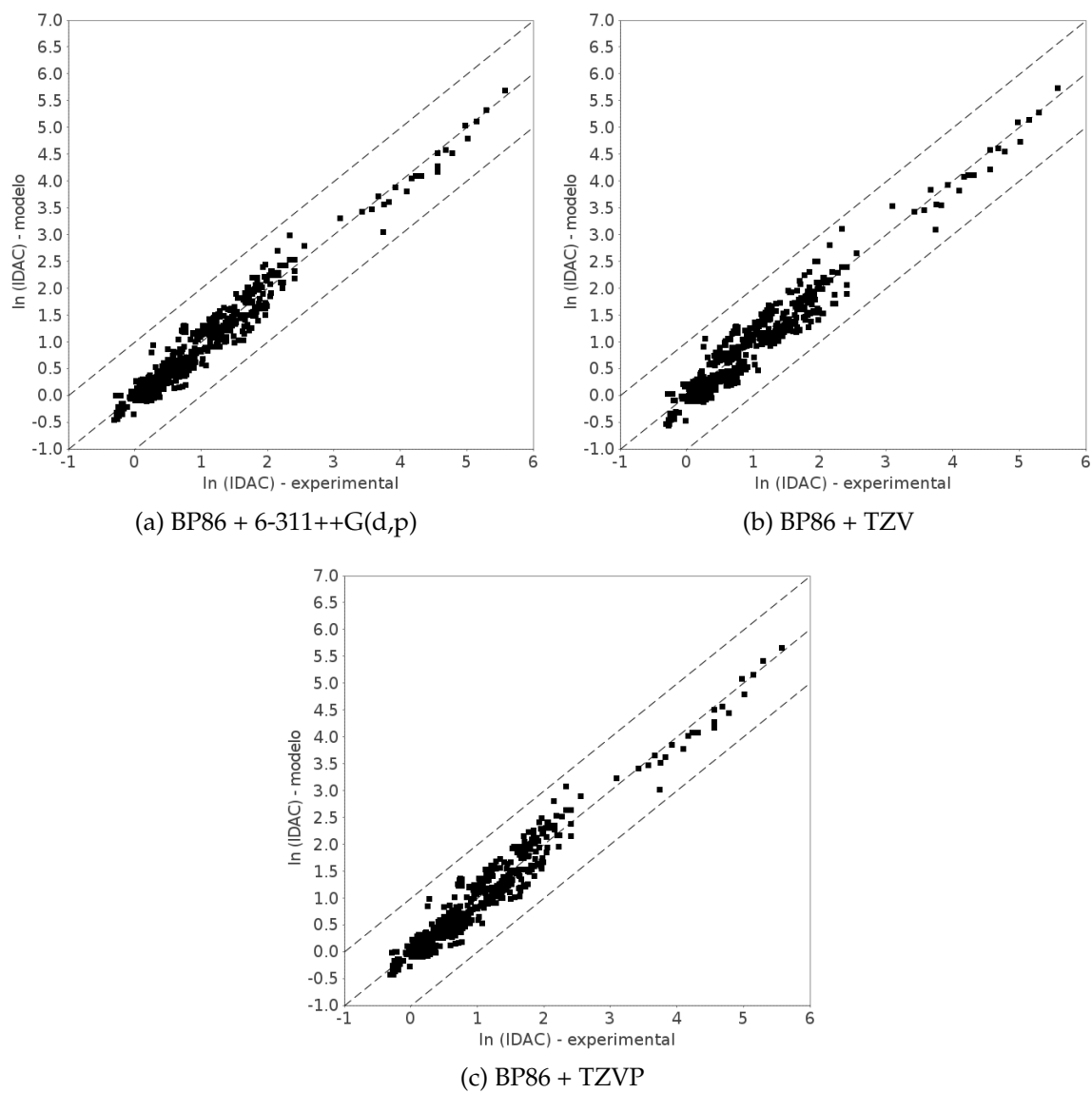


Figura A.8: Comparação entre as diagonais de IDAC para o método de BP86

## A.5 POA1, VT-2005 e UNIFAC(Do)

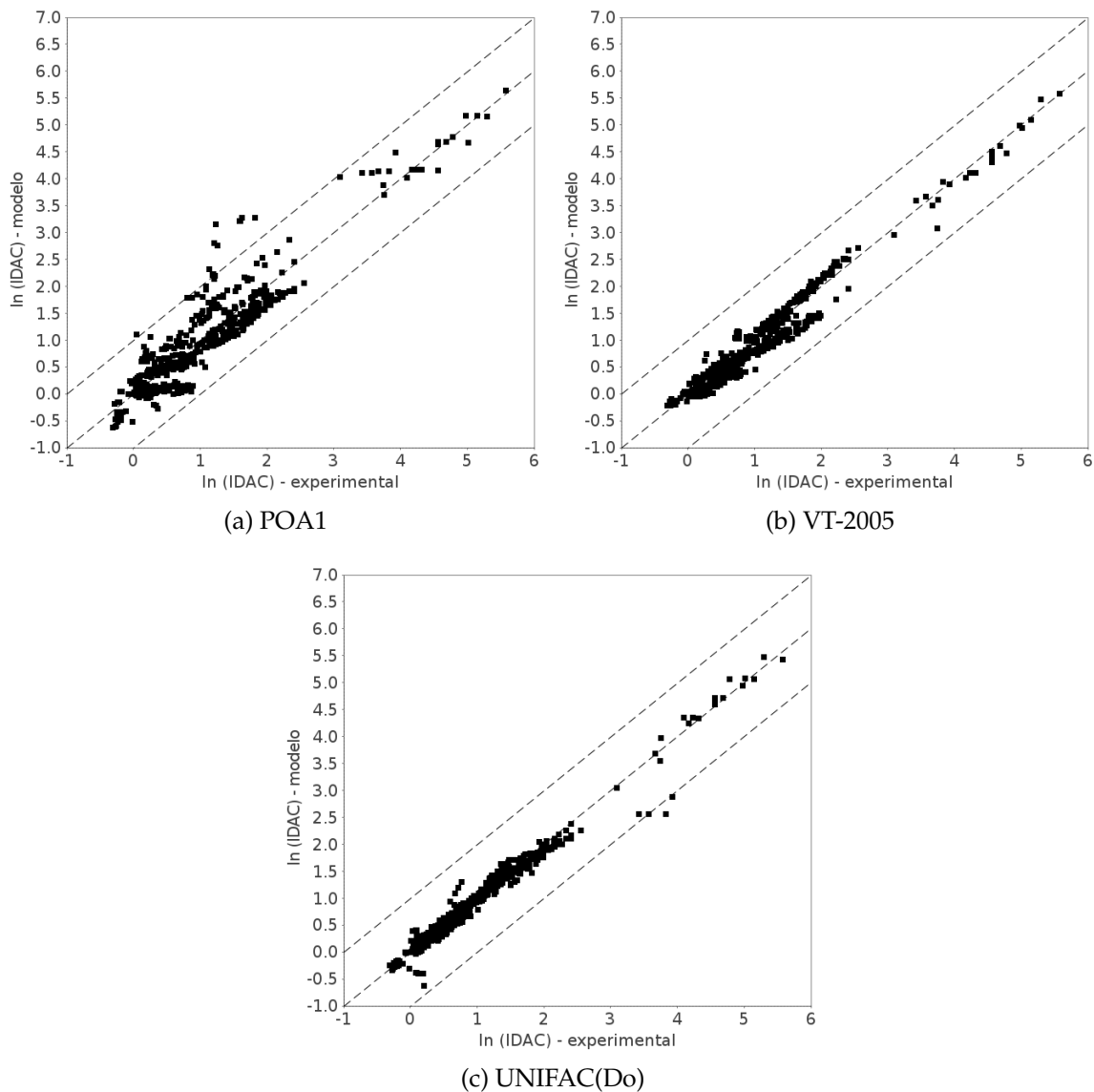


Figura A.9: Comparação entre as diagonais de IDAC para os métodos POA1, VT-2005 e UNIFAC(Do)



# Apêndice B

## Dados experimentais de IDAC

Estão mostradas neste apêndice as referências dos valores experimentais de IDAC (coeficientes de atividade em diluição infinita) utilizados no presente trabalho. Esses dados foram coletados e apresentados nos trabalhos de Soares e Gerber (2013) e Soares et al. (2013). Um subconjunto desses dados, contendo 689 pontos experimentais de misturas que não formam ligação de hidrogênio, foi selecionado para a validação dos perfis sigma e estimação dos parâmetros do modelo COSMO-SAC (LIN; SANDLER, 2002). Os sistemas utilizados estão apresentados na Tabela B.1. Para a construção da diagonal de IDAC mostrada na Figura 4.25, foram utilizados um conjunto maior de dados experimentais de IDAC, totalizando 2629 pontos, cujos sistemas estão mostrados na Tabela B.2.

