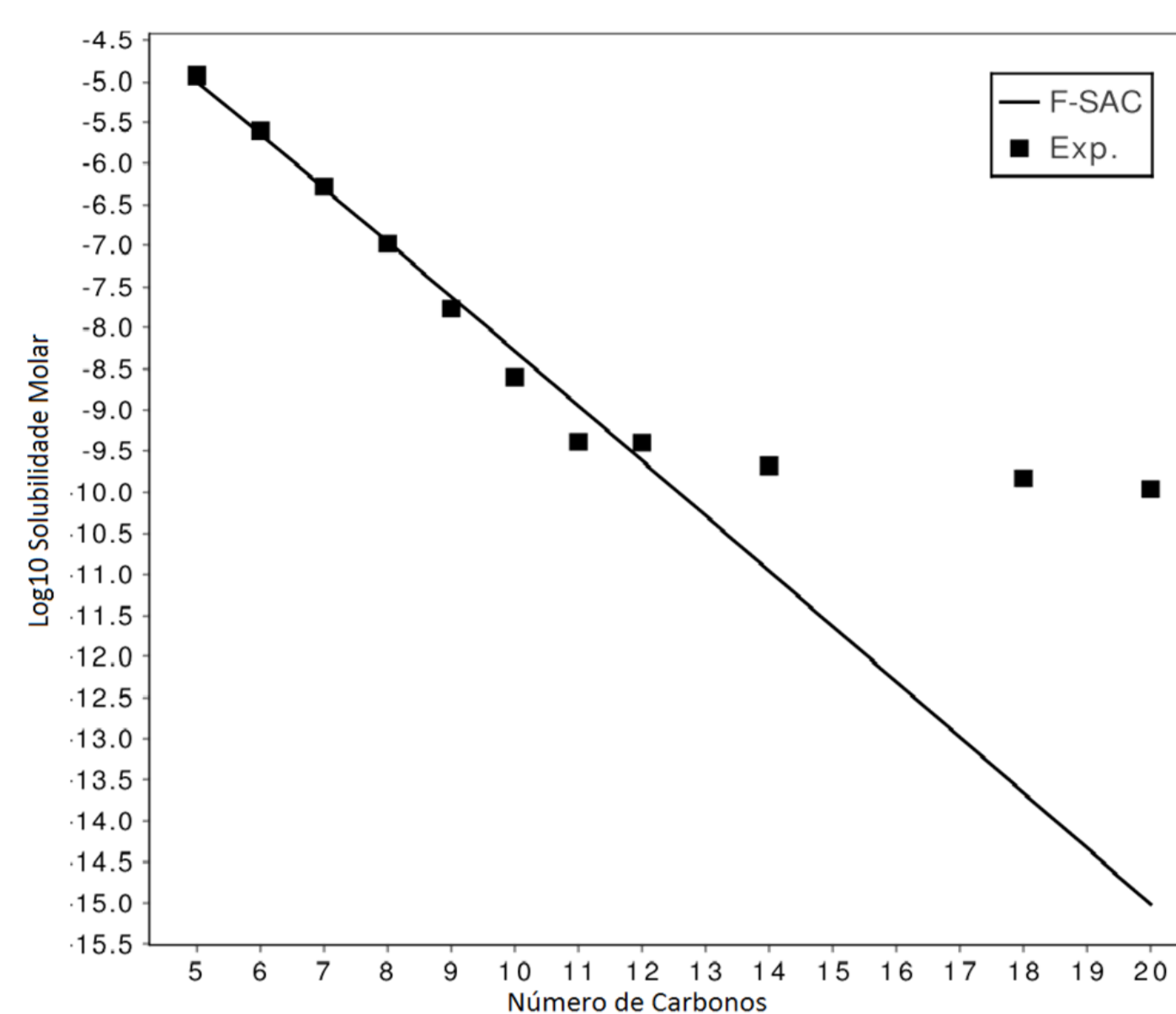


## Introdução:

O F-SAC<sup>[1]</sup> é um modelo preditivo de coeficiente de atividade baseado em contribuição de grupos funcionais e na teoria de superfície de contato. Este modelo considera que um dado componente é formado por vários grupos e a interação entre dois componentes se dá através da combinação da interação entre estes. No presente trabalho, o modelo F-SAC foi utilizado para prever a solubilidade de hidrocarbonetos em água.

