

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 (MC). 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 MC, 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 MC 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, serão apresentadas melhorias no modelo quanto à formação de ponte de hidrogênio entre as moléculas. O perfil sigma foi segregado em grupos de átomos cuja interação é diferente, ajustando cada um deles separadamente para obter um melhor desempenho. Com isso, foram alcançados resultados muito satisfatórios, melhorando consideravelmente o desempenho do modelo. Esses resultados representam o primeiro passo para que este modelo passe a ser utilizado industrialmente.