

Para sistemas onde o número de dados experimentais é limitado, uma ferramenta de predição das propriedades termodinâmicas é de grande importância. Predições confiáveis são fundamentais para a concepção e otimização de processos industriais. 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 o modelo COSMO-SAC, uma variação do modelo COSMO-RS, para calcular os coeficientes de atividade. 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, não é possível, com a tecnologia computacional atualmente disponível, fazer tais cálculos para os polímeros como um todo. Para contornar esse problema, no presente trabalho é desenvolvida uma técnica que permite o cálculo das cargas superficiais de apenas uma *unidade repetitiva* para cada tipo de polímero. Para tanto foi necessário obter distribuições de cargas superficiais de cadeias poliméricas relativamente curtas, realizando um posterior trabalho de identificação e isolamento das unidades estruturais. Para verificar e melhor entender o procedimento, o programa JCosmo foi aprimorado para apresentar imagens tridimensionais de moléculas poliméricas apresentando a superfície relacionada com a unidade estrutural utilizada como referência nos cálculos.