



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE QUÍMICA E BIOTECNOLOGIA
QUÍMICA TECNOLÓGICA E INDUSTRIAL

ARTHUR GOMES RODRIGUES

DESAFIOS E PERSPECTIVAS PARA A APLICAÇÃO DA QUÍMICA
COMPUTACIONAL EM PROCESSOS INDUSTRIAIS, UMA REVISÃO

MACEIÓ - AL

2024

ARTHUR GOMES RODRIGUES

**DESAFIOS E PERSPECTIVAS PARA A APLICAÇÃO DA QUÍMICA
COMPUTACIONAL EM PROCESSOS INDUSTRIAIS, UMA REVISÃO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Química e Biotecnologia (IQB)
da Universidade Federal de Alagoas (UFAL),
como requisito para a obtenção do Título de
Bacharel em Química Tecnológica e Industrial

Orientador: Prof. Dr. Júlio Cosme Santos da
Silva

MACEIÓ - AL

2024

Catlogação na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

R696d Rodrigues, Arthur Gomes.

Desafios e perspectivas para a aplicação da química computacional em processos industriais, uma revisão / Arthur Gomes Rodrigues. – Maceió, 2024.
51 f. : il.

Orientador: Júlio Cosme Santos da Silva.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Química Tecnológica e Industrial) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Química e Biotecnologia. Maceió, 2024.

Bibliografia: f. 48-51.

1. Química computacional - Aplicação industrial. 2. Processos químicos. 3. Aprendizado do computador. 4. Indústria química. I. Título.

CDU: 66.0




Folha de Aprovação


Autor: Arthur Gomes Rodrigues

Título: Desafios e perspectivas para a aplicação da Química Computacional em processos industriais, uma revisão


Membros da Banca

Documento assinado digitalmente
 **JULIO COSME SANTOS DA SILVA**
Data: 06/12/2024 08:14:11-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Júlio Cosme Santos da Silva, IQB - UFAL (Orientador)

Documento assinado digitalmente
 **JOSE EDMUNDO ACCIOLY DE SOUZA**
Data: 07/12/2024 13:27:54-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. José Edmundo Accioly de Souza, IQB - UFAL

Documento assinado digitalmente
 **PEDRO PABLO FLOREZ RODRIGUEZ**
Data: 09/12/2024 15:07:49-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Pedro Pablo Florez Rodriguez, IQB - UFAL

Dedico este trabalho a meus pais Givanildo Rodrigues de Lima e Valdete Gomes de Lima, por todo o amor, carinho e apoio que me dedicaram durante toda a minha vida e por terem batalhado pela minha educação.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente ao meu Deus todo poderoso e ao seu filho Jesus Cristo, que pela intercessão da Virgem Maria e de São Miguel Arcanjo, me permitiu chegar até aqui. Que tudo seja feito conforme a vontade Dele.

A minha mãe, Valdete, por me apoiar em meus estudos com todo o amor e carinho, sempre me guiando pelo caminho certo e estando ao meu lado nos momentos bons e nos momentos ruins, sempre com uma atitude positiva e um sorriso no rosto.

Ao meu pai, Givanildo, por ter me ensinado os princípios e valores que carrego comigo até hoje e por sempre ter cuidado de mim, sendo não só um pai, mas também o melhor amigo e irmão mais velho que eu poderia ter tido.

A minha amada, Livia Marielly, por estar sempre ao meu lado em todos os momentos, cuidando e orando por mim.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Júlio Cosme Santos da Silva, pela paciência e por todos os ensinamentos passados durante a execução deste trabalho, sempre me direcionando para o caminho certo nos momentos de dúvida.

Ao Prof. Dr. José Edmundo Accioly de Souza, por ter me aberto inúmeras oportunidades na universidade e no mercado de trabalho, sempre acreditando no meu potencial e sendo mais do que um orientador, um grande amigo, sempre dando ótimos conselhos sobre o mercado de trabalho e sobre a vida.

Ao Prof. Dr. Pedro Pablo Florez Rodriguez, por ter me orientado no momento mais difícil da minha vida acadêmica, me direcionando não apenas na execução dos trabalhos, mas na minha própria jornada de amadurecimento, sendo um verdadeiro pai científico para minha vida acadêmica, tendo me acompanhado do primeiro semestre ao último.

A Prof^a. Dr^a. Aracelis Jose Pamphile Adrian, por todo apoio acadêmico, pelos conselhos nos momentos difíceis, por todo o carinho e positividade durante minha jornada acadêmica.

A todos os demais professores do IQB, que de alguma forma contribuíram para o meu desenvolvimento acadêmico e profissional.

Aos amigos da inseparável Equipe Rascunho, Carlos, Davi, Helena e Pedro, que estiveram comigo desde os primeiros dias de aula compartilhando sorrisos e experiências. Aos amigos do LC4, em especial Jonas, Sávio, Maju, Lís, Laís, Gabi, Socorro, Pedro e Eduardo, que sempre estiveram de portas abertas para me acolher. Aos queridos amigos da Quimitec,

Delma, Talia e Shaydy, por acreditarem no meu potencial e sempre me apoiarem, foi uma honra trabalhar com vocês.

Aos colegas de trabalho no CRQ 17, em especial Sr. Alberto, Samara, Lea, Vanice, Mariana, Adriana, Luciano, Josivaldo e Reginaldo, por terem me incentivado a crescer profissionalmente e por terem confiado no meu potencial e no meu trabalho, sempre me ajudando a ser um profissional e uma pessoa melhor.

A todos aqueles que de forma direta ou indireta contribuíram para a realização deste trabalho, meus agradecimentos.

RESUMO

A indústria química é responsável pela grande maioria dos produtos que estão presentes no dia a dia das pessoas, estando presente de maneira direta ou indireta nos alimentos, nas roupas, nos dispositivos eletrônicos e em outras inúmeras aplicações. A influência da indústria química no mundo é tão grande, que a produção de alguns produtos químicos é considerada um indicador de desenvolvimento socioeconômico, tendo em vista que a produção desses insumos está diretamente relacionada ao grau de industrialização de uma determinada região. Apesar da importância, a indústria química ainda sofre com problemas relacionados a obtenção de recursos e matéria prima, altos custos operacionais, geração de resíduos, impactos ambientais e volatilidade nos preços de mercado, além da falta de inclusão digital em alguns setores. Por outro lado, a química computacional pode ser uma alternativa promissora para mitigar a maioria dos transtornos da indústria e de processos químicos, através da redução de custos, utilização mais assertiva de matéria prima, projeto de equipamentos e processos mais eficientes, elaboração de rotas de síntese mais verdes, dentre outras. Nesse sentido, o objetivo desse trabalho foi a realização de uma revisão bibliográfica visando analisar o cenário atual no tocante a aplicação da química computacional em processos industriais, além de propor alternativas viáveis para catalisar essa aplicação, considerando o cenário local. Durante a realização do trabalho, foi constatado que embora o cenário de aplicação da química computacional no mercado ainda seja pequeno, existe uma perspectiva de aumento dessa aplicação, sobretudo mediante parcerias entre universidades e empresas, bem como o incentivo a pesquisas aplicadas, envolvendo uma aplicação mais prática da química computacional.

Palavras-chave: Química computacional; Aplicação Industrial; Processos Químicos; *Machine Learning*, Indústria Química;

ABSTRACT

The chemical industry is responsible for the vast majority of products that are present in people's daily lives, being present directly or indirectly in food, clothing, electronic devices and countless other applications. The influence of the chemical industry in the world is so great that the production of some chemical products is considered an indicator of socio-economic development, considering that the production of these inputs is directly related to the degree of industrialization of a given region. Despite its importance, the chemical industry still suffers from problems related to obtaining resources and raw materials, high operating costs, waste generation, environmental impacts and volatility in market prices, in addition to the lack of digital inclusion in some sectors. On the other hand, computational chemistry can be a promising alternative to mitigate most of the problems in industry and chemical processes, through cost reduction, more assertive use of raw materials, design of more efficient equipment and processes, development of production routes. green synthesis, among others. In this sense, the objective of this work was to carry out a bibliographical review aiming to analyze the current setting regarding the application of computational chemistry in industrial processes, in addition to proposing viable alternatives to catalyze this application, considering the local settings. During the work, it was found that although the application of computational chemistry in the market is still small, there is a prospect of increasing this application, especially through partnerships between universities and companies, as well as encouraging applied research, involving an application more practical computational chemistry.

Keywords: Computational Chemistry; Industrial Applications; Chemical Process; Machine Learning; Chemistry Industry

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- Rótulo do combustível "USGA".....	13
Figura 2- Fluxograma do processo de fabricação de cerâmicas vermelhas.....	19
Figura 3- Planilha montada para a organização dos artigos.....	24
Figura 4- Processo de triagem dos artigos.....	25
Figura 5- Distribuição dos trabalhos por área.....	29
Figura 6- Tela principal do módulo de equilíbrio e dos inputs para a geração das simulações	32
Figura 7- Diagrama de fases gerado em função da adição de carbono.....	33
Figura 8- Composição elementar do metal líquido.....	33
Figura 9- Óxidos presentes na fase "escória".....	34
Figura 10- Volumes molares calculados via DFT em 4 casos: 1) Componente i puro; 2) componente j diluído; 3) componente i diluído; 4) componente j puro.....	36
Figura 11- Metodologia utilizada para obter as rotas de síntese.....	38
Figura 12- Rotas de síntese com menor produção de gás carbônico.....	39

LISTA DE TABELAS

Tabela 1- Número de artigos em cada periódico.....	27
Tabela 2- Resultados encontrados na Science Direct.....	28
Tabela 3- Resultados encontrados na Springer Link.....	28
Tabela 4- Quantidade de leituras feitas em cada etapa.....	29
Tabela 5- Composição química do vidro de cal sodada.....	35

LISTA DE QUADROS

Quadro 1- Alguns exemplos de operações unitárias.....	19
Quadro 2- Classificação das áreas de acordo com as temáticas dos artigos.....	31
Quadro 3- Trabalhos selecionados para o estudo da arte.....	33
Quadro 4- Possíveis aplicações dos métodos apresentados.....	43

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

PIB	Produto Interno Bruto
SEBRAE	Serviço Brasileiro de Apoio às Micro e Pequenas Empresas
ABIQUIM	Associação Brasileira da Indústria Química
ANTAQ	Agência Nacional de Transportes Aquaviários
PVC	Policloreto de Vinila
USGA	Usina Serra Grande Alagoas
ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
NBR	Norma Brasileira
ILLIAC	<i>Illinois Automatic Computer</i>
RMN	Ressonância Magnética Nuclear
TOM	Teoria do Orbital Molecular
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
ACS	<i>American Chemical Society</i>
P&D	Pesquisa e Desenvolvimento
pH	Potencial Hidrogeniônico
g	Grama
wt%	Concentração em Peso
atm	1 Atmosfera
°C	Grau Celsius
kg	Quilograma
FTIR	Espectroscopia no Infravermelho com Transformada de Fourier
B3LYP	Funcional Híbrido
SAF	<i>Sustainable Aviation Fuel</i>
RING	<i>Rule Input Network Generator</i>

