

## Ensino de equilíbrio de fases para sistemas não-ideais através do programa JCosmo

O estudo de coeficientes de atividade é uma tarefa fundamental em processos de separação, já que estes são necessários para o cálculo do equilíbrio de fases. Através da correta predição do equilíbrio de fases, torna-se muito mais rápido e preciso o dimensionamento de operações de separação. A motivação deste trabalho é apresentar uma ferramenta computacional que utiliza a química quântica para determinar de forma preditiva os coeficientes de atividade de substâncias em misturas. Esta técnica é um contraponto aos métodos baseados puramente em experimentos que, apesar de mais precisos, apresentam muitas limitações quando comparados ao método computacional.

A ferramenta, que foi aprimorada neste trabalho, é o programa JCosmo. Esta ferramenta utiliza o modelo COSMO-SAC combinado com os pacotes de química quântica MOPAC, GAMESS ou DMol3 para calcular os coeficientes de atividade de misturas. Este programa computacional teve diversas funções adicionadas neste trabalho, permitindo entender quando uma mistura terá desvios da idealidade ou não. Entre estas funcionalidades está a visualização das superfícies de carga aparentes. Como esta é a principal informação considerada pelo modelo é possível visualizar e entender quando uma mistura apresentará comportamento ideal ou se apresentará desvios. Além disso, agora é possível comparar no próprio JCosmo os dados experimentais com os resultados obtidos com o modelo preditivo. Conclui-se que o programa JCosmo com as adições do presente trabalho tornou-se uma ferramenta interessante para a compreensão de sistemas não-ideais e que a qualidade dos resultados obtidos leva a concluir que o método preditivo tem potencial de substituir os métodos puramente empíricos.