



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2013
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Predição de Propriedades Termodinâmicas de Soluções Poliméricas
<b>Autor</b>	RENATA LORENCINI SIMOES
<b>Orientador</b>	RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

Para sistemas onde o número de dados experimentais é limitado, uma ferramenta de predição das propriedades termodinâmicas é de grande importância. No presente trabalho estão sendo desenvolvidas técnicas para prever o comportamento de misturas poliméricas e solventes. Para tal, foram construídos virtualmente diversos polímeros em um editor molecular e utilizado o pacote semi-empírico de química quântica MOPAC para calcular as cargas superficiais induzidas. Com esta informação é possível prever o comportamento das misturas com modelos tipo COSMO-RS. Entretanto, a determinação destas cargas não é computacionalmente viável para cadeias poliméricas como um todo, já que consistem em moléculas com um número muito elevado de átomos. Este problema foi contornado através de uma técnica que permite determinar estas cargas para uma unidade repetitiva do polímero. Esta tarefa é o cerne deste trabalho, onde foi desenvolvida uma técnica que permite isolar a unidade estrutural que melhor representa cada polímero. A partir disto, utilizando dados experimentais de coeficiente de atividade em diluição infinita, foi possível ajustar os parâmetros do modelo. Este ajuste foi executado para 8 polímeros diferentes, considerando aproximadamente 1800 dados experimentais de diferentes misturas polímero/solvente. Uma boa concordância entre os dados experimentais e o modelo foi obtida. No momento, a capacidade preditiva do modelo proposto está sendo testada para dados de equilíbrio líquido-vapor.