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	13
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	15
2.1 A INDÚSTRIA QUÍMICA.....	15
2.2 A INDÚSTRIA QUÍMICA NO BRASIL.....	16
2.3 A INDÚSTRIA QUÍMICA EM ALAGOAS.....	17
2.4 PROCESSOS QUÍMICOS.....	18
2.5 OPERAÇÕES UNITÁRIAS.....	20
2.6 INSTRUMENTAÇÃO INDUSTRIAL.....	21
2.7 FLUXOGRAMAS INDUSTRIAIS.....	22
2.8 A QUÍMICA COMPUTACIONAL.....	24
3 OBJETIVOS.....	26
3.1 OBJETIVOS GERAIS.....	26
3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	26
4 METODOLOGIA.....	27
4.1 PESQUISA BIBLIOGRÁFICA.....	27
4.2 ORGANIZAÇÃO DOS TRABALHOS.....	28
4.3 TRIAGEM DOS ARTIGOS.....	28
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	30
5.1 SELEÇÃO DOS ARTIGOS RELEVANTES.....	32
5.2 ESTUDOS DA ARTE.....	34
5.3 PROPOSTA DE APLICAÇÃO INDUSTRIAL.....	44
6 CONCLUSÃO.....	46
7 PERSPECTIVAS FUTURAS.....	47
8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	48

1 INTRODUÇÃO

A química teórica é a área da química que aplica os modelos físicos e teóricos da mecânica quântica ou da mecânica clássica, para solucionar problemas pertinentes à química, desde a reatividade de moléculas até estudos espectroscópicos mais avançados (HOLLAUER, 2019). Um dos campos da química teórica que possui vasta aplicação e potencial de crescimento é a química computacional, que consiste na utilização de programas de computador para a aplicação de modelos físicos e matemáticos pré estabelecidos na análise de fenômenos químicos (OLIVEIRA, 2022).

Uma das principais aplicações da química computacional está no estudo e na previsão de reações químicas, mediante simulações computacionais, tendo em vista a capacidade de processamento dos computadores atuais. Além disso, Rodrigues (2022) afirma que a química computacional foi uma importante ferramenta para o catálogo de um grande número de moléculas, reações químicas e dados, sendo fundamental também no acesso a bancos de dados químicos (RODRIGUES, 2022). Tendo em vista o potencial da química computacional em prever, simular e analisar reações químicas e propriedades químicas de modo geral, é inevitável associar tais vantagens à atividades industriais.

A indústria química possui uma grande importância para a sociedade, tendo em vista que praticamente todos os produtos presentes no nosso dia a dia, desde os alimentos até equipamentos tecnológicos (GAUTO, 2013). Além disso, o papel da química no cenário mundial é tão grande, que a produção de alguns insumos químicos é um dos indicadores do Produto Interno Bruto (PIB) de determinada região, levando-se em conta a vasta aplicação industrial desses compostos e os impactos econômicos ocasionados pelos mesmos (ANTAQ, 2019).

Apesar da importância socioeconômica, a indústria química ainda sofre de alguns problemas que necessitam de atenção. Dentre os principais problemas enfrentados pelo setor químico destacam-se a disponibilidade da matéria-prima, que devido a volatilidade dos preços e decorrência da qualidade e quantidade de material, gera alguns transtornos (SEBRAE, 2023). Outro problema bastante comum se dá pela alta produção de resíduos e subprodutos em alguns segmentos industriais, onde são necessárias alternativas como a economia circular e o reaproveitamento desses resíduos (RODRIGUES, 2020). Por fim, um grande desafio enfrentado pela indústria química contemporânea está na adequação da indústria às novas tecnologias para o atendimento das demandas da transformação digital, uma vez que em um

mundo globalizado e automatizado, não investir em inovação e otimização de operação está diretamente relacionado com perdas (SEBRAE, 2023).

Levando-se em conta este cenário, a química computacional e a inteligência artificial podem ser ferramentas extremamente úteis e funcionais para favorecer a otimização das atividades industriais, uma vez que a química computacional pode ser aplicada para o estudo das reações químicas presentes no processo industrial, visando otimizar as condições técnicas e de processo, reduzindo o custo energético, enquanto a inteligência artificial e os algoritmos de *machine learning* podem auxiliar tanto na automação dos equipamentos, como no desenvolvimento de ferramentas de gestão e indicadores econômicos (SEBRAE, 2023).

Com base nisso, o presente trabalho se propõe a fazer uma revisão bibliográfica e um estudo de caso acerca da aplicação da química computacional e outras tecnologias na otimização de processos industriais, bem como avaliar as perspectivas futuras.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 A INDÚSTRIA QUÍMICA

A química é uma ciência básica que tem como principal objetivo o estudo e o entendimento das estruturas atômicas de seus compostos, bem como suas propriedades físico-químicas, as reações e transformações dessas substâncias e as leis que regem estes comportamentos (HAWLEY, 1981). De maneira geral, a química abrange o estudo da matéria e de suas transformações.

As transformações químicas estão presentes em todo o ambiente que vivemos, desde a combustão de um composto orgânico até as complexas reações bioquímicas presentes no metabolismo humano. Com passar das décadas e com os avanços científicos e tecnológicos, a química foi se tornando cada vez mais presente no dia-a-dia da população, sobretudo na forma de produtos industrializados e novos materiais desenvolvidos. Atualmente, praticamente todos os produtos que possuímos em nossas casas passaram, direta ou indiretamente por alguma transformação química em alguma indústria, seja de alimentos, remédios, automóveis, equipamentos eletrônicos e uma gama de outros produtos (GAUTO, 2013).

Define-se como indústria química toda indústria cujos produtos são resultantes de transformações químicas ou físico-químicas, tais como extrações, separações, purificação de produtos naturais, formulações dentre outras atividades correlatas, normalmente envolvendo também a utilização de operações unitárias em seus processos (HAWLEY, 1981). A importância da indústria química no cenário global é tamanha, que um dos indicadores de desenvolvimento de um país é a sua produção de ácido sulfúrico, pois este é o composto mais utilizado na indústria, tendo diversas aplicações industriais (ANTAQ, 2019).

2.2 A INDÚSTRIA QUÍMICA NO BRASIL

A fabricação de açúcar nos engenhos foi a primeira experiência industrial brasileira, onde o primeiro engenho que se tem registro, surgiu em 1516 no litoral pernambucano (SANTOS, 2022). Durante o final do século XVI a produção anual de açúcar na colônia chegava a 4500 toneladas, geradas em 117 engenhos localizados principalmente nos estados de Pernambuco e da Bahia (WONGTSCHOWSKI, 2002). Nesse mesmo período, alguns corantes de origem vegetal obtidos a partir do pau-brasil, anil e urucu, já eram exportados em volumes crescentes, além disso, os anos de 1662 e 1702 foram marcados pelo início da produção de sal em escala comercial e de salitre, respectivamente.

Durante a chegada da família real portuguesa entre 1807 e 1808, diversos produtos químicos já eram produzidos no Brasil, dentre eles o sabão, medicamentos, carbonato de potássio, barrilha, cloreto de amônio e cal, além da extração de drogas medicinais e de resinas vegetais (WONGTSCHOWSKI, 2002). Entre os anos de 1808 e 1844 foram fundadas no país cerca de 45 empresas cuja principal atividade era a fabricação de produtos químicos, desde pólvoras a medicamentos.

A indústria química no Brasil teve um notável desenvolvimento durante o século XX, devido à industrialização do país. Nesse período, diversas empresas abriam suas portas para o mercado, desenvolvendo diversos insumos químicos para os mais diversos setores da indústria. Em 1911, a empresa S.A Indústrias Reunidas F. Matarazzo foi responsável pela implantação de um grande parque industrial, onde diversas empresas foram abertas entre os anos de 1920 e 1951. Tais empresas eram responsáveis pela produção de óleos e gorduras, refino de petróleo, produção de ácido cítrico e a fabricação de PVC (WONGTSCHOWSKI, 2002). Durante todo o século XX, diversas indústrias se instalaram no país, o que gerou muitos empregos e um alto índice de desenvolvimento econômico para o país (ABIQUIM, 2021).

Atualmente, o Brasil ocupa o 7º lugar no ranking mundial da indústria química global. De acordo com a Associação Brasileira da Indústria Química (ABIQUIM), as perspectivas são de que o Brasil ocupe posições ainda mais altas, tendo em vista que o setor fatura cerca de US\$ 190 bilhões, o que representa aproximadamente 11% de todo o Produto Interno Bruto (PIB) industrial e que pode crescer a partir de ganhos envolvendo eficiência energética e

climática, através da utilização de processos renováveis (FOLHA VITÓRIA, 2024). Dentre os setores de maior destaque na química brasileira destacam-se o sucroalcooleiro, o petroquímico, gases industriais, produtos de limpeza dentre outros (GAUTO, 2013).

2.3 A INDÚSTRIA QUÍMICA EM ALAGOAS

A história da química em Alagoas tem sua origem na atividade canavieira. Os primeiros engenhos do Estado foram fundados por Cristóvão Lins em meados do século XVI, sendo eles os engenhos Escurial, Maranhão e Buenos Aires, sendo estes, os primeiros registros de atividade açucareira no Estado (SINDAÇÚCAR - AL, 2024). A primeira usina de açúcar de Alagoas foi a usina Brasileiro, que foi criada em 1891 no município de Atalaia, devido as terras férteis da região e utilizava tecnologia importada da Europa.

Na década de 1930, Alagoas se destacou pelo desenvolvimento da tecnologia do álcool como combustível, desenvolvida e patenteada pela Usina Serra Grande durante a gestão de Salvador Pereira de Lyra, filho do Coronel Carlos Benigno Pereira de Lyra. O álcool combustível desenvolvido pela empresa recebeu o nome de USGA, conforme pode-se observar na figura 1, sendo estas as iniciais da usina (USINA SERRA GRANDE, 2024).

Figura 1- Rótulo do combustível "USGA"



Fonte: Usina Serra Grande, 2024

Atualmente o setor sucroalcooleiro é um dos mais importantes de Alagoas, sendo uma grande fonte de empregos para diversos profissionais da química.