O resultado da solubilidade predita pelo modelo apresentou boa correlação com dados experimentais para hidrocarbonetos de cadeias pequenas. Entretanto, para hidrocarbonetos constituídos por mais de 12 carbonos, o modelo prevê uma solubilidade menor do que a observada experimentalmente. No presente trabalho, modificações no modelo foram implementadas, onde os hidrocarbonetos podem apresentar-se em mais de uma conformação.

<sup>1</sup> SOARES e GERBER /Ind. Eng. Chem. Res. 2013, 52, 11159-11171



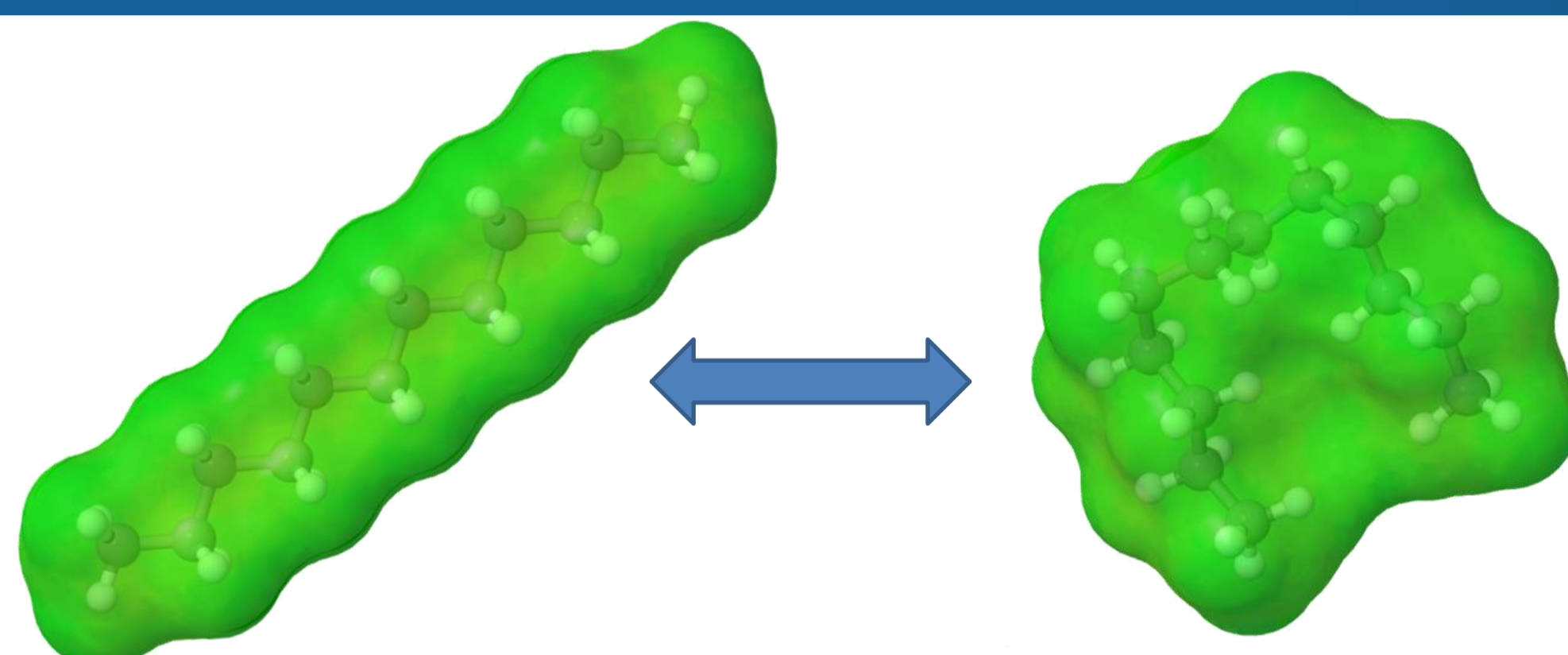
Solubilidade de hidrocarbonetos em água experimental e prevista pelo modelo F-SAC

