



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Extensão do modelo F-SAC para soluções aquosas de eletrólitos
<b>Autor</b>	BRUNO MARTINI PASCOTTINI
<b>Orientador</b>	PAULA BETTIO STAUDT

## EXTENSÃO DO MODELO F-SAC PARA SOLUÇÕES AQUOSAS DE ELETRÓLITOS.

Aluno: Bruno Martini Pascottini

Orientador: Paula Bettio Staudt

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Resumo: Soluções eletrolíticas ainda representam um desafio na termodinâmica e são de suma importância devido às suas aplicações industriais. Em soluções diluídas de eletrólitos, as interações de longo alcance são predominantes, enquanto que, na medida em que a concentração dos eletrólitos aumenta, outras formas de contato passam a ter importância. Nesse trabalho, é proposta uma extensão ao modelo F-SAC, chamada de eF-SAC, para a predição do equilíbrio de fases de sistemas contendo eletrólitos. O termo de Pitzer-Debye-Hückel foi adicionado ao modelo para o cálculo do coeficiente de atividade a fim de contemplar as interações de longo alcance presentes nos sistemas diluídos. O perfil  $\sigma$  de cada eletrólito foi estimado com dados de coeficiente de atividade iônico médio de sais em água e o modelo eF-SAC foi capaz de correlacionar com sucesso os dados de equilíbrio dos mesmos até valores de molalidade em torno de 2M.