Além das usinas sucroalcooleiras, Alagoas também conta com polo cloroquímico localizado no município de Marechal Deodoro, que conta com indústrias de primeira, segunda e terceira gerações. O desenvolvimento do Polo Cloroquímico do Estado ocorreu durante a década de 1970, quando foi apresentado o II Plano Nacional de Desenvolvimento (1975 - 1979), estimulando o a construção de polos industriais em toda a região nordeste do país (BRASIL, 1974). Com base nisso, o Governador do Estado Divaldo Suruagy (1975 - 1978; 1983 - 1986) elaborou uma série de estudos para viabilizar a implantação de um polo industrial, levando em conta que na mesma época a Salgema Indústria Química S/A (atual Braskem) estava sendo construída na região (DIODATO, 2017). O Polo Cloroquímico de Alagoas foi criado oficialmente em 1982, através do Decreto nº 87.103, de 19 de abril de 1982 (BRASIL, 1982).

Em 1975 surgia em Maceió o Distrito Industrial Governador Luiz Cavalcante, durante a gestão de Divaldo Suruagy, no entanto, o mesmo já havia sido idealizado pelo Governador Luiz de Souza Cavalcante (1966 - 1971). A inauguração do polo foi catalisada pelo Programa Nacional do Alcool - PROÁLCOOL, criado pelo Decreto nº 76.593, de 14 de novembro de 1975 (BRASIL, 1975). Com o fim do PROÁLCOOL diversas indústrias do Distrito fecharam as portas e outras acabaram migrando para outros estados, no entanto, atualmente o Distrito encontra-se em fase de revitalização e diversas indústrias permanecem ativas. Dentre os segmentos industriais correlatos à química localizados no Distrito Industrial destacam-se a área de alimentos, de bebidas, tintas e principalmente, as indústrias de plásticos.

2.4 PROCESSOS QUÍMICOS

De acordo com Felder (2018) um processo é qualquer operação ou série de operações que promovem, a partir delas, a execução de um determinado objetivo. Quando se trata da indústria química, esse objetivo é a transformação de uma matéria prima em um produto funcional que possui um valor agregado. De maneira geral, o processo pode ser definido como uma sequência lógica de atividades que tem por objetivo a produção de um bem de consumo para atender as demandas de um determinado público (CREMASCO, 2012).

Um processo químico industrial é a junção de diversas etapas de transformações químicas e físicas, devidamente controladas que transformam a matéria prima (alimentação do processo) em um produto acabado (saída do processo). Essas transformações ocorrem em condições específicas de pressão, temperatura, concentração, composição química, vazão de fluidos, massa, volume, densidade, dentre outras variáveis, que são controladas mediante a utilização de equipamentos específicos para cada finalidade. A essas variáveis, dá-se o nome de variáveis de processo (FELDER, 2018)

Para o entendimento adequado dessas condições, é necessário a aplicação de conhecimentos técnicos como Operações Unitárias, Fluxogramas, Instrumentação Industrial, Balanços de Massa e de Energia, Estequiometria Industrial, Ecologia Industrial, dentre outros (PEREIRA, 2015). Esses aspectos técnicos alinhados com os conceitos da química fundamental são a base dos processos industriais modernos. Tais detalhes técnicos também são fundamentais para classificar os processos de acordo com a sua operação, desse modo, os processos da indústria química podem ser classificados em processos contínuos ou em batelada (SHREVE, 1977), no entanto, ressalta-se que as indústrias de grande porte têm uma maior preferência para os processos contínuos, uma vez que estes possuem uma maior produção e podem ser realizados em malha fechada. Os processos em batelada são preferivelmente aplicados em indústrias de pequeno porte, que não possuem grande volume de produção (SHREVE, 1977; GAUTO, 2013)

Como se trata de uma combinação de variáveis, os processos industriais estão sujeitos a uma série de possíveis erros, desse modo, o químico industrial ou engenheiro químico que atua nesses processos deve monitorar de maneira minuciosa a atividade industrial mediante a utilização de ferramentas de gestão, bem como ferramentas técnicas. Ressalta-se também que os processos são fundamentais para o projeto industrial, uma vez que o processo está diretamente relacionado aos produtos que a empresa pretende fornecer para os seus clientes (CREMASCO, 2012). Nos subtópicos seguintes, serão abordados alguns conceitos fundamentais relacionados aos processos químicos.

2.5 OPERAÇÕES UNITÁRIAS

Um processo industrial envolve a aplicação de transformações físicas e químicas na matéria prima utilizada. As transformações físicas são extremamente importantes para a obtenção de produtos com alto interesse industrial, como é o caso do cloreto de sódio, que é obtido majoritariamente por meio de operações físicas (GOMIDE, 1980). As transformações físicas que ocorrem no processo são chamadas de operações unitárias.

Operações unitárias são um conjunto de etapas individuais de natureza física que visam o tratamento, separação, transporte ou transformação física de matéria e energia presentes em um processo químico (CREMASCO, 2012). O conceito formal de operações unitárias é fundamentado na filosofia de que uma grande sequência de ações complexas em um processo pode ser reduzida a etapas mais simples, ou a reações que são similares independente do material que está sendo processado (FOUST, 1982).

As técnicas das operações unitárias são baseadas em conceitos da engenharia, sendo uma aplicação prática dos fenômenos de transporte, bem como de ciências básicas, como matemática, física, química e biologia, permitindo que uma determinada operação unitária mantenha as suas características independentemente da natureza química das substâncias presentes no processo (CREMASCO, 2012).

Dentre as principais operações unitárias presentes nos processos industriais, destacam-se a moagem, evaporação, transporte de fluidos, destilação dentre outras. O quadro 1 exemplifica as principais operações unitárias e as suas aplicações:

Quadro 1- Alguns exemplos de operações unitárias

Classificação	Operações Unitárias	Aplicação industrial
Transporte de fluidos	Bombeamento, transporte de fluidos por compressores	Tratamento de água e efluentes, fabricação de bebidas
Operações com sólidos particulados	Moagem, britagem, transporte de sólidos particulados	Fabricação de farinhas alimentares, fabricação de clínquer e cimento
Troca de calor	Aquecimento, refrigeração, vaporização, condensação	Usinas sucroalcooleiras, fabricação de cervejas, fabricação de artefatos de material plástico
Separação	Destilação, centrifugação, peneiramento	Craqueamento de petróleo, fabricação de bebidas destiladas, fabricação de açúcar e álcool
Secagem	Spray drier, secagem por leito de jorro.	Fabricação de leite em pó, fabricação de medicamentos.

Fonte: Autor, 2024

As operações unitárias possuem uma importância fundamental nos processos químicos. Tal importância se reflete na legislação brasileira, uma vez que o Decreto nº 85.877/81 menciona que a fabricação de produtos químicos, ou de produtos industriais obtidos por reações químicas controladas ou operações unitárias é uma atividade privativa ao profissional da química (BRASIL, 1981).

2.6 INSTRUMENTAÇÃO INDUSTRIAL

Um processo industrial que dispõe de muitas operações unitárias utiliza muitos equipamentos pesados e que necessitam de um certo grau de automação. Um exemplo dessa necessidade pode ser observado nas operações de transporte de fluidos, uma vez que o escoamento dos fluidos bombeados se dá por complexos sistemas de tubulações industriais. Por esse motivo, a utilização de instrumentos como válvulas, medidores de pressão, vazão, pH

entre outras variáveis são necessários para um melhor monitoramento do processo, bem como um controle mais preciso e automatizado (GAUTO, 2013).

A utilização de instrumentos automáticos no controle dos processos industriais permite incrementar na qualidade dos produtos obtidos, bem como otimizar as variáveis do processo, evitando perdas e gastos energéticos exacerbados (GAUTO,2013). Esses instrumentos normalmente são inclusos em um sistema de controle, que consiste em uma série de unidades com controles lógicos que produzem um determinado resultado programado, sem supervisão humana. Um sistema de controle padrão é composto por um indicador, transmissor, controlador e um elemento final de controle.

Em uma planta industrial, esses instrumentos devem ser devidamente identificados de acordo com suas finalidades. No Brasil, essa identificação é regida pela Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT), mediante a norma NBR 8190, que dá as diretrizes para a utilização correta de letras e símbolos na identificação de equipamentos e instrumentos industriais (GAUTO, 2013).

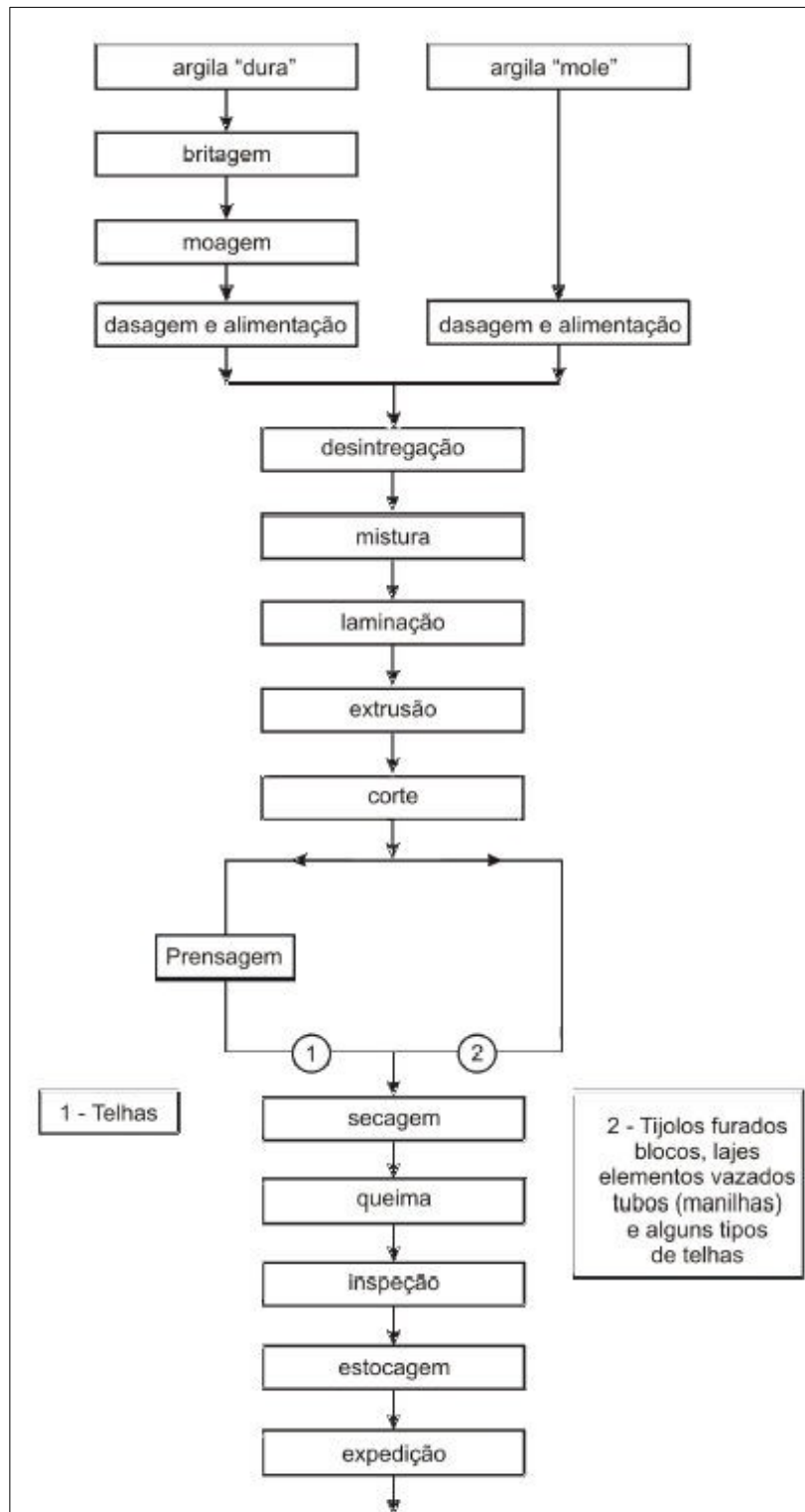
2.7 FLUXOGRAMAS INDUSTRIAIS

De acordo com Shereve (1977), os fluxogramas apresentam uma sequência coordenada das principais etapas das conversões químicas e das operações unitárias presentes no processo, de modo a expor os aspectos fundamentais do processo químico como um todo. Os fluxogramas indicam as condições adequadas para o processo, os pontos de entrada e saída de matérias-primas e da energia necessária, emissão de resíduos e formação de subprodutos, principais operações unitárias, instrumentos de medição e equipamentos utilizados, dentre outras informações.