Tabela B.1: Referências dos dados de IDAC dos diferentes sistemas utilizados para a validação dos perfis sigma.

Soluto	Solvente	Referência
1,2-DICHLOROETHANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
1,2-DICHLOROETHANE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
1,2-DICHLOROETHANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-BUTYRALDEHYDE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CYCLOHEXANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
ACETONE	N-HEXANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
ACETONE	N-HEPTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
ACETONE	N-OCTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
ACETONE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(SCHACHT et al., 2010)
ACETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
ACETONE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
BENZENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
BENZENE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEPTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
BENZENE	N-OCTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEXANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEPTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	N-OCTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – *Continuação da página anterior.*

Soluto	Solvente	Referência
CHLOROFORM	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CHLOROFORM	N-HEPTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CHLOROFORM	N-OCTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
CYCLOHEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
DIETHYL ETHER	N-OCTANE	(FUKUCHI et al., 1997)
DIETHYL ETHER	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
ETHYL ACETATE	N-BUTYRALDEHYDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(DALLINGA et al., 1993)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
METHYL ETHYL KETONE	N-PENTANE	(DALLINGA et al., 1993)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(SCHACHT et al., 2010)
METHYL ETHYL KETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-DECANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
METHYL ETHYL KETONE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
METHYL ETHYL KETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
METHYLCYCLOHEXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	1-HEXENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	ACETONE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEPTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEPTANE	ACETONE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEPTANE	ETHYL ACETATE	(CHENG et al., 2004)
N-HEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-HEPTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEXANE	ACETONE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEXANE	ACETONE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(CHENG et al., 2004)
N-HEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N-BUTYRALDEHYDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-NONANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-NONANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ETHYL ACETATE	(CHENG et al., 2004)
N-OCTANE	ACETONE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-OCTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(CHENG et al., 2004)
N-OCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.1 – *Continuação da página anterior.*

Soluto	Solvente	Referência
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(CHENG et al., 2004)
N-PENTANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
TETRAHYDROFURAN	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
TETRAHYDROFURAN	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
TETRAHYDROFURAN	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
TOLUENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
TOLUENE	METHYLCYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-DECANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)



Tabela B.2: Referências dos dados de IDAC dos diferentes sistemas utilizados para a construção da diagonal ilustrada na Figura 4.25.

