

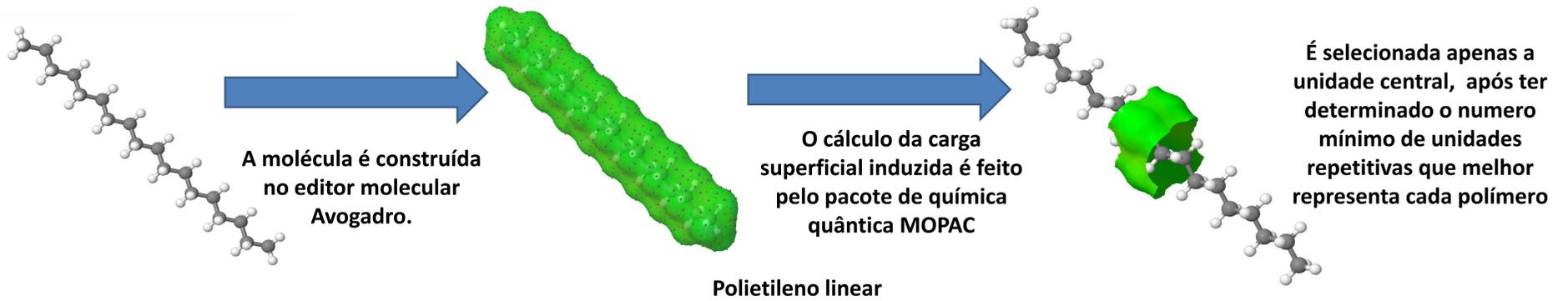
R. L. Simões, R. P. Soares

## Introdução:

Uma ferramenta de predição de propriedades termodinâmica é de grande importância, uma vez que a dependência de dados experimentais se torna uma limitação.

O modelo COSMO-RS, desenvolvido por Klamt, foi o primeiro a combinar cálculos de química quântica e termo-

dinâmica estatística para estimar o coeficiente de atividade de um componente em uma mistura. Desenvolvido em nosso grupo, o programa JCosmo utiliza uma variação deste modelo, o COSMO-SAC, para estimar o coeficiente de atividade. Com o uso deste é possível calcular o equilíbrio líquido-vapor, líquido-líquido e sólido-líquido.

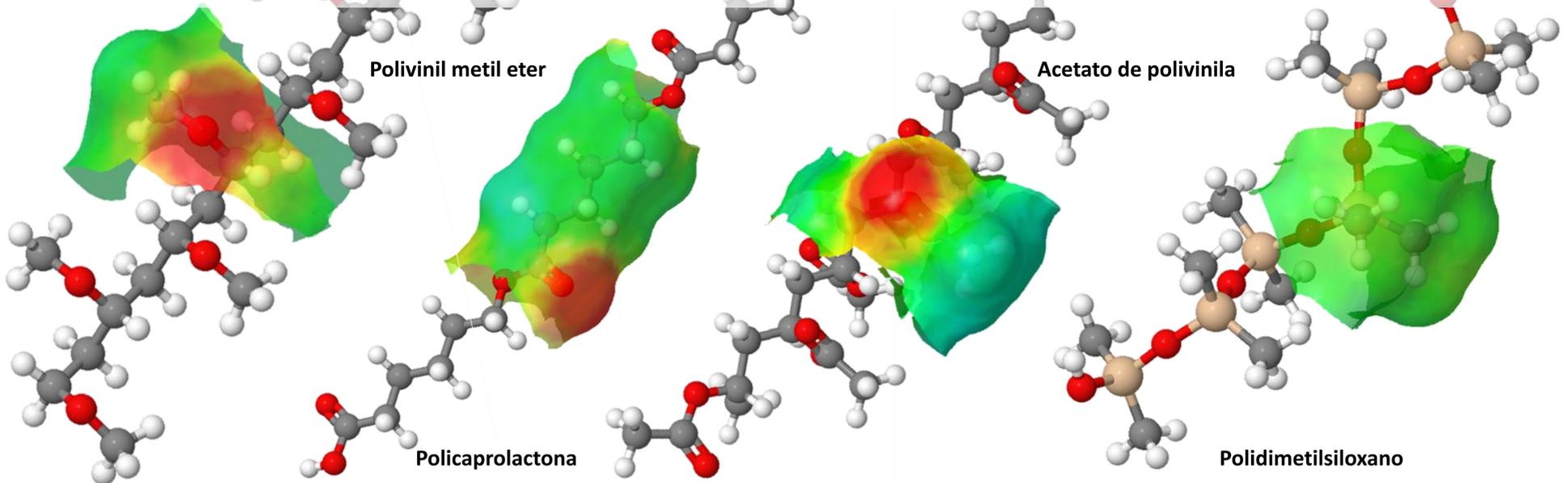


## Metodologia:

A informação essencial para modelos tipo Cosmo-RS é a distribuição de carga induzida. Entretanto, para polímeros, que são moléculas muito grandes, o cálculo desta distribuição se torna computacionalmente inviável.