Existem diversos tipos de fluxogramas que são adequados e melhor adaptados para diferentes situações. Os fluxogramas de blocos costumam ser utilizados nas etapas iniciais de um processo, ou quando se quer ter um panorama geral e simplificado acerca do processo da empresa. Quando se faz necessária uma visão mais assertiva do processo, um fluxograma mais elaborado, contendo as principais operações e a instrumentação se faz necessário. De modo geral, nenhuma descrição de um processo químico é tão concisa ou reveladora de um

equipamento quanto um fluxograma de processos. A figura 2 mostra um exemplo de fluxograma industrial.

Figura 2- Fluxograma do processo de fabricação de cerâmicas vermelhas



Fonte: ABCERAM, 2024.

2.8 A QUÍMICA COMPUTACIONAL

A química computacional é o ramo da química teórica que utiliza os conceitos fundamentais da química e da física, juntamente a métodos matemáticos, através de *softwares* computacionais, com o intuito de resolver e analisar problemas e sistemas químicos, ou com aplicações químicas. A utilização de computadores para a resolução de problemas químicos teve seu início em 1958 com o químico austríaco Martin Karplus, que utilizou um computador digital de 5 toneladas chamado de ILLIAC, em seus trabalhos com RMN. O equipamento possuía memória de 64 Kb e era programado a partir da perfuração de cartões. Em 1959 Karplus publica seu artigo e a equação encontrada em sua pesquisa ficou conhecida como Equação de Karplus (BIRCH, 2018).

Com o desenvolvimento de computadores mais modernos e de métodos de química quântica mais precisos, a química computacional foi ganhando destaque entre os químicos teóricos, possuindo aplicações na modelagem de diversas moléculas, no estudo da reatividade de espécies químicas, determinação de estados de transição entre outras aplicações. De acordo com Young (2001), a principal aplicação dos métodos computacionais se dá na modelagem de um sistema químico antes de se realizar a síntese dos compostos envolvidos, uma vez que essa abordagem evita o gasto desnecessário de reagentes caros e a produção de resíduos.

Os cálculos computacionais podem ser feitos utilizando dois tipos principais de métodos, os clássicos e os quânticos. Os métodos clássicos envolvem cálculos de dinâmica molecular e de mecânica molecular. Já os métodos quânticos envolvem cálculos baseados em soluções da equação de Schrödinger utilizando aproximações da equação, uma vez que esta não possui solução analítica quando se trata de moléculas. A maioria dos modelos teóricos aplicados em química computacional são métodos *ab initio* ou métodos semiempíricos baseados na Teoria do Orbital Molecular (TOM).

Nos métodos *ab initio* os cálculos realizados são inteiramente teóricos através de soluções aproximadas das equações, isto é, não necessitam de um dado de entrada experimental, utilizando-se apenas as constantes físicas fundamentais para a resolução das equações (SILVA, 2018). Dentre os principais métodos *ab initio* destacam-se os métodos de Hartree-Fock, a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) e alguns métodos perturbativos.

Já os métodos semi empíricos são fundamentados na mescla entre a teoria e resultados experimentais (SIMAS e ROCHA, 2007). O termo "semi empírico" foi utilizado pela primeira vez em 1931 pelos químicos teóricos Michael Polanyi e Henry Eyring que buscaram mesclar termodinâmica, cinética química, mecânica quântica e teoria da ligação de valência para construir superfícies de energia potencial. Desde então, diversos métodos semi empíricos foram aprimorados para serem aplicados nos mais variados sistemas químicos, sobretudo quando se trata de estrutura eletrônica. O grande desafio dos métodos semi empíricos para a previsão de determinadas propriedades moleculares é o fato destes ainda não possuírem uma precisão desejada, no entanto, de acordo com Simas e Rocha (2007), isso abre um vasto campo de estudo para a implementação de novos métodos semi empíricos cada vez mais precisos.

Os resultados teóricos obtidos pela aplicação da química computacional, de maneira geral estão em consonância com as observações experimentais, fazendo da química computacional uma forte aliada no desenvolvimento de novas tecnologias, bem como de novos conceitos químicos nos mais variados campos da área. Nesse sentido, ressalta-se que a evolução tecnológica abriu portas para a junção da química computacional com ferramentas tecnológicas recentes, visando otimizar os cálculos computacionais. Algumas dessas ferramentas são o *Machine Learning* e as inteligências artificiais. Diante disso, têm-se observado uma tendência na aplicação da química computacional em situações mais práticas e de interesse industrial, como pode-se observar no trabalho de Lima (2022), que aplicou cálculos DFT para o estudo da interação de íons de cálcio (II) e espécies inibidoras de incrustação utilizadas para evitar o desgaste dos equipamentos presentes indústria de petróleo e gás natural.

Por fim, ressalta-se que a química computacional pode ser uma ferramenta fundamental nos processos industriais, uma vez que proporciona estudos detalhados acerca de reações e interações químicas complexas de interesse, garantindo assim a obtenção de soluções de interesse para a otimização de processos industriais.

3 OBJETIVOS

3.1 OBJETIVOS GERAIS

Avaliar o cenário atual da aplicação dos métodos de química computacional nos principais segmentos da indústria química, bem como fazer um levantamento geral acerca das pesquisas desenvolvidas atualmente acerca da aplicação da química computacional e sua relação com o setor industrial.

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar quais setores industriais estão mais abertos a implementação de métodos computacionais;
- Identificar as vantagens e possíveis desvantagens da utilização da química computacional em processos industriais;
- Realizar uma pesquisa bibliográfica acerca do tema e identificar as principais demandas que a química computacional pode otimizar na indústria;
- Avaliar o interesse das indústrias em aderir à química computacional como uma ferramenta complementar aos seus processos e propor maneiras para essa possível aplicação;

4 METODOLOGIA

4.1 PESQUISA BIBLIOGRÁFICA

Para o cumprimento dos objetivos traçados neste trabalho, foi realizada uma pesquisa bibliográfica nas principais bases de dados pertinentes à área da química, bem como áreas correlatas, através dos métodos de revisão bibliográfica quantitativa e exploratória, respectivamente, que tiveram como intuito a avaliação da aplicabilidade dos métodos computacionais em processos químicos industriais em diversas esferas, desde a modelagem de moléculas de interesse na química fina e na farmacologia, até a aplicação interdisciplinar de *Machine Learning*, cálculos de química teórica e modelagem de processos industriais.

A aplicação do método utilizado possui uma grande vantagem, tendo em vista que proporciona ao pesquisador grande familiaridade com o tema, permitindo que o mesmo possa ser amplamente discutido, de modo geral. As pesquisas exploratórias tem como o principal objetivo desenvolver, esclarecer e modificar conceitos e ideias, formulando problemas mais precisos ou hipóteses pesquisáveis para estudos posteriores, sendo desenvolvidas para gerar uma visão geral acerca de determinado tema (GIL, 2008).

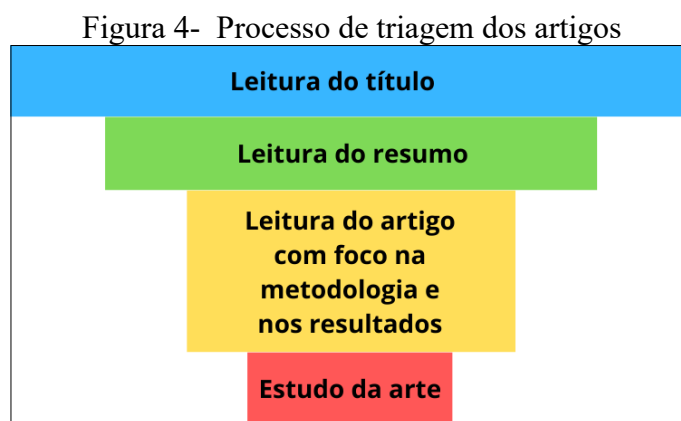
Foram escolhidas 4 bases de dados do Periódicos Capes para serem consultadas, sendo elas: *ACS Publications*, *Scopus (Elsevier)*, *Science Direct* e *Springer Nature Link*. As buscas foram realizadas utilizando diferentes combinações das palavras-chave: *Computational Chemistry*, *Industry*, *Machine Learning*, *Industrial Process*, *Theory Chemistry*, *Industry Applications*, para a obtenção de resultados quantitativos. Por fim, utilizou-se como critérios para a pesquisa o idioma da publicação (qualquer idioma), o acesso (online) e o tipo de publicação (artigos científicos, livros e revistas).

Os resultados quantitativos das buscas foram organizados em uma planilha do software *LibreOffice Calc*, divididas em 3 colunas principais: Bases de Dados, Palavras-Chave e Resultados da Busca. Através dos resultados quantitativos da pesquisa, foi feito um afunilamento dentro das bases que obtiveram os melhores resultados, a fim de se obter os tópicos mais relevantes e atuais acerca do tema.

termos próprios da indústria, como "operações unitárias" ou "processos", bem como termos associados à química computacional. Também optou-se pela leitura de títulos que fizessem referência a algum processo químico específico juntamente com algum método computacional. Após a leitura dos títulos, um número reduzido de artigos foi selecionado para a próxima etapa.

A segunda etapa foi realizada na planilha citada no tópico anterior, tendo como principal foco a leitura dos resumos dos artigos filtrados na primeira etapa da seleção, onde buscou-se identificar nos resumos informações acerca do método computacional utilizado, tecnologias associadas, aplicações práticas desses métodos e tecnologias, setor industrial e possíveis perspectivas industriais, além disso, buscou-se identificar uma correlação explícita entre a química computacional e a indústria.

