XIX SBQT
Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

Estudo teórico de aglomerados moleculares de interesse da indústria petroquímica

Authors: Max Pereira Nunes, Leonardo Baptista

Endereço*: Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Tecnologia, Departamento de Química e Ambiental,*

Resumo: Tendo em vista a necessidade de determinação de propriedades termodinâmicas para fins industriais, equações de estado foram desenvolvidas para obtenção de dados difíceis de se medir experimentalmente. No entanto, tais equações de estado fazem uso de parâmetros de interações intermoleculares que requerem conhecimento detalhado a nível molecular do sistema[1]. Como uso de métodos computacionais mais rigorosos, como cálculo ab initio ou dinâmica molecular, são difíceis de se utilizar na rotina das atividades industriais, uma alternativa é o aprimoramento de equações de estado levando em consideração informações obtidas com nível de cálculo mais rigoroso. As equações do método SAFT foram desenvolvidas a partir do uso de informações a nível molecular, de forma que esta metodologia leva resultados precisos para estimativa de parâmetros termodinâmicos[2]. O presente estudo visa a verificação de diversas hipóteses utilizadas para o desenvolvimento do método SAFT utilizando cálculos *ab initio* e métodos DFT. Moléculas isoladas, dímeros e trímeros de compostos aromáticos funcionalizados foram otimizados em nível PBE1PBE, M06-2X e wB97XD com base 6-311G(d,p). Para um cálculo mais preciso da energia de interação, foi utilizado o método composto CBS-QB3 que faz uso de extrapolação ao conjunto de base infinito para obtenção de valores mais precisos de energia. O cálculo da energia de interação de dímeros e trímeros, Tabela 1, foi feito a fim de verificar a hipótese de que a energia de interação para formação de trímeros é igual a energia de interação para formação de dímeros. A análise inicial dos resultados aponta uma diferença maior que 3 kcal mol^{-1} para formação dos trímeros de fenol e anilina em relação aos respectivos dímeros. A comparação dos resultados em nível CBS-QB3 e PBE1PBE para formação mostra uma diferença maior que 2 kcal mol^{-1} para energia de interação corrigida por ZPE para formação dos dímeros. A Figura 1 apresenta um comparativo entre a estrutura do dímero e trímero de anilina em fase gasosa. No momento se encontra em andamento a análise do mapa de potencial eletrostático de monômeros de modo a verificar a hipótese usada pelo método SAFT de que as moléculas apresentam um ponto de ancoragem bem definido e localizado.

Tabela 1: Valores de ΔE em kcal mol^{-1} para energia de formação de dímeros e trímeros. Foram consideradas estruturas que fazem ligação de hidrogênio. Os resultados PBE1PBE estão corrigidos para o erro de superposição de base.

	anilina	**fenol**	**nitrobenzeno**
		Dímeros - CBS-QB3	
ΔE	-4,526	-7,164	-3,470
ΔE(+ZPE)	-3,624	-6,138	-3,125
		PBE1PBE/6-311G(d,p)	
ΔE	-3,997	-6,097	-5,869
ΔE(+ZPE)	-5,544	-7,385	-6,411
		Trímeros - PBE1PBE/6-311G(d,p)	
ΔE	-8,878	-9,779	
ΔE(+ZPE)	-11,30	-11,81	

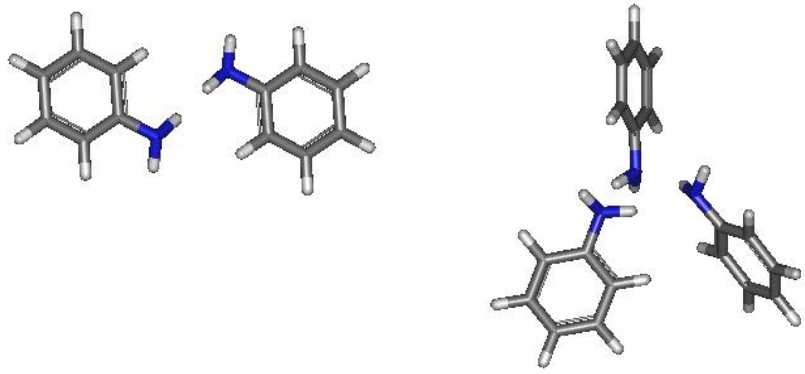

Figura 1: Geometrias otimizadas para o dímero e trímero da anilina. Resultados obtidos em nível PBE1PBE/6-311G(d,p).

Key-words: Compostos aromáticos, Ligação de hidrogênio, energia de interação, equações de estado.
Suporte: FAPERJ, CNPq e CENAPAD-SP

Referências:

[1] Silva-Oliver et al Fluid Phase Equilibria 250 (2006) 37–48.
[2] W.G. Chapmanet et al Fluid Phase Equil. 52 (1989) 31-38