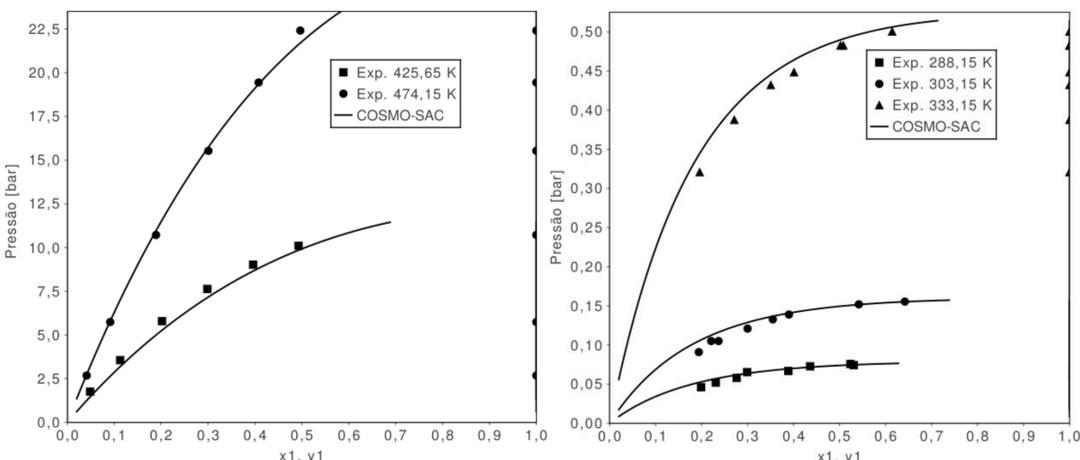
Utiliza-se, então, a ideia de que polímeros são formados por várias unidades repetitivas. Utilizando um tamanho mínimo a unidade central é determinada e o comportamento

do polímero é dado pela multiplicação pelo número de repetições. A partir disso, é possível estimar a carga representativa total a partir de uma unidade repetitiva. O pacote empírico de química quântica MOPAC foi utilizado para o cálculo das cargas superficiais induzidas. Após isto, foi feito um estudo para determinar o número mínimo de unidades repetitivas que melhor representa cada polímero.

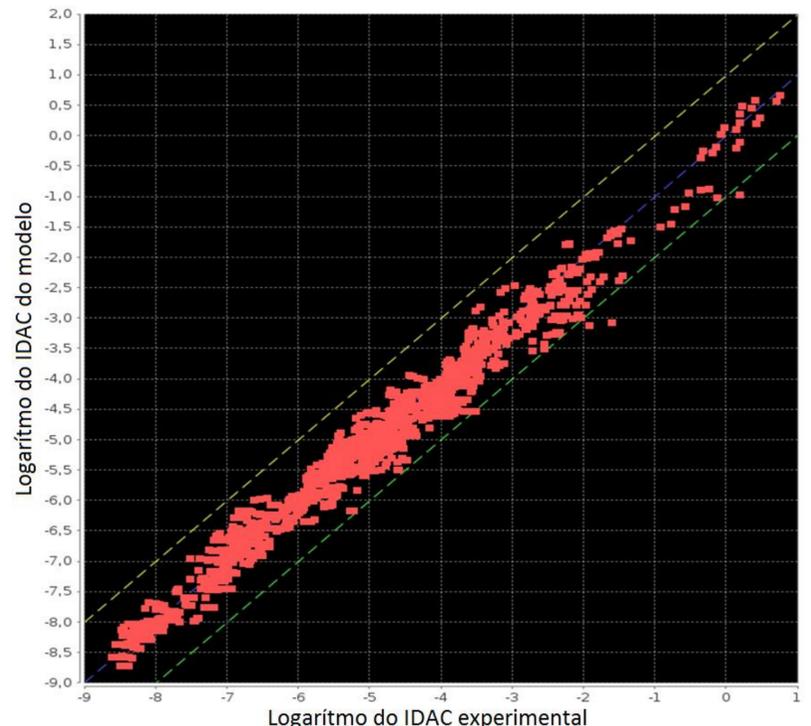


## Resultados e conclusões:

Parâmetros universais do modelo foram estimados utilizando aproximadamente 1800 dados experimentais de coeficiente de atividade de misturas polímeros/solvente. Para verificar a capacidade preditiva da abordagem utilizada, cálculos de equilíbrio líquido-vapor foram feitos. Para os casos estudados, uma ótima predição pode ser obtida.



Predição do equilíbrio líquido – vapor para ciclopentano – LDPE (76000) e benzeno – PS (63000)



Correlação do logaritmo do coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC) experimental com o estimado pelo modelo