Soluto	Solvente	Referência
1,1,1-TRICHLOROETHANE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1,1-TRICHLOROETHANE	TRICHLOROETHYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DICHLOROETHANE	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DICHLOROETHANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DICHLOROETHANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DICHLOROETHANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DICHLOROETHANE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DICHLOROETHANE	TRICHLOROETHYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,1-DIFLUOROETHANE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
1,2-DICHLOROETHANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
1,2-DICHLOROETHANE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
1,2-DICHLOROETHANE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
1,2-DICHLOROETHANE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
1,2-DICHLOROETHANE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
1,2-DICHLOROETHANE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
1,2-DICHLOROETHANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,2-DICHLOROETHANE	TRICHLOROETHYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,3-BUTADIENE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
1,3-CYCLOHEXADIENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
1,4-DIOXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
1,4-DIOXANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	2,6-DIMETHYLPYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
1,4-DIOXANE	ACETOPHENONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	BENZONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	CHLOROBENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	CYCLOHEXANONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	DIISOPROPYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N-DECANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	P-XYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	PYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1,4-DIOXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-BUTENE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
1-CHLOROBUTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-CHLOROBUTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-CHLOROBUTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-CHLOROBUTANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-CHLOROBUTANE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-CHLOROPROPANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
1-CHLOROPROPANE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
1-HEPTENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
1-HEPTENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
1-HEXENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
1-HEXENE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
1-HEXENE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
1-HEXENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-BUTYRALDEHYDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
1-HEXENE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-HEXENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
1-OCTENE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-OCTENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-PENTENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-PENTENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
1-PENTENE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-PENTENE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-PENTENE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-PENTENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
1-PENTENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
1-PENTENE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
1-PENTENE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
1-PENTENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
2,2-DIMETHYLBUTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
2,2-DIMETHYLPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CYCLOHEXANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
2,4-DIMETHYLPENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
2,4-DIMETHYLPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
2,5-DIMETHYLHEXANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
2,5-DIMETHYLHEXANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-1,3-BUTADIENE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYL-2-BUTENE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
2-METHYLPENTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
2-METHYLPENTANE	METHYL TERT-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
2-METHYLPENTANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETALDEHYDE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETALDEHYDE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETALDEHYDE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETALDEHYDE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
ACETALDEHYDE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETALDEHYDE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(VOUITSAS; TASSIOS, 1996)
ACETONE	N-HEPTANE	(VOUITSAS; TASSIOS, 1996)
ACETONE	N-OCTANE	(VOUITSAS; TASSIOS, 1996)
ACETONE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
ACETONE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
ACETONE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(GMEHLING et al., 1986)
ACETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
ACETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	1-CHLOROBUTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
ACETONE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	1-OCTENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	ETHYLBENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ALPHA-PINENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ANISOLE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
BENZENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
BENZENE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
BENZENE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	PYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
BENZENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
BENZENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(GMEHLING et al., 1986)
BENZENE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
BENZENE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
BENZENE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETOPHENONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
BENZENE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
BENZENE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
BENZENE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
BENZENE	N-HEPTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
BENZENE	N-OCTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
BENZENE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)

Continua na página seguinte.



Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
BENZENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
BENZENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
CARBON TETRACHLORIDE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
CARBON TETRACHLORIDE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	1,4-DIOXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
CARBON TETRACHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEXANE	(VOITSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	N-HEPTANE	(VOITSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	N-OCTANE	(VOITSAS; TASSIOS, 1996)
CARBON TETRACHLORIDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CARBON TETRACHLORIDE	TRICHLOROETHYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROBENZENE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
CHLOROBENZENE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROETHANE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
CHLOROFORM	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – *Continuação da página anterior.*

