



## Cálculo do coeficiente de atividade de *Deep Eutectic Solvents* (DES) utilizando COSMO-SAC

Eduarda Nunes Pelisser<sup>1</sup>, Rafael de Pelegrini Soares<sup>2</sup>

Laboratório Virtual de Predição de Propriedades – Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

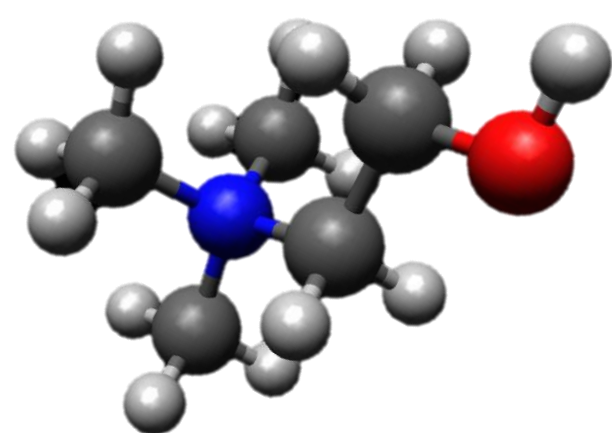
<sup>1</sup>Bolsista CNPQ; <sup>2</sup>Orientador



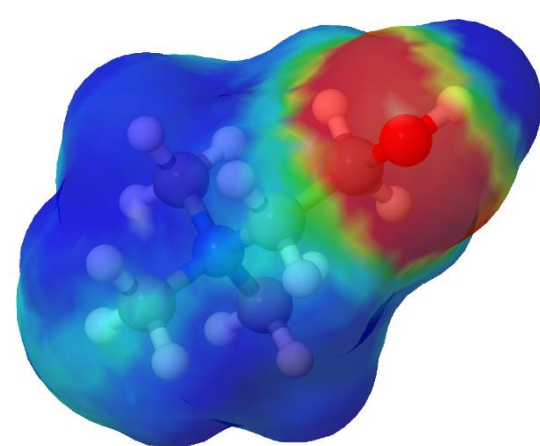
### INTRODUÇÃO

Solventes eutéticos profundos (*Deep Eutectic Solvents* - DES) são uma nova classe de solventes, baseados numa mistura binária de um doador e de um aceptor de ligação de hidrogênio<sup>1</sup>, com possíveis aplicações industriais futuras. O foco principal deste trabalho é calcular coeficientes de atividade ( $\gamma$ ) de soluções que envolvem esses solventes através do modelo COSMO-SAC. Dessa maneira, torna-se possível verificar quais pares de substâncias formam um DES, suas potenciais aplicações e suas compatibilidades com determinados solutos através de coeficientes de atividade em diluição infinita ( $\gamma^\infty$ ). Uma vez que os cálculos são executados com um método preditivo, a técnica visa reduzir a necessidade de se conduzir experimentos laboratoriais. Os dados obtidos também podem ser utilizados para fazer ajustes no modelo e avaliar sua competência na predição dessas propriedades.

