



| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2020 |
| Local | Virtual |
| Título | AMPLIAÇÃO DE UM BANCO DE DADOS E CALIBRAÇÃO DE PARAMÊTROS PARA O MODELO COSMO-SAC-PHI |
| Autor | EDUARDA NUNES PELISSER |
| Orientador | RAFAEL DE PELEGRINI SOARES |

AMPLIAÇÃO DE UM BANCO DE DADOS E CALIBRAÇÃO DE PARAMÊTROS PARA O MODELO COSMO-SAC-PHI

Aluna: Eduarda Nunes Pelisser

Orientador: Rafael de Pelegrini Soares

Laboratório Virtual de Predição de Propriedades (LVPP) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Este trabalho foi realizado em grupo, onde o foco consistiu no aumento e na calibração de dados para o modelo COSMO-SAC-Phi. Esse, é um novo método para inclusão de efeitos de pressão em modelos de coeficiente de atividade, o qual se baseia em volumes “livres” de molécula. Com a calibração de quatro parâmetros é possível fazer a predição do comportamento das moléculas em misturas e prever valores de pressão e volume de saturação puras, para substâncias que não contenham essas informações na literatura. Foram construídas e analisadas mais de 800 novas substâncias, e meu encargo principal foi a construção delas. Primeiramente, estruturaram-se as moléculas com o software Avogadro, em formato .mol. O principal cuidado nessa etapa, foi averiguar as diferentes conformações para as substâncias, sempre optando pelas menos energéticas possíveis. Além da averiguação das novas substâncias, também foram feitas análises de conformação de moléculas já presentes em nosso repositório, tendo corrigido conformações de mais de 200 moléculas. Após, foram realizados cálculos de química quântica, para a construção de superfícies externas e da distribuição de cargas ao redor delas, com o pacote GAMESS. Depois, foram coletados dados de pressão e volume de saturação, para a calibração dos parâmetros no CSPhi, os quais foram adicionadas em um repositório e, finalmente, calibradas. Dessa forma, foi possível analisar diversas substâncias, que, em misturas, não possuíam dados experimentais, como VLEs e LLEs. Foram computadas, com êxito, 638 moléculas, apesar de mais de 800 terem sido construídas. Isso se deu pelas limitações que as bases utilizadas no GAMESS nos causam, visto que os cálculos só são realizados em moléculas com átomos com número atômico menor que o do carbono. Também, nas predições dos valores de pressão e de volume de saturação, 230 substâncias apresentaram erros relativos abaixo de 50%, ficando na faixa entre 0.01647% e 49,7107%.