

Para a predição do comportamento de misturas são necessários cálculos termodinâmicos que, usualmente, são executados com modelos empíricos ou semi-empíricos que exigem grande quantidade de dados experimentais. Recentemente, Klamt (1995) propôs uma nova categoria de modelo termodinâmico (quase) totalmente preditivo que é baseado em mecânica quântica (MQ). A metodologia consiste na solução de um problema aproximado utilizando a técnica conhecida como COSMO. Os modelos baseados em COSMO são capazes de prever o comportamento de misturas utilizando apenas o perfil sigma determinado pela MQ, sem a necessidade de dados experimentais. A disponibilidade de modelos desta natureza é um grande diferencial tecnológico e abre possibilidades antes inviáveis com os modelos dependentes de experimentos. Este trabalho consiste na continuação da pesquisa iniciada na UFRGS em 2008 onde foi desenvolvido o programa computacional JCOSMO. Esta pesquisa constitui o primeiro estudo de modelos termodinâmicos baseados em MQ no Brasil. O JCOSMO implementa o modelo COSMO-SAC (Lin e Sandler, 2002) para calcular os coeficientes de atividade de misturas, com isso é possível prever, por exemplo, o equilíbrio líquido-líquido e líquido-vapor. Neste trabalho especificamente, estão sendo estudadas alternativas para a geração do perfil sigma. A utilização de perfis modificados requer uma reparametrização das constantes universais do modelo. Utilizando os novos perfis sigma foi observada uma melhora na qualidade do modelo para algumas famílias de substâncias. Foi então criada uma tabela que recomenda o uso do modelo para algumas famílias e desaconselha para outras. Assim, os resultados deste trabalho são: uma nova metodologia para a geração de perfis sigma; um novo conjunto de parâmetros para o modelo COSMO-SAC; e uma tabela de recomendação ou não do uso do modelo para diferentes famílias de substâncias.