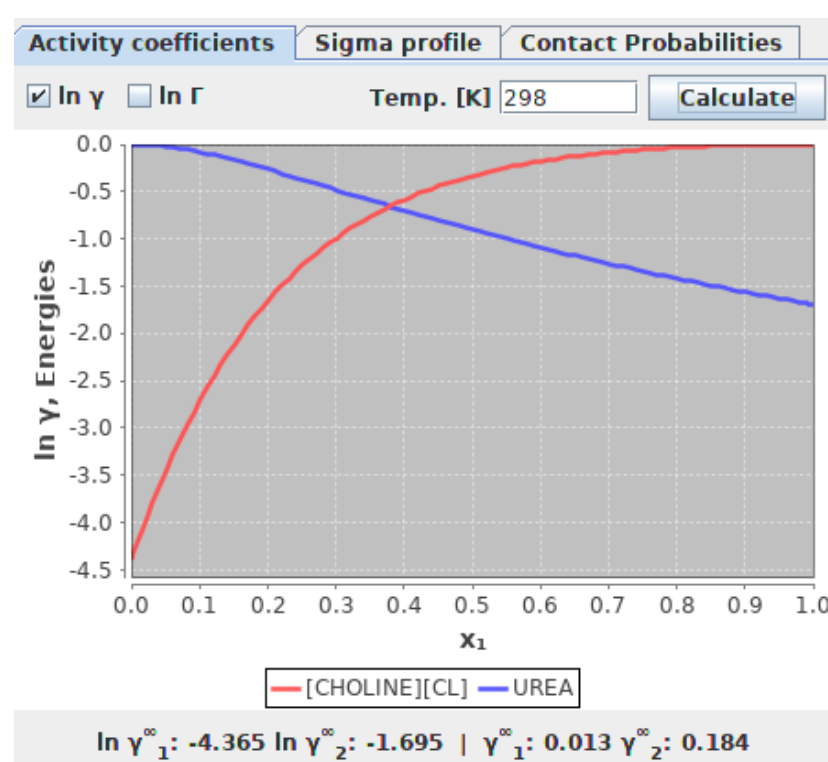
### METODOLOGIA



Construção do íon colina<sup>+</sup> utilizando o software Avogadro.



Distribuição de carga induzida ao redor do íon colina<sup>+</sup> obtida após realização de cálculos de química quântica utilizando o pacote GAMESS.



Análise dos  $\gamma$  da mistura entre cloreto de colina e ureia a 298K.

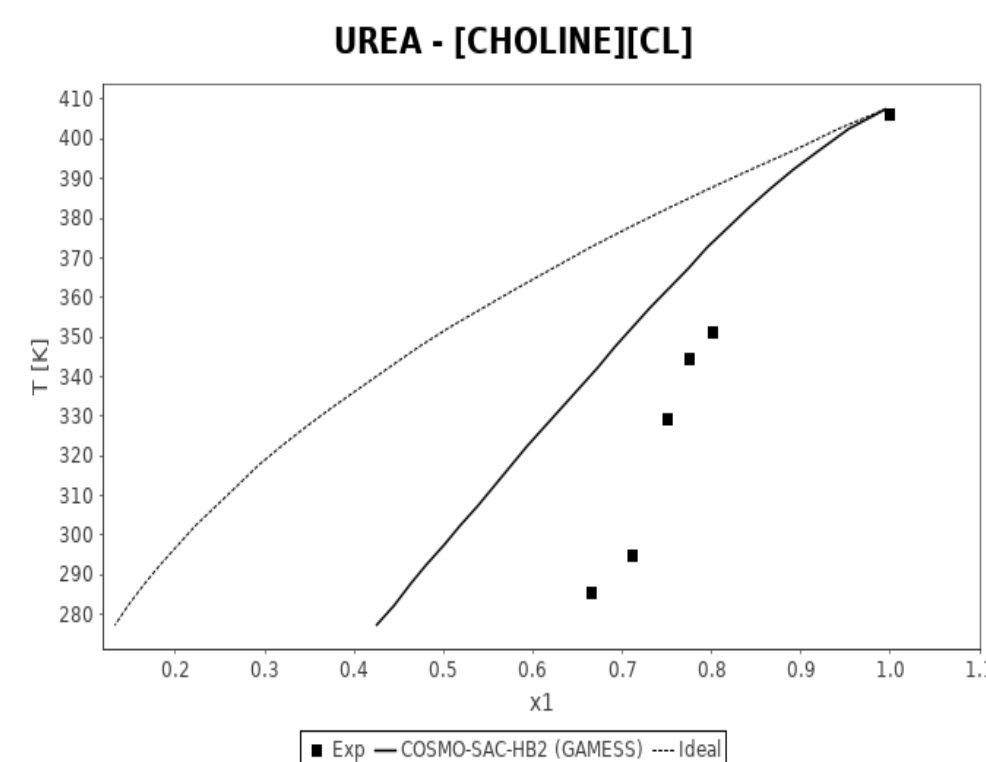
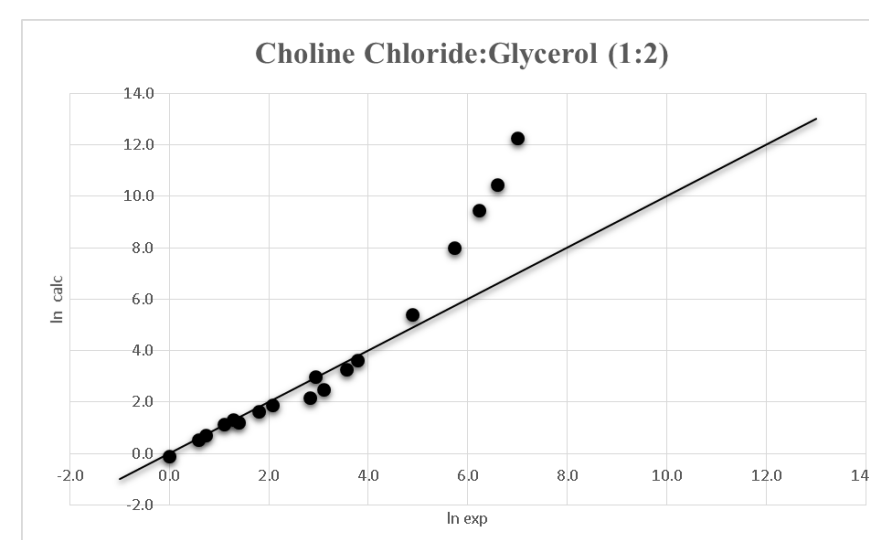


