



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	AMPLIAÇÃO DO MODELO COSMO-SAC PARA PREDIÇÃO DE EQUILÍBRIO SÓLIDO-LÍQUIDO DE AÇÚCARES
<b>Autor</b>	MIGUEL ÂNGELO HENTOUX
<b>Orientador</b>	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

# AMPLIAÇÃO DO MODELO COSMO-SAC PARA PREDIÇÃO DE EQUILÍBRIO SÓLIDO-LÍQUIDO DE AÇÚCARES

*Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.*

*Miguel Ângelo Hentoux e Rafael Pelegrini Soares*

## **Resumo:**

No presente trabalho, o modelo COSMO-SAC (COSMO-Segment Activity Coefficient) foi avaliado e aprimorado para a predição de propriedades de soluções de açúcares. O modelo COSMO-SAC proposto por Lin e Sandler (2012) é uma modificação do COSMO-RS (Klamt et al, 1998). Ambos modelos são baseados na teoria COSMO (CONductor-like Screening MOdel) que utiliza mecânica quântica para cálculos de contato entre as moléculas envolvidas, que por sua vez é transformado no coeficiente de atividade da fase líquida.

Foi efetuada uma busca por dados de equilíbrio para a solubilidade de açúcares em diferentes solventes ou mistura de solventes. A escolha da frutose deve-se ao seu grande interesse comercial. A dos solventes deve-se ao processo de cristalização da frutose que é feito através da adição de álcool em solução aquosa da frutose.

A frutose quando está em solução apresenta diferentes tautômeros. Em equilíbrio com a água, a  $\beta$ -D-fructopyranose é o tautômero predominante que representa 63,6% da frutose dissolvida, seguido de  $\beta$ -D-fructofuranose e de  $\alpha$ -D-Fructofuranose que representam 21,1% e 5,7% respectivamente, como visto por Barclay et al. (2012). Desta forma, selecionamos os três tautômeros predominantes para representar a frutose.

Para a construção das moléculas foi utilizado o programa Avogadro. Utilizando o MOPAC, criamos as superfícies de cargas das moléculas.

Para efetuar os testes foi escolhida a  $\beta$ -D-fructopyranose para representar a frutose, pois é o tautômero com maior proporção. Para o equilíbrio de  $\beta$ -D-fructopyranose e água, o programa calculou a solubilidade de frutose, utilizando como referência os dados da literatura.

O modelo descreveu corretamente de forma qualitativa a curva de solubilidade mas ha um desvio dos valores em relação aos dados da literatura. Por isso, foram realizados testes variando a energia de ligação do hidrogênio e a área onde esta ligação atua. Para que a curva coincida com os dados da literatura foi necessária alta energia e grande área, o que não condiz com a realidade.

Assim, a proposta de modificação é a retirada do parâmetro *cut-off*, que restringe as ligações de hidrogênio apenas para as cargas que superem este parâmetro. Com este parâmetro estático, a área onde a ligação atua varia para cada molécula. Então, o objetivo é fazer com que o programa encontre a área onde a ligação de hidrogênio atua, restringindo-a para um valor determinado em Possani et al.(2014). Com isso, esperamos que o modelo aproxime-se dos dados encontrados na literatura.

## **Referências:**

LIN, S.-T.; SANDLER, S.I. APriori Phase Equilibrium Prediction from a Segment Contribution Solvation Model. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 41, n. 5, p. 899-913, 2002.

KLAMT, A.; JONAS, V.; BURGER, T.; LOHRENZ, J.C.W. Refinement and Parametrization of COSMO-RS. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 102, n.26, p. 5074-5085, 1998.

Barclay, Thomas; Ginic-Markovic, Milena; Johnston, Martin; R Cooper, Peter; Petrovsky, Nikolai. *Carbohydrate research*, v.347, p.136-41, 2012

L.F.K. Possani, G.B. Flôres, P.B. Staudt, R. de P. Soares. *Phase Equilibria*, v.364, p.31-41, 2014.