## Teoria:

Uma teoria que explica a diferença observada para hidrocarbonetos de cadeias mais longas é que estes apresentam maior estabilidade em uma conformação colapsada do que em uma linear. A conformação colapsada apresenta uma área superficial menor do que a linear, resultando em um menor contato do hidrocarboneto com a água e, portanto, uma maior solubilidade.

A conformação *hairpin*<sup>[2]</sup> é citada na literatura como uma conformação mais estável para hidrocarbonetos de cadeias mais longas. Neste trabalho, esta conformação foi introduzida a fim de aprimorar o modelo F-SAC.

<sup>2</sup> BYRD et al./J. Phys. Chem. A, 2014, 118 (9), 1706-1712



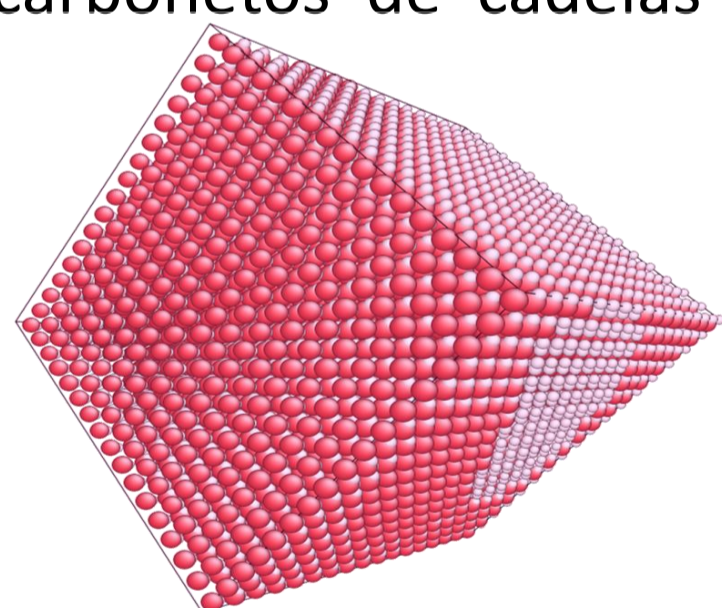
N-dodecano em conformação linear e na conformação *hairpin*, apresentando uma área superficial menor

## Metodologia:

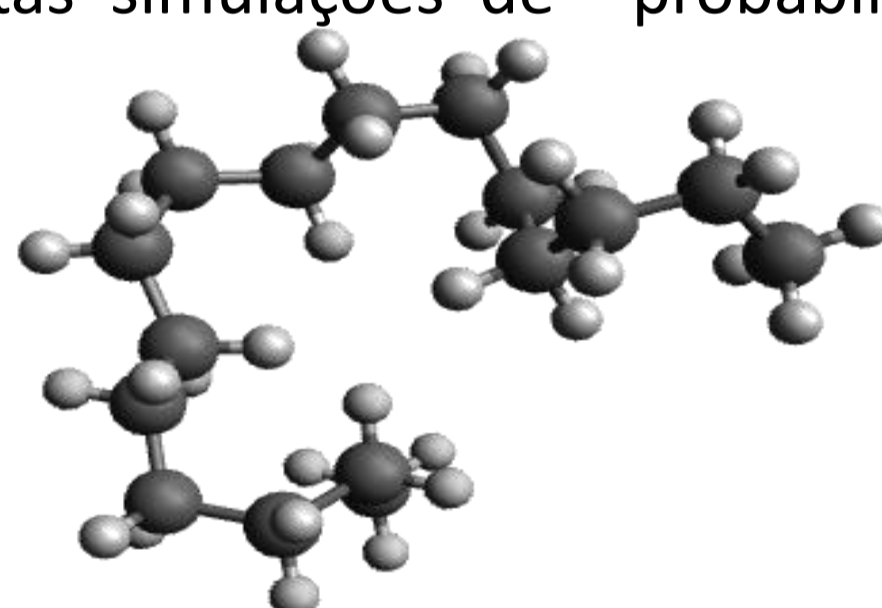
Hidrocarbonetos de cadeia linear e em conformação *hairpin* de até 20 carbonos foram construídos no editor molecular Avogadro. O pacote de química quântica MOPAC foi utilizado para obter suas áreas superficiais.