Por fim, a terceira etapa da triagem foi a leitura completa e analítica dos artigos selecionados na segunda etapa, visando compreender de maneira total os métodos computacionais utilizados pelos autores, seus resultados, se a aplicação industrial foi bem sucedida e quais as principais perspectivas para a química computacional no meio industrial. A figura 4 mostra um fluxograma resumindo as etapas descritas.



Fonte: Autor, 2024

Após a triagem foram selecionados 3 artigos e um estudo de caso foi realizado nos seus resultados, correlacionando com a realidade das indústrias locais, bem como da universidade.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O estudo de propriedades e interações químicas entre espécies, bem como a busca por rotas de síntese mais verdes e econômicas tem gerado o interesse de aplicar a química computacional para a redução de custos com reagentes e insumos. Esse interesse também é demonstrado pela indústria, uma vez que a conscientização ambiental e a busca por processos otimizados e baratos tem crescido. Apesar de ser uma alternativa viável para a otimização de processos industriais, o número de pesquisas que visam uma aplicação prática dos métodos computacional em indústrias ainda é pequeno, salvo aquelas cujo foco é a pesquisa e o desenvolvimento de produtos (P&D), no entanto, tais pesquisas tendem a aumentar nos próximos anos, tendo em vista a conscientização ambiental e os desafios que a indústria química possui no tocante a disponibilidade de matéria prima.

Com base nessa perspectiva e seguindo a metodologia proposta, foi realizada uma busca nas bases de dados científicos utilizando-se diferentes combinações das palavras-chave: *Computational Chemistry, Industry, Applications, Machine Learning, Fluid, Project, Industrial Process*.

O resultado das buscas resultou em um total de 6.871 trabalhos, considerando o somatório dos resultados de cada base de dados. No entanto, após avaliação breve, constatou-se que a grande maioria dos artigos encontrados num primeiro momento não tinham como foco principal o tema abordado neste trabalho, sendo necessário um maior filtro¹. A tabela 1 mostra a quantidade de publicações por base de dados:

Tabela 1- Número de artigos em cada periódico

Base de dados	Resultados
ACS Publications	6
Scopus	551
Science Direct	4496
Springer Link	1818

Fonte: Autor, 2024

¹ As palavras-chave foram omitidas nesse primeiro momento, pois o foco era obter apenas o quantitativo dos trabalhos que abordam o tema estudado.

Conforme observado na tabela, as plataformas *Science Direct* e *Springer Link* demonstraram uma maior quantidade de artigos acerca do tema estudado, sendo mais propícias para a realização de uma busca mais aprofundada e posterior triagem dos artigos.

Para a realização da filtragem dos artigos, utilizou-se nas bases de dados selecionadas os descritivos *Computational Chemistry* e *Industry* junto com as palavras chave supracitadas, afim de se obter resultados mais precisos e correlatos com o tema central deste trabalho. As tabelas 2 e 3 detalham as palavras chave utilizadas e os diferentes resultados nas bases de dados pesquisadas:

Tabela 2- Resultados encontrados na Science Direct

Combinação de palavras chave	Filtro	Resultados
"Computational Chemistry" AND Industry	Keyword, Abstract	4496
"Computational Chemistry" AND "Industry Applications"	Keyword, Abstract	28
"Computational Chemistry" AND "Machine Learning" AND Industry	Keyword, Abstract	722
"Computational Chemistry" AND "Machine Learning" AND "Industry Applications"	Keyword, Abstract	8
Computational Chemistry AND Industrial Process	Keyword, Abstract	565

Fonte: Autor, 2024.

Tabela 3- Resultados encontrados na Springer Link

Combinação de palavras chave	Filtro	Resultados
"Computational Chemistry" AND Industry	Keyword, Abstract	1818
"Computational Chemistry" AND "Industry Applications"	Keyword, Abstract	3
"Computational Chemistry" AND "Machine Learning" AND Industry	Keyword, Abstract	384
"Computational Chemistry" AND "Machine Learning" AND "Industry Applications"	Keyword, Abstract	2
Computational Chemistry AND Industrial Process	Keyword, Abstract	55

Fonte: Autor, 2024.

Conforme destacado nas tabelas 2 e 3, a base de dados *Science Direct* apresentou uma maior quantidade de artigos científicos ao serem utilizadas as combinações de palavra chave apresentadas, no entanto, a plataforma *Springer Link* também apresentou artigos relevantes para os estudos. Desse modo, a seleção dos artigos para estudo de caso foi feita nas duas plataformas.

5.1 SELEÇÃO DOS ARTIGOS RELEVANTES

Os resultados quantitativos da seleção dos artigos mediante leitura dos títulos, dos resumos e do trabalho completo pode ser observado na tabela 4:

Tabela 4- Quantidade de leituras feitas em cada etapa	
Etapa	Artigos lidos
Leitura dos Títulos	165
Leitura dos Resumos	51
Leitura completa	15
Estudo de caso	3

Fonte: Autor, 2024

A leitura dos títulos teve o intuito de escolher os artigos para a leitura dos resumos, sendo estes organizados em planilha. Em contrapartida, a leitura dos resumos teve o objetivo de identificar menções da aplicação da química computacional à atividades industriais, com ou sem o auxílio de outras tecnologias. Por fim, a leitura completa dos artigos teve o intuito de verificar os avanços que se tem acerca do tema, bem como identificar possíveis indicadores ou até empresas que já tenham adotado tal prática.

Os artigos lidos na totalidade foram avaliados nos seguintes parâmetros: área, método computacional, tecnologia associada, ano e país de publicação. As áreas dos artigos foram pré-definidas durante a leitura dos resumos, sendo classificadas como consta no quadro 2:

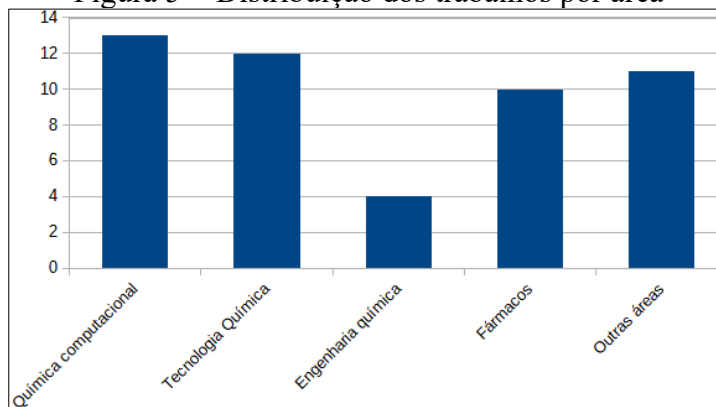
Quadro 2- Classificação das áreas de acordo com as temáticas dos artigos

Área	Definição
Química computacional	Trabalhos que tinham como foco o desenvolvimento de métodos computacionais ou a aplicação destes em estudos teóricos.
Química de materiais	Aplicação de métodos computacionais no estudo de materiais de interesse para a indústria
Catálise	Estudos teóricos e modelagem de catalisadores de interesse industrial.
Farmacologia	Modelagem de fármacos e moléculas de interesse para a indústria farmacêutica.
Tecnologia Química	Aplicação de métodos computacionais e outras ferramentas para a otimização de processos industriais ou na melhoria da gestão das empresas
Engenharia química	Aplicação da química computacional na modelagem de processos, bem como no projeto de equipamentos e de plantas.

Fonte: Autor, 2024.

Dentre os 51 resumos lidos, constatou-se uma maior quantidade de artigos na área da Química Computacional, seguido da Tecnologia Química, depois da área de fármacos e por fim da engenharia química, possuindo também um número não negligenciável de artigos de outras áreas. A figura demonstra a distribuição de cada área:

Figura 5- Distribuição dos trabalhos por área



Fonte: Autor, 2024

Desse modo, foi possível observar que, embora exista uma tendência e uma perspectiva de aumento de pesquisas voltadas a aplicação da química computacional na indústria, as aplicações voltadas à pesquisa básica ainda são dominantes no cenário geral. Em contrapartida, os artigos que possuíam abordagens mais práticas da aplicação da química computacional, tiveram seus trabalhos fundamentados majoritariamente em revisões na literatura, na implementação de alternativas para automação de processos, gestão de riscos e oportunidades, bem como na utilização de *machine learning* e inteligência artificial, sobretudo na implementação da Indústria 4.0.²

Para a leitura completa dos artigos, foi dada uma preferência aos trabalhos classificados como "química computacional", "tecnologia química" e "engenharia química", uma vez que estas áreas conversam melhor com a temática estudada.

5.2 ESTUDOS DA ARTE

Após a leitura completa dos artigos, foram selecionados 3 artigos para a realização do estudo de caso. Para a escolha alguns critérios foram considerados, onde deu-se prioridade a artigos recentes e com potencial de aplicação dos métodos computacionais estudados nas indústrias. Os 3 artigos selecionados estão listados no quadro 3:

2 Indústria 4.0: Termo utilizado para se referir a indústria com alto grau de automatização em seus processos, através da utilização de ferramentas digitais e inovadoras.

Quadro 3- Trabalhos selecionados para o estudo da arte

Título	Área	Ano	Método	Programa	Autores
The power of computational thermochemistry in high-temperature process design and optimization: Part 1 — Unit operations	Engenharia Química	2023	Semi empírico	FactSage	(SÁNCHEZ, J. R. C.; OISHI, K.; GERMAIN, L. S.; AMER, D. A., 2023)
Correlating Excess Volumes for Binary Mixtures of Green Solvents with the Help of Density Functional Theory	Química Comp.	2024	DFT	GAUSSIAM	(VELHO, P.; OLIVEIRA, R. A.; MACEDO, E. A., 2024)
Sustainable Aviation Fuel Molecules from (Hemi)Cellulose : Computational Insights into Synthesis Routes, Fuel Properties, and Process Chemistry Metrics	Tecnologia Química	2024	Semi empírico	Python	(CHANG, C. F.; PARAGIAN, K.; SADULA, S.; RANGARAJAN, S.; VLACHOS, D., 2024)

