



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2014
<b>Local</b>	Porto Alegre
<b>Título</b>	Estudo da Solubilidade de Hidrocarbonetos de Cadeia Longa e Curta em Água
<b>Autor</b>	RENATA LORENCINI SIMOES
<b>Orientador</b>	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

O estudo da solubilidade de hidrocarbonetos em água é de grande importância. Seu conhecimento é primordial para modelar e avaliar os impactos ambientais causados em derramamentos de petróleo, por exemplo. Neste sentido, a disponibilidade de um modelo preditivo preciso se torna muito interessante. Neste trabalho o modelo F-SAC foi utilizado para prever a solubilidade de hidrocarbonetos em água. Foram utilizadas a versão original e propostas modificações no presente trabalho para uma melhor representação da solubilidade de hidrocarbonetos de cadeia longa (mais que 12 carbonos). O F-SAC é um modelo baseado em contribuição de grupos funcionais e na teoria de superfícies de contato COSMO-RS. Cada componente é considerado ser formado por vários grupos e a interação entre dois componentes se dá através da combinação das interações entre os grupos que os formam. O coeficiente de atividade calculado pelo modelo é então utilizado para prever a solubilidade de hidrocarbonetos em água. Quando comparados os resultados de solubilidade preditos pelo modelo F-SAC original com dados experimentais, foi verificado um desvio sistemático, sendo que o modelo representa bem somente hidrocarbonetos de até 11 carbonos. Para hidrocarbonetos maiores não há nenhum tratamento especial e o modelo prevê uma solubilidade menor do que a observada experimentalmente. Uma teoria para explicar este fenômeno é de que hidrocarbonetos mais longos são mais estáveis em uma conformação colapsada, a qual possui uma área aparente menor que a conformação linear, reduzindo o contato do hidrocarboneto com a água. Isto levaria a uma maior solubilidade. Para fins de comparação, foram construídos virtualmente no *software* Avogadro hidrocarbonetos até 20 carbonos, alternando ligações *trans* e *cis*, de forma a obter uma conformação enrolada. Após foi otimizada a geometria, utilizando-se o *software* MOPAC para obtenção das áreas superficiais. Observou-se que até 8 carbonos as áreas das diferentes conformações não diferem significativamente, mas aumentando-se o número de carbonos se acentua a diferença entre as áreas da conformação linear e colapsada. Uma versão modificada do F-SAC foi então implementada, onde os hidrocarbonetos podem apresentar-se em mais de uma conformação. Com esta modificação não há alterações para hidrocarbonetos de cadeias mais curtas. Porém, para os hidrocarbonetos mais longos, os resultados se tornaram mais próximos do observado experimentalmente.