A fim de encontrar outras conformações estáveis para hidrocarbonetos de cadeias longas, foram feitas simulações de

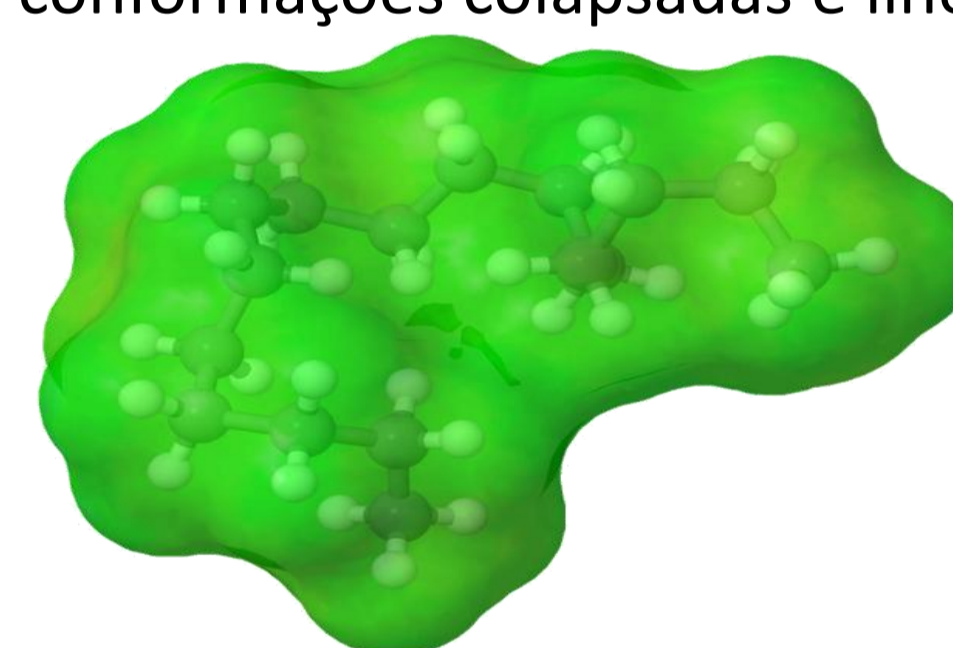
dinâmica molecular utilizando o programa LAMMPS e o visualizador AtomEye. As moléculas de hidrocarbonetos foram isoladas, podendo ser visualizadas no Avogadro. O MOPAC<sup>[3]</sup> foi utilizado para obter a área superficial. Foi controlado o raio de giro do hidrocarboneto durante a simulação a fim de analisar a probabilidade de ocorrer conformações colapsadas e lineares.



Caixa cúbica contendo uma molécula de hidrocarboneto em contato com água, visualizada em AtomEye