Soluto	Solvente	Referência
CHLOROFORM	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CHLOROFORM	N-HEPTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CHLOROFORM	N-OCTANE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CHLOROFORM	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CHLOROFORM	TRICHLOROETHYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CIS-2-BUTENE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
CUMENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEPTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
CYCLOHEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
CYCLOHEXANE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
CYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
CYCLOHEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(GMEHLING et al., 1986)
CYCLOHEXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
CYCLOHEXANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
CYCLOHEXANE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	METHYL TERT-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
CYCLOHEXANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOHEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
CYCLOHEXANE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOHEXANONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOOCTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
CYCLOOCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTADIENE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOPENTADIENE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
CYCLOPENTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
CYCLOPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
CYCLOPENTANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
CYCLOPENTENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
DICHLOROMETHANE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
DICHLOROMETHANE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DICHLOROMETHANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
DICHLOROMETHANE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
DIETHYL ETHER	N-OCTANE	(FUKUCHI et al., 1997)
DIETHYL ETHER	N-TETRADECANE	(FUKUCHI et al., 1997)
DIETHYL ETHER	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIETHYL ETHER	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
DIISOPROPYL ETHER	N-OCTANE	(FUKUCHI et al., 1997)
DIISOPROPYL ETHER	N-TETRADECANE	(FUKUCHI et al., 1997)
DIISOPROPYL ETHER	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
DIISOPROPYL ETHER	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
DIISOPROPYL ETHER	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
DIISOPROPYL ETHER	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIISOPROPYL ETHER	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
DIMETHYL ETHER	TETRAHYDROPIRAN	(MIYANO et al., 2007)
DI-N-BUTYL ETHER	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
ETHYL ACETATE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
ETHYL ACETATE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
ETHYL ACETATE	TRiacETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
ETHYL ACETATE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
ETHYL ACETATE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	1-CHLOROBUTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-BUTYRALDEHYDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
ETHYL ACETATE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYL ACETATE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
ETHYLBENZENE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLBENZENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLCYCLOHEXANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
ETHYLCYCLOHEXANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
ETHYLCYCLOHEXANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
ETHYLCYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
ETHYLCYCLOHEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
ISOBUTANE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
ISOBUTENE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
ISOPENTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
ISOPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
METHYL ACETATE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ACETATE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ACETATE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ACETATE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ACETATE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(DALLINGA et al., 1993)
METHYL ETHYL KETONE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
METHYL ETHYL KETONE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
METHYL ETHYL KETONE	N-PENTANE	(DALLINGA et al., 1993)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(GMEHLING et al., 1986)
METHYL ETHYL KETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	1,1-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	1,4-DIOXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	2,6-DIMETHYLPYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ACETOPHENONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	BENZONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CHLOROBENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CYCLOHEXANONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
METHYL ETHYL KETONE	DIISOPROPYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-DECANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	P-XYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	PYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
METHYL ETHYL KETONE	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
METHYL ETHYL KETONE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ETHYL KETONE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ISOBUTYL KETONE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ISOBUTYL KETONE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL ISOBUTYL KETONE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL N-PROPYL KETONE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N-OCTANE	(FUKUCHI et al., 1997)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N-TETRADECANE	(FUKUCHI et al., 1997)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	2-METHYLPENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	METHYLCYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYL TERT-BUTYL ETHER	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
METHYLCYCLOHEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(GMEHLING et al., 1986)
METHYLCYCLOHEXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
METHYLCYCLOHEXANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
METHYLCYCLOHEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOHEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOPENTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOPENTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOPENTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOPENTANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOPENTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
METHYLCYCLOPENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N,N-DIMETHYLACETAMIDE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
NAPHTHALENE	N-HEPTANE	(GMEHLING et al., 1986)
N-BUTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTANE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
N-BUTYL ACETATE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYL ACETATE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYL ACETATE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYLBENZENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYLBENZENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	1-HEXENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRALDEHYDE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-BUTYRONITRILE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-DECANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	ACETONE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEPTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-HEPTANE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-HEPTANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)

*Continua na página seguinte.*



Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-HEPTANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEPTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEPTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEPTANE	ACETONE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEPTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	ETHYL ACETATE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEPTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-HEPTANE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEPTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	1,4-DIOXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	DIISOPROPYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEPTANE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEPTANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEPTANE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEPTANE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEPTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEPTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEPTANE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEPTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEPTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEPTANE	ACETONE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-HEPTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-HEPTANE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-HEPTANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – *Continuação da página anterior.*

Soluto	Solvente	Referência
N-HEXANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	PYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEXANE	METHYL TERT-BUTYL ETHER	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEXANE	ACETONE	(GMEHLING et al., 1986)
N-HEXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-HEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-HEXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-HEXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETOPHENONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
N-HEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEXANE	N-BUTYRALDEHYDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	METHYL TERT-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEXANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	CARBON TETRACHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
N-HEXANE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-HEXANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-HEXANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-METHYLPYRROLIDONE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
N-METHYLPYRROLIDONE	N-DECANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-METHYLPYRROLIDONE	N-NONANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-METHYLPYRROLIDONE	N-OCTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-NONANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	1-OCTENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	1-DECENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-NONANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-NONANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-NONANE	ETHYL ACETATE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-OCTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ACETONE	(VOUTSAS; TASSIOS, 1996)
N-OCTANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	1-HEXENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-OCTANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-OCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
N-OCTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-OCTANE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	1,4-DIOXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ACETOPHENONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	BENZONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CHLOROBENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CYCLOHEXANONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	DIISOPROPYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	P-XYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	PYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-OCTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
N-PENTANE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	METHYL ISOBUTYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ACETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	METHYL N-PROPYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	METHYL AMYL KETONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	N-BUTYRONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	METHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	N-BUTYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	N-HEXYL ACETATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	ETHYL BUTYRATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	BENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	TOLUENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	P-XYLENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	ANISOLE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	BENZONITRILE	(CASTELLS et al., 2000)