Diagrama de equilíbrio sólido-líquido (ESL) de ureia em cloreto de colina.

### RESULTADOS

Pode-se notar, no ESL apresentado, que o programa subestima o desvio observado experimentalmente, porém está de acordo com o desvio negativo da idealidade observado nos dados experimentais<sup>2</sup>. Essa tendência se repete em casos de  $\gamma < 1$ , no entanto, em casos opostos (desvio positivo da idealidade), o modelo tende a superestimar os valores do coeficiente de atividade, porém permanece qualitativamente válido.

No que diz respeito aos  $\gamma^\infty$  de diferentes solutos, as predições concordam com os dados experimentais até  $\ln(\gamma) = 6$ , apresentando um desvio sistemático para valores maiores de  $\gamma$ .



Comparação dos valores de  $\gamma^\infty$  experimentais<sup>3</sup> e preditos de diferentes solutos no DES a 298.15K.

Erros absolutos (EA) dos  $\ln(\gamma^\infty)$  entre os valores experimentais e calculados de diferentes solutos no DES ChCl + Glicerol (1:2) a 298.15K.

Soluto	EA	Soluto	EA
n-octane	2.284	n-propanol	0.163
n-decane	3.224	n-butanol	0.207
n-dodecane	3.871	n-pentanol	0.626
n-tetradecane	5.264	propanone	0.038
benzene	0.048	methyl isobutyl ketone	0.283
toluene	0.173	acetonitrile	0.042
cyclohexane	0.542	ethyl acetate	0.661
methanol	0.092	tetrahydrofuran	0.163
ethanol	0.047	pyridine	0.025

### CONCLUSÕES

No atual estado de desenvolvimento, o modelo COSMO-SAC mostra-se interessante na análise de equilíbrios envolvendo DESs. No entanto, ainda não apresenta a precisão necessária para algumas aplicações de engenharia. A otimização de parâmetros para o cálculo de  $\gamma^\infty$  e as imprecisões dos diagramas de ESL serão objeto de investigação no decorrer do trabalho.

### REFERÊNCIAS

- [1] Smith, E.L.; Abbott, A.P.; Ryder, K.S. *Chem. Rev.* 114 (2014) 11060–11082. doi:10.1021/cr300162p.
- [2] Abbott, A.P.; Capper, G.; Davies, D.L.; Rasheed, R.K.; Tambyrajah, V. *Chem. Commun.* 9 (2003) 70–71. doi:10.1039/b210714g.
- [3] Verevkin, S.P.; Sazonova, A.Y.; Frolkova, A.K.; Zaitsau, D.H.; Prikhodko, I. V.; Held, C. *Ind. Eng. Chem. Res.* 54 (2015) 3498–3504. doi:10.1021/acs.iecr.5b00357.