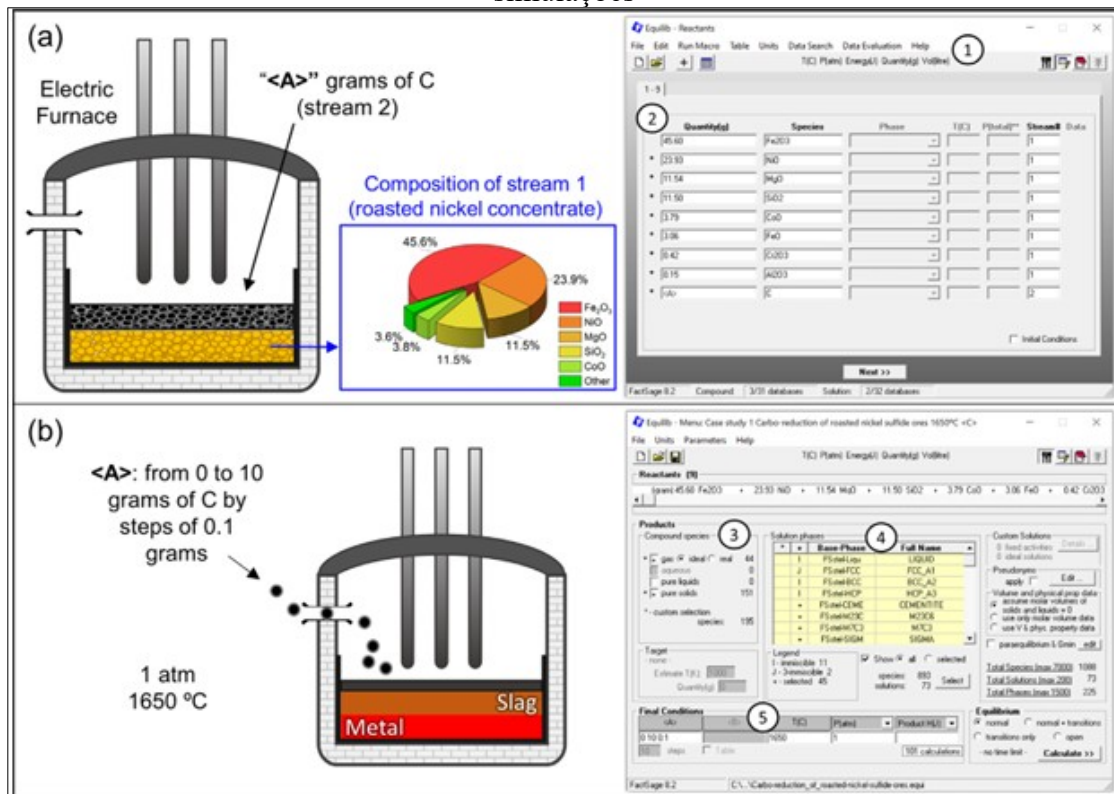
Fonte: Autor, 2024

5.2.1. Aplicação da termoquímica computacional no design e na otimização de reatores

O estudo realizado por Sánchez *et al* (2023) explorou diferentes simulações termoquímicas relacionadas ao design de operações unitárias em sistemas fechados aplicados

a indústria metalúrgica. Os autores realizaram 4 estudos de caso baseados em 4 simulações diferentes, mediante cálculos de termoquímica computacional utilizando o *software FactSage*. De maneira geral, a termoquímica computacional consiste em elaborar funções matemáticas que descrevem a energia livre de Gibbs em cada fase do processo estudado, de modo que a parametrização de cada função da energia livre de Gibbs é calculada utilizando dados numéricos e experimentais (SÁNCHEZ *et al*, 2023). A figura 6 mostra o *layout* do programa utilizado:

Figura 6- Tela principal do módulo de equilíbrio e dos inputs para a geração das simulações



Fonte: Sánchez, 2023.

As simulações foram feitas para diferentes processos presentes na indústria metalúrgica, sendo estes:

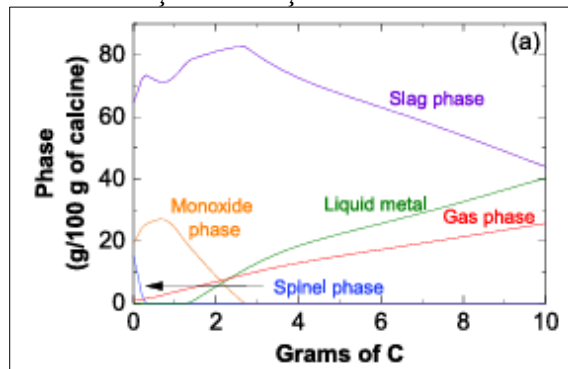
- Redução de carbono na produção de ligas de níquel;
- Balanços de massa e de energia para a produção e reciclagem de vidros;

- Particionamento elementar em um processo aluminotérmico para a produção de nióbio;
- Purificação de titânio;

Neste estudo da arte, abordaremos os dois primeiros estudos realizados pelos autores, tendo em vista que o método computacional utilizado em ambos os 4 é semelhante.

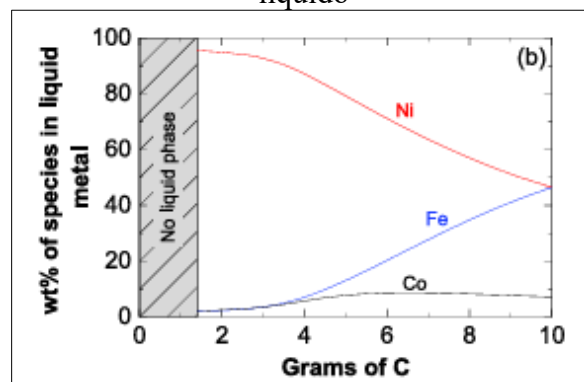
Como resultado, os autores conseguiram realizar simulações bastante precisas para cada caso estudado, embora possam diferir em alguns aspectos de uma operação real. No primeiro estudo, os autores utilizaram a simulação da termodinâmica do processo para estudar a formação de ferroníquel e de escórias, aproximando o processo do equilíbrio com diferentes adições de carbono, através da elaboração de diagramas de fase. A operação simulada a uma temperatura de 1650 °C e pressão de 1 atm. Os diagramas de fase elaborados em função da concentração de carbono podem ser observados nas figuras 7, 8 e 9.

Figura 7- Diagrama de fases gerado em função da adição de carbono



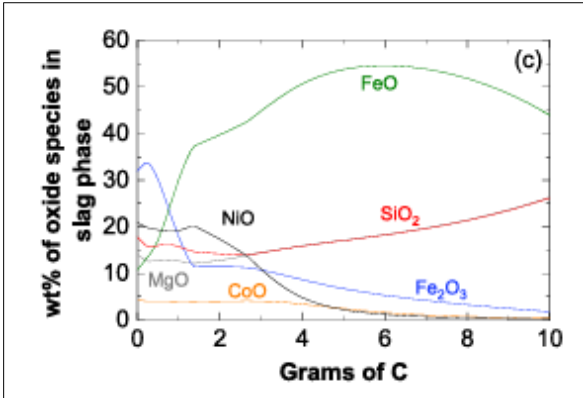
Fonte: Sánchez, 2023

Figura 8- Composição elementar do metal líquido



Fonte: Sánchez, 2023

Figura 9- Óxidos presentes na fase "escória"



Fonte: Sánchez, 2023.

Os diagramas de fase foram capazes de demonstrar a influência da quantidade de carbono no processo, no entanto, o balanço de massa global simulado diferiu do que era esperado para aplicações industriais.

No estudo do balanço de massa e energia para a fabricação de vidros os autores realizaram simulações precisas acerca da energia necessária para produzir 1 kg de vidro, tendo como parâmetro a decomposição térmica das matérias primas envolvidas e a liberação de CO₂. Para isso, os autores levaram em conta os dados empíricos acerca da composição química do vidro de cal sodada, uma vez que este possui um ponto de fusão relativamente baixo, sendo fáceis de fabricar na prática, além de facilitar as simulações (SÁNCHEZ *et al*, 2023). A tabela 8 mostra a composição química do vidro de cal sodada:

Tabela 5- Composição química do vidro de cal sodada					
Componente	Composição (wt%)	Reagentes	Massa (kg)	Emissões (kg CO ₂)	
				Extração	Decomp osição
SiO ₂	73,6	Sílica (areia)	0,74	0,02	-
Na ₂ O	16	Na ₂ CO ₃	0,27	0,31	0,11
CaO	5,2	CaCO ₃	0,09	0,01	0,04
MgO	3,6	MgCO ₃	0,08	0,01	0,04
Al ₂ O ₃	1	Al ₂ O ₃	0,01	0,01	-
K ₂ O	0,6	K ₂ CO ₃	0,01	0	0
		Total CO ₂	-	0,37	0,2

Fonte: Adaptada de Sánchez, 2024.

Para a realização dos cálculos, a matéria prima foi inserida como dado de entrada, sendo tratada como reagentes individuais no *FactSage*, de modo que ao definir as condições iniciais para o cálculo, o programa indicou automaticamente a forma alotrópica mais estável nas condições pré-estabelecidas. Os cálculos foram realizados do mesmo modo que o estudo anterior, com o intuito de se obter o diagrama de fase e a partir do mesmo identificar a fase gasosa, determinando a emissão de CO₂ e a partir disso determinar o balanço de massa e de energia do processo. Para isso, os autores realizaram simulações na faixa de temperatura de 25 a 1600 °C, com o intuito de identificar todas as fases e componentes do vidro, a fim de fazer o balanço de massa e energia completo.

Em ambos os estudos de caso realizados pelos autores, eles constatarem a precisão dos cálculos computacionais, bem como a redução de custos associados ao projeto e a testes em reatores, além de questões relacionadas à segurança dos mesmos, uma vez que é possível, através dos cálculos prever as condições ideais de pressão e temperatura em que cada processo é realizado, evitando possíveis acidentes, além de viabilizar projetos que visam a redução de emissões gasosas e processos mais otimizados, favorecendo o lucro consciente das empresas que optarem por possuir tais tecnologias.

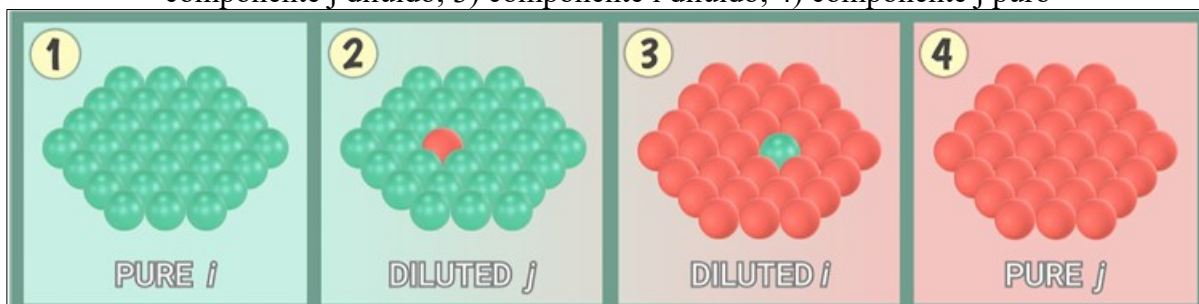
5.2.2. Determinação de volume excessivo de solventes verdes via DFT

No trabalho feito por Velho, Oliveira e Macedo (2024), os autores buscaram determinar o volume em excesso dos componentes da mistura de um solvente verde, destinado a aplicações na indústria farmacêutica e na indústria de alimentos. Segundo os autores, os principais solventes orgânicos utilizados nessas indústrias possuem um alto grau de toxicidade, sendo necessário o desenvolvimento de solventes verdes não tóxicos, renováveis e reutilizáveis, minimizando os impactos ambientais. Dentre as principais alternativas para a substituição dos solventes orgânicos convencionais estão os álcoois, os solventes eutéticos profundos³ e os líquidos iônicos, sendo estes os mais estáveis para aplicação. Os autores ressaltam no trabalho a dificuldade de caracterizar os líquidos iônicos e apresentam os cálculos DFT como uma alternativa para contornar essas dificuldades, bem como prever propriedades cruciais para a aplicação desses solventes.