N-hexadecano após simulação, isolado e visualizado em Avogadro



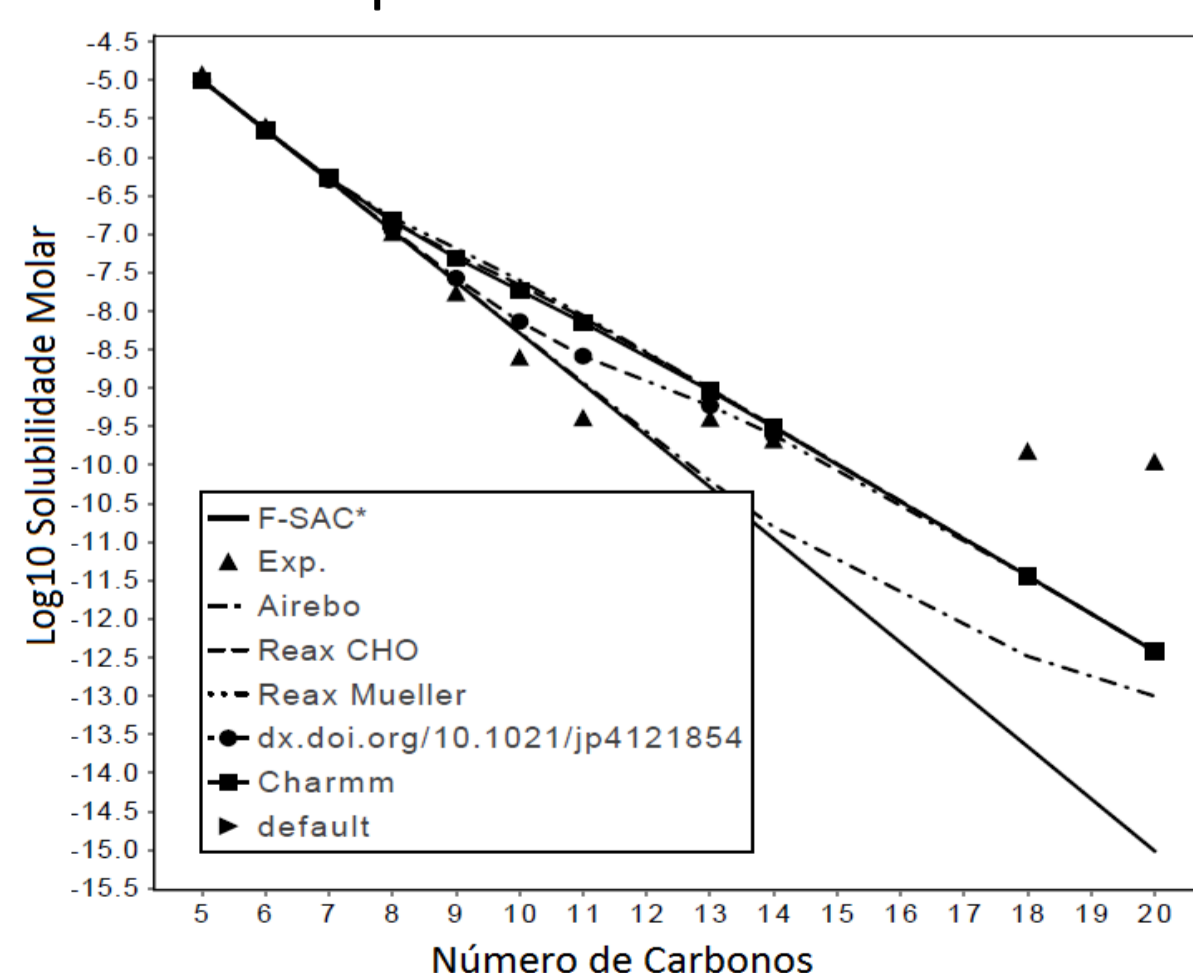
Área superficial obtida a partir do MOPAC

<sup>3</sup> STEWART, J. J. P., MOPAC2009, Stewart Computational Chemistry, Version 10.251L

