

341

ESTUDO TEÓRICO DE MISTURAS LÍQUIDAS DE DIÓXIDO DE CARBONO E ANÉIS AROMÁTICOS. *Raquel da Silva Leviski, Hubert Karl Stassen (orient.)* (Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRGS).

No estudo de sistemas CO₂-anel aromático avaliamos suas propriedades estruturais e termodinâmicas. A obtenção de tais resultados se dá por cálculos computacionais com base na Dinâmica Molecular (DM). O objetivo do estudo é a comparação das misturas líquidas equimolares de CO₂ com anéis aromáticos (benzeno (C₆H₆) e hexafluorbenzeno (C₆F₆)). Fazemos uso do Potencial de Lennard-Jones (LJ) representando interações eletrostáticas através de potenciais entre cargas e quadroplos. Foram obtidas, para ambos os sistemas, as funções de distribuição radial centro de massa – centro de massa (CM-CM), sendo elas: aromático-aromático; aromático-CO₂ e CO₂-CO₂. A partir da integral dessas funções é possível calcular as frações molares locais de cada sistema. Nesse ponto se observa que as misturas tem comportamento bastante diferente. Observou-se, pelo cálculo das frações molares locais, um desvio da idealidade para o sistema dióxido de carbono – benzeno. Isso porque os dois sistemas em estudo tinham frações molares totais 0,5 CO₂ e 0,5 (C₆F₆ ou C₆H₆) e as frações locais do sistema com benzeno destoam desses valores. Esse desvio representa o comportamento das misturas. Para o sistema CO₂ + C₆F₆ o fator x_s mostra que ocorre uma mistura relativamente ideal, mas para CO₂ + C₆H₆ esse valor mostra separação de fases. As orientações preferenciais entre as moléculas para distâncias curtas (sobrepostas umas às outras) são entendidas como um efeito de empacotamento, que foi verificado para todas as distribuições espaciais de moléculas do mesmo tipo (nos dois sistemas). (PIBIC/CNPq-UFRGS).