3 Solventes eutéticos profundos, ou simplesmente DES (*Deep Eutectic Solvents*) são uma mistura de dois ou mais compostos químicos cujo ponto de fusão é mais baixo que os de seus componentes puros.

Para tal, os autores sintetizaram um líquido iônico de colina-aminoácido (CAAIL) denominado *cholinium isoleucinate* ([Ch][iso-Leu]) e utilizaram os cálculos DFT para fazer a modelagem do composto e a predição do espectro de FTIR do líquido iônico, utilizando o funcional híbrido B3LYP e as bases 6-311++G(d). Para a determinação do volume em excesso, os autores utilizaram a DFT para calcular o volume molar da mistura binária estudada. Os autores utilizaram uma combinação entre o funcional e as bases auxiliares utilizadas nos cálculos do espectro em conjunto com o modelo de solvatação IEFPCM. As estruturas modeladas via DFT podem ser observadas na figura 10:

Figura 10- Volumes molares calculados via DFT em 4 casos: 1) Componente i puro; 2) componente j diluído; 3) componente i diluído; 4) componente j puro



Fonte: Velho, 2024.

Através dos métodos computacionais, os pesquisadores determinaram a estrutura química, constantes dielétricas, densidade dos líquidos e as massas molares, utilizando a temperatura de 298,15 K. Para a determinação dos volumes molares em excesso, os autores utilizaram a equação 1:

$$V_{CQ}^E = \beta [\sum x_j (x_i^\phi V_{ij} + x_j^\phi V_{jj}) - \sum x_i V_i^*] \quad (1)$$

Em que V_{CQ}^E é o volume em excesso calculado computacionalmente.

Como resultado, os autores fizeram previsões computacionais altamente condizentes com as observações experimentais realizadas. Além disso, os autores conseguiram estimar o valor da constante dielétrica do *cholinium iso-leucinate*, usando uma adaptação da relação de Clausius-Mossotti e consequentemente, realizar os cálculos do excesso de volume utilizando outros parâmetros calculados computacionalmente. Por fim, constata-se que os métodos computacionais *ab initio* podem ser utilizados para reduzir etapas experimentais, evitando gastos de recursos com reagentes e solventes altamente valorizados no mercado, além de

prever o excesso do volume molar de um composto em solventes verdes de interesse industrial.

5.2.3. Percepções computacionais de rotas de síntese, propriedades e processos químicos envolvendo combustíveis a base de hemicelulose.

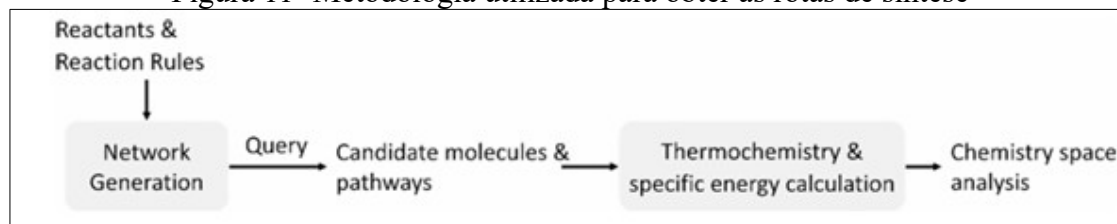
Um artigo recente publicado por Chang (2024) e seus colaboradores abordou um estudo acerca da importância da utilização de combustíveis sustentáveis para aviação. Os autores fizeram estudos computacionais semi empíricos utilizando uma série de algoritmos de python para obter diferentes rotas de síntese de combustíveis para aviação tendo como precursor a biomassa hemicelulose. Além das rotas de síntese, os pesquisadores buscaram estudar a termodinâmica das reações, a eficiência energética dos combustíveis alternativos e as possíveis aplicações nas aeronaves modernas.

O método computacional foi executado em 4 etapas, sendo elas:

1. Geração de uma rede de reações, visando encontrar possíveis reações condizentes com a síntese das moléculas de interesse. Tal processo foi realizado utilizando-se o método de *Rule Input Network Generator* (RING), para definir um conjunto inicial de reagentes derivados de biomassa, bem como as regras da reação, sendo estas baseadas na catálise heterogênea;
2. Consultas após a geração das moléculas no RING para obter as principais rotas de reação adequadas para os SAFs (*Sustainable Aviation Fuel*);
3. Estimativa da termodinâmica das moléculas e os caminhos energéticos específicos para cada molécula;
4. Análise de espaços químicos resultantes para obter caminhos reacionais específicos e percepções acerca de níveis de rede;

A figura 11 demonstra a metodologia utilizada:

Figura 11- Metodologia utilizada para obter as rotas de síntese



Fonte: Chang, 2024.

Como resultados, os autores conseguiram gerar através do RING redes de reação que incluem 223.107 espécies químicas e cerca de 363.840 reações químicas, demonstrando uma riqueza de informação. Dentre as moléculas encontradas foram observados alcanos, olefinas, compostos aromáticos, álcoois, ácidos, aldeídos e cetonas. Em decorrência da ausência de oxigênio em combustíveis destinados à aviação⁴, os autores focaram os trabalhos em hidrocarbonetos não aromáticos.

Com relação aos dados termodinâmicos os autores identificaram aproximadamente 100 alcanos para 300 possíveis rotas de síntese do combustível, sendo estes potenciais candidatos para a produção do SAFs. Os autores também conseguiram encontrar moléculas que nunca tinham sido reportadas nessas rotas de síntese, fazendo com que essas moléculas sejam potenciais moléculas de interesse para estudos futuros. Algumas rotas de síntese encontradas pelos autores podem ser observadas na figura 12.

⁴ A gasolina utilizada na aviação, assim como a utilizada em transportes rodoviários, trata-se de uma mistura de hidrocarbonetos. Desse modo, outras funções orgânicas que possuem heteroátomos em suas moléculas (oxigênio, enxofre) podem ser consideradas impurezas, causando danos ao motor do avião (REIS, 2015).

5.3 PROPOSTA DE APLICAÇÃO INDUSTRIAL

Diante dos estudos apresentados, observa-se uma tendência dos trabalhos em solucionar problemas referentes ao projeto de processos, síntese verde, redução de resíduos, redução de custos e otimização das industriais. Nesse sentido, é evidente que a química computacional possui um potencial gigantesco para promover melhorias à indústria química. No entanto, nenhum dos artigos analisados apresentou uma aplicação dentro de alguma empresa, apenas trabalhos acadêmicos com potencial aplicação industrial, o que indica que a utilização da química computacional dentro das empresas ainda encontra-se em desenvolvimento.

Apesar do cenário da aplicação da química computacional no mercado industrial ainda ser ligeiramente pequeno, os 3 artigos estudados apresentaram propostas inovadoras para mitigar os principais problemas existentes na indústria química. Tais questões ainda são caras no ponto de vista experimental, uma vez que exigem equipamentos pesados, plantas piloto e projetos industriais, sem contar a automação e a instrumentação desses processos (GAUTO, 2013).

As inovações apresentadas pelos autores têm o potencial de aplicação em diversos segmentos industriais, oferecendo melhorias como a inclusão digital das empresas (SEBRAE, 2023), redução do custo operacional no projetos de novos equipamentos, redução do gasto de matéria-prima, previsões acerca de operações mais seguras (SÁNCHEZ, *et al*, 2023) entre outras inovações. O quadro 4 mostra os principais problemas industriais constatados pelos autores e a resolução destes ocasionada pela aplicação da química computacional:

Quadro 4- Possíveis aplicações dos métodos apresentados

Referência	Problema na indústria	Solução
(SÁNCHEZ, J. R. C.; OISHI, K.; GERMAIN, L. S.; AMER, D. A., 2023)	Riscos de explosão associados às condições de pressão e temperatura nos reatores e outros equipamentos que operam em altas pressões e altas temperaturas.	Simulações de termoquímica computacional para identificar as condições ideais de operação dos equipamentos, fazendo uma prévia análise de risco, visando a otimização dos processos.
(VELHO, P.; OLIVEIRA, R. A.; MACEDO, E. A., 2024)	Alta toxicidade dos solventes orgânicos convencionais aplicados na indústria química.	Aplicação da química computacional para o desenvolvimento e a aplicação de solventes alternativos, reduzindo as etapas experimentais e, consequentemente, os custos.
(CHANG, C. F.; PARAGIAN, K.; SADULA, S.; RANGARAJAN, S.; VLACHOS, D., 2024)	Altas emissões de carbono devido aos combustíveis fósseis.	Aplicação da química computacional para obter rotas mais verdes de síntese de combustíveis a partir da biomassa, com alto rendimento e menor custo.

Fonte: Autor, 2024

Tendo em vista os benefícios da inclusão da química computacional na indústria química, uma possível forma de catalisar a aplicação dos métodos computacionais nas empresas pode ser o incentivo e a divulgação da química computacional e suas aplicações, sobretudo se tratando de parcerias entre a universidade e empresas, com o intuito de realizar pesquisa aplicada em química computacional e capacitar os discentes da universidade para a atuação no mercado de trabalho. A colaboração entre as indústrias e a universidade é fundamental para o desenvolvimento de novos materiais, tecnologias, processos e substâncias (DELANNOY, 2022). Um outro ponto a ser considerado é a interdisciplinaridade entre profissionais da área da computação, administração, engenharia e química, uma vez que a otimização de processos através da química computacional é uma atividade de interesse da empresa como um todo. Aplicações da química computacional juntamente com modelagem de processos e programação se mostram muito favoráveis no melhor aproveitamento de recursos e na economia circular (CHANG *et al*, 2024).

6 CONCLUSÃO

A preocupação com o meio ambiente e o interesse em rotas alternativas tem feito com que a indústria química busque novos meios de produção, buscando uma produção mais verde e otimizada. Nesse cenário, os métodos computacionais semiempíricos se mostraram bastante efetivos para a aplicação na simulação de condições reacionais, propriedades de moléculas e rotas de síntese de substâncias de interesse. Tais simulações aplicadas em conjunto com ferramentas de inteligência artificial são capazes de acelerar e baratear projetos de plantas e equipamentos industriais.