*Continua na página seguinte.*

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
N-PENTANE	ACETOPHENONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	CHLOROBENZENE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	DIMETHYL SULFOXIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	DICHLOROMETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	CHLOROFORM	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	CARBON TETRACHLORIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	TETRAHYDROFURAN	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	1,4-DIOXANE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	TRIETHYLAMINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	G-BUTYROLACTONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	HEXAMETHYLPHOSPHORAMIDE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	CYCLOHEXANONE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	PROPYLENE CARBONATE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	PYRIDINE	(CASTELLS et al., 2000)
N-PENTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
N-PENTANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	TOLUENE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-PENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(SCHULT et al., 2001)
N-PENTANE	ACETOPHENONE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	ANISOLE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	BENZONITRILE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
N-PENTANE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PENTANE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PROPYL ACETATE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PROPYL ACETATE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PROPYL ACETATE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PROPYL ACETATE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
N-PROPYL ACETATE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
PROPANE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
PROPYLENE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
P-XYLENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
P-XYLENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
P-XYLENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
P-XYLENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
PYRIDINE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	1-CHLOROBUTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
PYRIDINE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TERT-BUTYL CHLORIDE	BENZENE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	BENZYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	BENZYL CHLORIDE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	1-CHLOROBUTANE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	N-HEPTANE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	ETHYL PHENYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
TERT-BUTYL CHLORIDE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
TETRAHYDROFURAN	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(THOMAS et al., 1982)
TETRAHYDROFURAN	N-OCTANE	(THOMAS et al., 1982)
TETRAHYDROFURAN	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TETRAHYDROFURAN	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	PROPYL PHENYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
TOLUENE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
TOLUENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	BENZENE	(GMEHLING et al., 1986)
TOLUENE	DIMETHYL SULFOXIDE	(GMEHLING et al., 1986)
TOLUENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(WILLIAMS-WYNN et al., 2013)
TOLUENE	DIETHYL PHTHALATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N,N-DIETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	1,5-DIMETHYL-2-PYRROLIDINONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-ETHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	METHYLCYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)

Continua na página seguinte.

Tabela B.2 – Continuação da página anterior.

Soluto	Solvente	Referência
TOLUENE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	1,1-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	1,4-DIOXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	2,6-DIMETHYLPYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ACETOPHENONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ANILINE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ANISOLE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	BENZONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	DI-N-BUTYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-BUTYRONITRILE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CHLOROBENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CYCLOHEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CYCLOHEXANONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	DIETHYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	DIISOPROPYL ETHER	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-DECANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-HEPTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-PENTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	P-XYLENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	PYRIDINE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TETRAHYDROFURAN	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	TRIETHYLAMINE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ALPHA-PINENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	CAPROLACTONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL BENZOATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-FORMYLMORPHOLINE	(LAZZARONI et al., 2005)
TOLUENE	N-METHYLPYRROLIDONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRANS-2-BUTENE	TETRAHYDROPYRAN	(MIYANO et al., 2007)
TRICHLOROETHYLENE	TRIBUTYL PHOSPHATE	(BERMUDEZ et al., 2000)
TRICHLOROETHYLENE	TRIACETIN	(BERMUDEZ et al., 2000)
TRICHLOROETHYLENE	N,N-DIBUTYLFORMAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRICHLOROETHYLENE	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRICHLOROETHYLENE	1,1,1-TRICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRICHLOROETHYLENE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRICHLOROETHYLENE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRICHLOROETHYLENE	CHLOROFORM	(LAZZARONI et al., 2005)
TRICHLOROETHYLENE	DICHLOROMETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	METHYL ETHYL KETONE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	CYCLOHEXANONE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	1,2-DICHLOROETHANE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	ETHYL ACETATE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	TOLUENE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	P-XYLENE	(THOMAS et al., 1982)
TRIETHYLAMINE	1,2-DICHLOROETHANE	(LAZZARONI et al., 2005)

Continua na página seguinte.



Tabela B.2 – *Continuação da página anterior.*

Soluto	Solvente	Referência
TRIETHYLAMINE	1-CHLOROBUTANE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	ACETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	BENZENE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	CARBON TETRACHLORIDE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	ETHYL ACETATE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	METHYL ETHYL KETONE	(LAZZARONI et al., 2005)
TRIETHYLAMINE	N-HEXANE	(LAZZARONI et al., 2005)