



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2020
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Aumento do número de substâncias disponíveis para uso no programa cosmo-sac-phi
<b>Autor</b>	BRUNO CALIXTO REDIN
<b>Orientador</b>	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

**Título:** AUMENTO DO NÚMERO DE SUBSTÂNCIAS DISPONÍVEIS PARA USO NO PROGRAMA COSMO-SAC-PHI

**Autor:** Bruno Calixto Redin

**Orientador:** Rafael de Pelegrini Soares

**Instituição:** Universidade Federal do Rio Grande do Sul

**Departamento:** Escola de Engenharia

Programas de predição de propriedades podem ser úteis ferramentas, usadas em conjunto com simulações de processo, ou sozinhas para prever potenciais solventes para uma substância, por exemplo. Portanto, o objetivo deste trabalho é aumentar o número de substâncias disponíveis para o programa de predição de propriedades COSMO-SAC-Phi(CSPhi). O programa funciona a partir de 4 parâmetros básicos e do Perfil Sigma para cada molécula presente nele. O perfil Sigma deve ser entendido como a distribuição de cargas de uma molécula em sua própria superfície. Os 4 parâmetros usados pelo programa podem ser ajustados a cada molécula usando dados de pressão e volume de saturação das substâncias puras relativas aquela molécula, e os parâmetros são: **R<sub>k</sub>**, que representa o volume em Å<sup>3</sup>; **b<sub>h</sub>**, que representa um volume livre para a substância; **δ** e **δT**, que juntos formam uma equação de dispersão, dependente da temperatura, para aquela molécula. Para que a adição de novas moléculas no CSPhi fosse feita, uma lista com 990 moléculas foi escolhida, e o objetivo foi tentar incluir o maior número daquelas moléculas no programa. Então, cada Perfil Sigma da respectiva molécula foi montado usando os programas Avogadro, para a montagem da estrutura tridimensional da molécula, e o GAMESS, para a realização de cálculos quânticos baseado na estrutura da molécula e geração do Perfil Sigma. Além disso, foram necessários dados experimentais de pressão e volume de saturação relativos a cada molécula, para permitir a otimização dos 4 parâmetros individuais. Após a junção desses dados, uma nova versão do otimizador do CSPhi foi feita, para que o programa permitisse a otimização de múltiplas moléculas, e usasse o melhor método de otimização, sem que fossem necessários comandos para cada uma delas. Ao fim de algumas otimizações e ajustes, cerca de 486 novas moléculas foram inclusas no CSPhi, que originalmente tinha 36.