



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Cálculo do coeficiente de atividade de Deep Eutectic Solvents (DES) utilizando COSMO-SAC
Autor	EDUARDA NUNES PELISSER
Orientador	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

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

Aluna: Eduarda Nunes Pelisser
Orientador: Rafael de Pelegrini Soares

Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Solventes eutéticos profundos (*Deep Eutectic Solvents* - DES) são uma nova classe de solventes, baseados numa mistura binária de um doador e de um receptor de ligação de hidrogênio, com possíveis aplicações industriais futuras. O foco principal deste trabalho é calcular coeficientes de atividade 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 compatibilidades com determinados solutos. 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.

Para prever o comportamento dos DESs e a afinidade das moléculas envolvidas na formação do solvente, são primeiramente construídas moléculas no aplicativo Avogadro. A conformação de menor energia é buscada exaustivamente e o resultado salvo em arquivo formato .mol. Seguido disso, são executados cálculos de química quântica computacional com o pacote GAMESS, resultando em arquivos .gout. Esta etapa pode levar de algumas horas até dias, dependendo da complexidade da molécula. Após computadas as moléculas desejadas, as duas substâncias presentes na composição do solvente eutético são consideradas para análise de seus coeficientes de atividade na temperatura desejada. Graficam-se curvas de coeficiente de atividade vs. fração molar. Também são construídas curvas de equilíbrio sólido líquido, a fim de verificar o ponto eutético do DES. Para se observar a eficiência de um dado DES em determinados solutos, são feitos cálculos de coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC). Para tal, a concentração do soluto é considerada zero (apenas uma molécula de soluto envolta completamente pelo solvente) e, utilizando o modelo COSMO-SAC, é possível encontrar o valor do IDAC dessa mistura ternária. Os resultados obtidos podem ser comparados com dados experimentais já existentes na literatura.

Os resultados encontrados mostraram boa concordância com dados experimentais de IDAC para certas substâncias analisadas, no entanto apresentaram divergências acentuadas em alguns casos. O DES composto por cloreto de tetrametilamônio (HBA) e 1,6-hexanodiol (HBD) apresentou erro relativo de 0,51% em relação aos IDACs experimental e calculado do 1-heptino na temperatura de 313,15K. Já para o acetato de metila, apresentou erro relativo muito maior. Esse fato pode ser explicado pela diferença de polaridade entre o 1-heptino e o acetato de metila, visto que o pacote COSMO-SAC é mais preciso em cálculos os quais envolvem moléculas apolares, em decorrência da presença de ligações de hidrogênio exigirem certos parâmetros que podem estar desajustados nessas situações. Os diagramas de equilíbrio sólido-líquido apresentaram para a maioria dos casos maior desvio do comportamento observado experimentalmente. A otimização de parâmetros para o cálculo de IDAC e as imprecisões dos diagramas de ESL serão objeto de investigação no decorrer do trabalho.