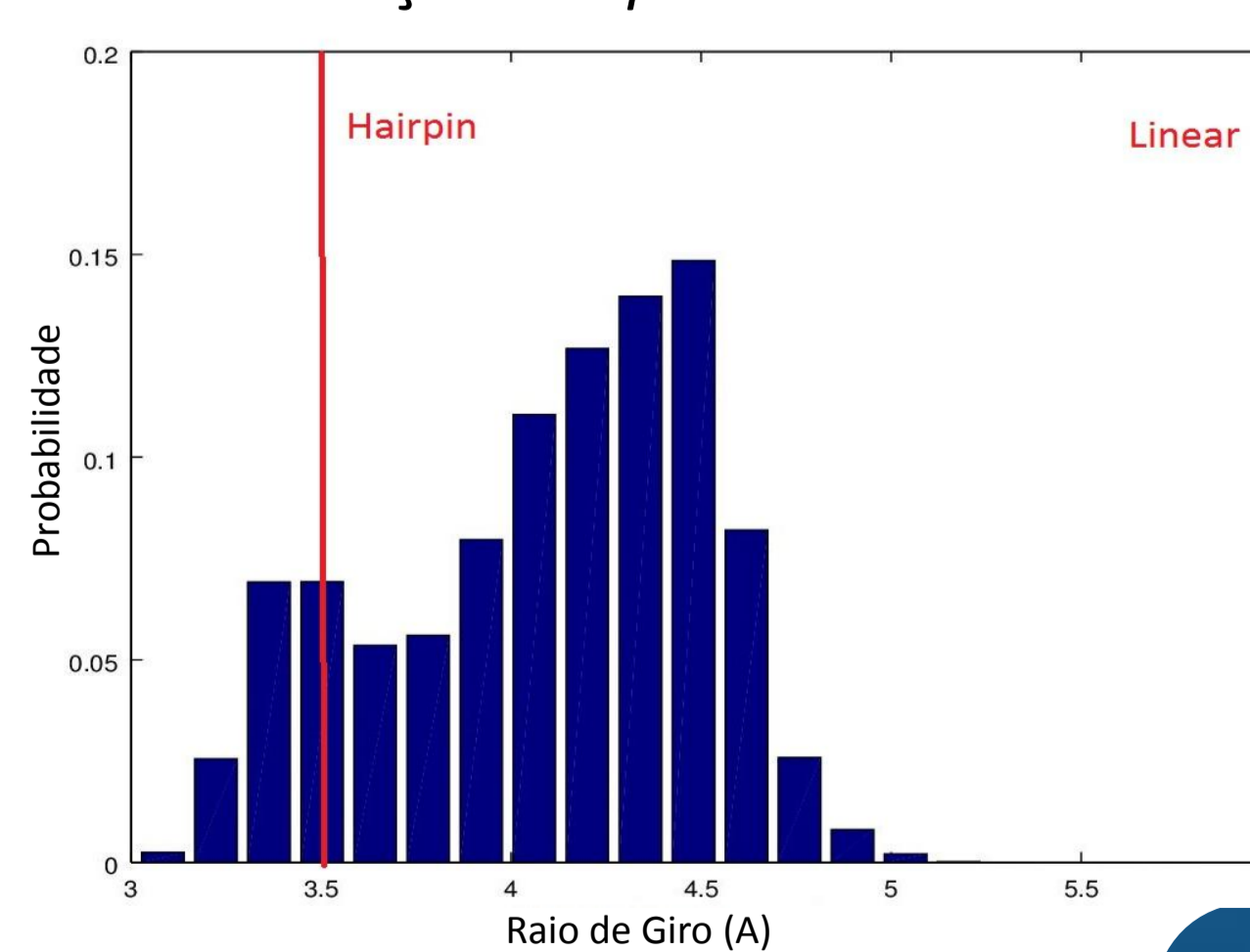
## Resultados :

Modificações no modelo F-SAC foram feitas, incluindo a probabilidade de ocorrer a conformação linear e *hairpin*. Desta maneira, a predição da solubilidade de hidrocarbonetos em água ficou mais próxima da observada experimentalmente.

A partir das simulações, foram encontradas conformações colapsadas para hidrocarbonetos de cadeias longas. As maiores probabilidades se encontram em conformações intermediárias entre a conformação *hairpin* e a linear.



Solubilidade de hidrocarbonetos em água experimental e prevista pelo modelo F-SAC (antes e após modificações)



Histograma de probabilidade em função do raio de giro para o n-hexadecano