

# MODELAGEM TERMODINÂMICA DE SISTEMAS ASSOCIATIVOS: AVALIAÇÃO DA EXTENSÃO DA AUTO-ASSOCIAÇÃO DE ÁLCOOIS EM MISTURAS COM COMPOSTOS INERTES POR MEIO DE DINÂMICA MOLECULAR

H. M. Martins, R. R. Romeiro, P. A. Pessôa Filho

Universidade de São Paulo

henrique.milagres.martins@usp.br

## Objetivos

Este projeto tem como objetivo comparar os resultados de simulações de dinâmica molecular e da equação volumétrica de estado PC-SAFT com os resultados experimentais sobre a extensão das ligações de hidrogênio em sistemas contendo compostos autoassociativos e inertes.

## Métodos e Procedimentos

Para a realização das simulações, foi utilizado o *software* GROMACS, uma ferramenta destinada à execução de simulações de dinâmica molecular.

A metodologia aplicada às simulações consistiu de quatro etapas sequenciais, sendo elas: minimização, equilíbrio NVT, equilíbrio NPT e simulação de dinâmica molecular. Para cada uma das etapas utilizaram-se métodos específicos para controlar a temperatura (termostatos) e a pressão (barostatos) dos sistemas. Para a análise do número de ligações de hidrogênio, foi utilizada a função do GROMACS *gmx hbond*. As ligações são determinadas baseadas em *cut-offs* para o ângulo e a distância entre doadores e aceptores.

## Resultados

A Figura 1 resume os resultados obtidos para os sistemas simulados contendo etanol em hexano.

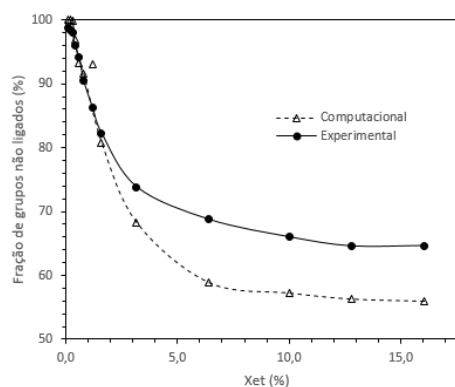


Figura 1: Fração de grupos não associados para misturas com diferentes concentrações de etanol (X<sub>et</sub>)

## Conclusões

De modo geral, os resultados mostraram que as simulações de dinâmica molecular reproduzem adequadamente a extensão da auto-associação determinada por FT-IR.

## Referências Bibliográficas

- Allen, M. P., Tildesley, D. J. *Computer Simulation of Liquids*
- Asprion, N., Hasse, H., Maurer, G. FT-IR spectroscopic investigations of hydrogen bonding in alcohol-hydrocarbon solutions. *Fluid Phase Equilibria*, v. 186, p. 1-25, 2001
- Prausnitz, J. M., Lichtenthaler R. N., Azevedo, E. G. *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*