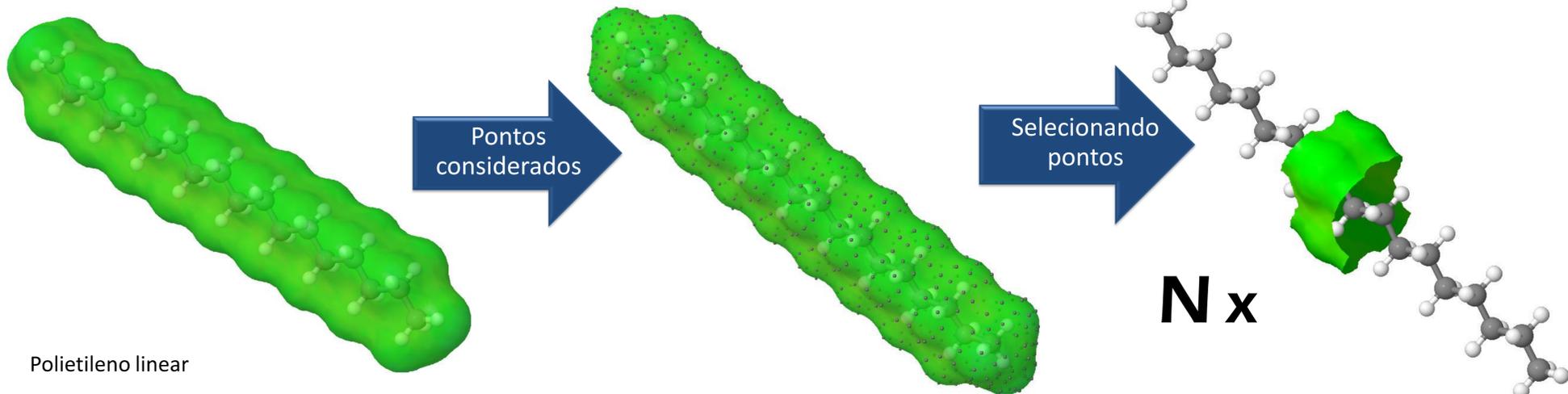


# PREDIÇÃO DO COMPORTAMENTO DE MISTURAS POLIMÉRICAS COM MODELOS TIPO COSMO-RS

L. W. Jacques, R. P. Gerber, R. P. Soares

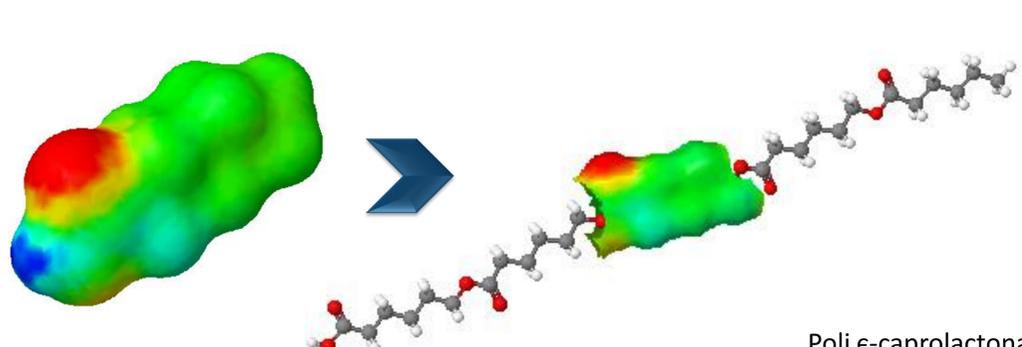
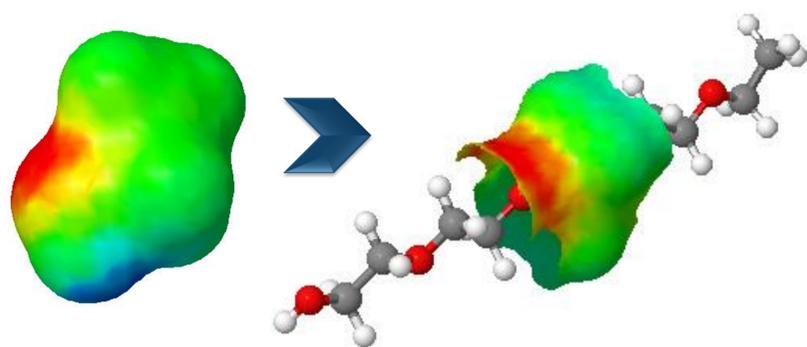
**Introdução:** Para sistemas em que o número de dados experimentais é limitado, uma ferramenta de predição das propriedades termodinâmicas é de grande importância. O modelo COSMO-RS foi o primeiro método capaz de prever o coeficiente de atividade de

componentes em mistura com base em mecânica quântica computacional. Desenvolvido em nosso grupo de pesquisa, o programa computacional JCosmo utiliza uma variação desse modelo, o COSMO-SAC, para calcular os coeficientes de atividade.



**Metodologia:** A informação essencial para estes modelos é a distribuição de cargas superficiais induzidas pelas moléculas quando puras. Para obter esta distribuição o pacote de química quântica MOPAC foi utilizado. Este pacote é capaz de calcular a carga induzida em uma superfície que englobe toda a molécula. Como cadeias poliméricas possuem um número de unidades

estruturais muito grande, é inviável fazer tais cálculos para os polímeros como um todo. Para contornar esse problema, foi proposto o cálculo das cargas superficiais de apenas uma *unidade repetitiva*, assim o polímero passa a ser uma multiplicação dessa unidade. Para tanto foi necessário desenvolver o método exemplificado acima.



Pelo método, as moléculas analisadas devem ser suficientemente grandes para atenuar o efeito das pontas.

Após um determinado tamanho, as cargas superficiais da unidade repetitiva passam a ser constantes. Logo, a carga representativa do polímero pode ser estimada.

**Conclusões:** Primeiras comparações com dados experimentais foram realizadas, resultando em gráficos que mostram valores de coeficientes de atividade de solventes em contato com um polímero. Pode-se notar uma tendência linear entre valores calculados e experimentais, o que é um resultado excepcional pois dessa forma apenas alguns parâmetros do modelo precisam ser ajustados para que os valores calculados e experimentais coincidam. Pontos distantes da reta de regressão correspondem a substâncias que apresentam forças de ligação intensas e alta polaridade, assim como a água.

Verificado que o programa possui um alto potencial na interpretação de equilíbrios que envolvam substâncias poliméricas, cadeias mais complexas passarão a ser introduzidas no programa.

## LnGamma - Polióxido de etileno