Apesar do baixo volume de artigos científicos que associam tal atividade, o panorama geral é promissor, uma vez que os trabalhos na área abordam temas de interesse industrial. No entanto, para que a implementação de métodos computacionais na indústria seja uma realidade, algumas medidas se fazem necessárias, dentre elas a inclusão de disciplinas de química computacional e modelagem de processos nas grades de química industrial e áreas afins, parcerias entre empresas e universidades para o fomento à pesquisa e à inovação e a realização de pesquisas de campo dentro da indústria, considerando também questões locais.

Tendo como base os estudos realizados e levando-se em conta a situação geral do Estado no tocante à indústria química, sugere-se para trabalhos futuros a realização de trabalhos de campo, mediante visitas à empresas locais com o intuito de avaliar as principais demandas dessas empresas no que se refere a custos operacionais, desenvolvimento de produtos, segurança, custo energético, gestão, inclusão digital dentre outros fatores, apresentando a química computacional como uma forma de mitigar, através de simulações computacionais e de previsões estratégicas, tais adversidades, ressaltando-se a necessidade da migração de alguns empreendimentos para empresa 4.0, através do bom uso da tecnologia.

Uma outra sugestão é a realização de pesquisas associando a química computacional ao empreendedorismo, visto que existem empresas no mercado focadas em atividades de consultorias e elaboração de projetos e processos químicos, nesse sentido, a aplicação das simulações computacionais pode trazer resultados mais rápidos e com alto grau de precisão, sendo um possível diferencial.

Finalizando, a execução deste trabalho permitiu observar a química computacional de maneira mais ampla, não apenas como uma ferramenta restrita à química teórica, mas como uma ferramenta prática que leva soluções práticas para a sociedade.

7 PERSPECTIVAS FUTURAS

De acordo com os resultados obtidos é evidente que, embora a química computacional possa ser uma ferramenta viável para a otimização de processos químicos e pesquisas de desenvolvimento de produtos, ainda existe uma lacuna entre a pesquisa científica e a aplicação industrial, uma vez que a maior parte dos artigos pesquisados continha um viés mais direcionado para a academia, embora a aplicação industrial fosse discutida. Com base nisso, a principal perspectiva futura é a realização de novos estudos buscando outras bases de dados mais acessíveis para a indústria, sendo uma dessas alternativas, a busca nos principais depósitos de patentes nacionais e internacionais, com ênfase em programas de química computacional e métodos computacionais que apresentem de maneira efetiva as aplicações demonstradas neste trabalho. A busca de patentes pode ser mais efetiva nesse sentido, uma vez que estas podem focar em solucionar um problema técnico mais específico para a empresa, além de existir a possibilidade de encontrar patentes pertencentes à empresas da área da química, permitindo uma avaliação mais assertiva acerca da aplicação e do desenvolvimento de programas de química computacional no meio industrial e empresarial.

Uma outra perspectiva futura é a realização de pesquisas bibliográficas mais assertivas e focadas em um tema central, utilizando um método computacional específico para a resolução de um determinado problema químico em um processo, incluindo termos como o nome do método, tipo de reação a ser estudada, tipo de indústria, dentre outros. A busca por termos mais específicos poderá proporcionar uma pesquisa mais precisa, levando uma solução para um problema industrial específico, podendo facilitar a aceitação da química computacional no meio industrial.

8 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABIQUIM. ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DA INDÚSTRIA QUÍMICA. Relatório de desempenho: Indicadores da atuação responsável - Ano base 2021. Disponível em: <abiquim.org.br> Acesso em 19 de março de 2024

ABIQUIM. ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DA INDÚSTRIA QUÍMICA. Demanda de produtos químicos mantém ritmo forte no 1º quadrimestre de 2021. Disponível em: <<http://abiquim.org.br/comunicacao/noticia/9564>> Acesso em 20 de março de 2024

ANTAQ. AGÊNCIA NACIONAL DE TRANSPORTES AQUAVIÁRIOS. Audiência Pública Seção - B: Estudo de Mercado. Disponível em: <<http://web.antaq.gov.br>> . Acesso em 19 de março de 2024

BIRCH, H.; 50 Ideias de química que você precisa conhecer. São Paulo. Editora Planeta, 2018.

BRASIL. Decreto nº 76.593, de 14 de novembro de 1975. Institui o Programa Nacional do Alcool e dá outras providências. (Revogado)

BRASIL. Decreto nº 85.877, de 07 de abril de 1981. Estabelece normas para execução da Lei nº 2.800 de 18 de junho de 1956, sobre o exercício da profissão de químico, e dá outras providências. Disponível em: <<https://cfq.org.br/decreto/decreto-no-85-877-de-07-de-abril-de-1981/>> Acesso em 19 de março de 2024

BRASIL. Decreto nº 87.103, de 19 de abril de 1982. Cria o pólo cloroquímico de Alagoas, estabelece normas para sua implantação e dá outras providências. Disponível em: Acesso em 19 de março de 2024

BRASIL. Lei nº 6.151, de 4 de dezembro de 1974. Dispõe sobre o Segundo Plano Nacional de Desenvolvimento (PND) para o período de 1975 a 1979. Disponível em: Acesso em 21 de março de 2024

CHANG, C. F.; PARAGIAN, K.; SADULA, S.; RANGARAJAN, S.; VLACHOS, D. G.; Sustainable Aviation Fuel Molecules from (Hemi)Cellulose: Computational Insights into Synthesis Routes, Fuel Properties, and Process Chemistry Metrics. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**. 2024, 12, 12927–12937. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.4c04199>> Acesso em 28 de outubro de 2024

CREMASCO, M. A.; Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos. São Paulo. Editora Blucher, 2012.

DELANNOY, J. Y. P.; Effective Industry–Academia Collaboration Driving Polymer Innovation. **ACS Polymers**. Aug 2022, 2, 137–146. Disponível em <<https://doi.org/10.1021/acspolymersau.1c00033>> Acesso em 31 de outubro de 2024

DIODATO, R. S.; Da concepção de um polo cloroquímico ao desenvolvimento da cadeia produtiva da química e do plástico em Alagoas. UFAL, 2017

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W.; BULLARD, L. G.; Princípios elementares dos processos químicos. 4ª ed. Rio de Janeiro. Editora LTC, 2018.

FOLHA VITÓRIA. Indústria química encara desafios para crescer em 2024. Disponível em:<<https://www.folhavitoria.com.br/geral/noticia/03/2024/industria-quimica-encara-desafios-para-crescer-em-2024/>> Acesso em 22 de março de 2024

FOUST, A.S., WENZEL, L. A., CLUMP, C.W., MAUS, L., ANDERSEN, L.B. Princípio das Operações Unitárias. Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois, 1982

GAUTO, M.; ROSA, G.; Química Industrial. Porto Alegre. Editora Bookman, 2013.

GIL, A. C.; Métodos e técnicas de pesquisa social. São Paulo. Editora Atlas S.A, 2008

GOMIDE, R. Operações Unitárias 1º Volume: Operações com sistemas sólidos granulares. São Paulo, 1980

HAWLEY, G. G.; Hawley's condensed chemical dictionary. 11th ed. New York, 1987.

HOLLAUER, E.; Química Quântica. 2ª ed. Rio de Janeiro, 2019

LIMA, D. F.; Modelagem computacional da interação entre íons de cálcio (II) e espécies inibidores de incrustação: compreendendo o mecanismo anti-incrustação. UFRN, 2022.

MORGON, N. H.; COUTINHO, K.; Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. São Paulo. Editora Livraria da Física, 2007.

OLIVEIRA, T. E. M.; Combinação de cálculos DFT e algoritmos de Machine Learning para o estudo da reatividade de complexos quadráticos plano de platina (II). UFAL, 2022

PEREIRA, F. S. G.; Processos Químicos. IFPE, 2015.

REIS, V.; Combustíveis e sistemas de combustíveis. Aero TD: Escola Civil de Aviação. Florianópolis, 2015.

RODRIGUES, A. G.; GUEDES, A. F. R.; SILVA, J. W.; SOUZA, J. E. A.; A reciclagem energética de polímeros como um incentivo à coleta seletiva em Maceió. **Revista Ambiental**. Alagoas, IMA - AL. v.3, nº.1, 2020. p.29-43.

RODRIGUES, S. P. J.; CARIDADE, P.; Contributos para a história da química computacional e do uso dos computadores em química. **História da Ciência e Ensino**. São Paulo. v.25.p.140-153. Disponível em: <<https://doi.org/10.23925/2178-2911.2022v25espp140-153>> Acesso em 28 de outubro de 2024.

SÁNCHEZ, J. R. C.; OISHI, K.; GERMAIN, L. S.; AMER, D. A.; The power of computational thermochemistry in high-temperature process design and optimization: Part 1 —Unit operations. **Elsevier Calphad**. 82 (2023) 102593. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2023.102593>> Acesso em 22 de outubro de 2024.

SANTOS, M. Z.; Dos antigos engenhos banguês em Alagoas até o aparecimento das primeiras usinas na década de 1920. UFAL, 2022

SHREVE, R. N.; BRINK, J. A.; *Indústrias de Processos Químicos*. 4ª ed. Rio de Janeiro. Editora Guanabara, 1977.

SEBRAE; Indústria química brasileira enfrenta desafios e oportunidades. Disponível em: <<https://sebrae.com.br/sites/PortalSebrae/artigos/industria-quimica-brasileira-enfrenta-desafios-e-oportunidades,6822922a889b6810VgnVCM1000001b00320aRCRD#:~:text=Um%20dos%20maiores%20desafios%20da,suscet%C3%ADvel%20a%20ter%20grandes%20perdas>> Acesso em 31 de outubro de 2024

SILVA, W. D. A. B.; Química computacional como estratégia de ensino do conceito de solvatação: Uma possibilidade de construção de uma ZDP. UFPE, 2018.

SIMAS, A. M.; ROCHA, G. B.; Métodos Semi-empíricos de Estrutura Eletrônica em Química Quântica. *in*: MORGON, N. H.; COUTINHO, K.; **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. São Paulo. Editora Livraria da Física, 2007. p.29-71

SINDAÇÚCAR - AL.; História. Disponível em: <<https://www.sindacucar-al.com.br/historia/>> Acesso em 30 de outubro de 2024

USINA SERRA GRANDE. História. Disponível em: <<https://www.usinaserragrande.com.br/usina-serra-grande/historia>> Acesso em 19 de março de 2024

VELHO, P.; OLIVEIRA, R. A.; MECEDO, E. A.; Correlating Excess Volumes for Binary Mixtures of Green Solvents with the Help of Density Functional Theory. **Ind. Eng. Chem. Res.** 2024,63,15990–15998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c02413>> Acesso em 21 de outubro de 2024.

WONGTSCHOWSKI, P.; *Indústria Química: Riscos e Oportunidades*, 2ª ed. São Paulo. Editora Blucher, 2002.

YOUNG, D. C. *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. New York. John Wiley & Sons, Inc. 2001.