

Isabela Quintela Matos

**Partition Coefficient Calculations of  
Molecules Mimicking Asphaltenes Through  
Molecular Simulation Using The  
Coarse-Grained SAFT- $\gamma$  Mie Force Field**

Rio de Janeiro

2018



Isabela Quintela Matos

**Partition Coefficient Calculations of Molecules  
Mimicking Asphaltenes Through Molecular Simulation  
Using The Coarse-Grained SAFT- $\gamma$  Mie Force Field**

Dissertação de Mestrado apresentada ao  
Programa de Pós-Graduação em Tecnologia  
de Processos Químicos e Bioquímicos,  
Escola de Química, Universidade Federal  
do Rio de Janeiro, como requisitos parcial à  
obtenção do título de Mestre em Engenharia  
Química.

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Escola de Química

Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos

Supervisor: Charlles Rubber de Almeida Abreu

Co-supervisor: Papa Matar Ndiaye

Rio de Janeiro

2018

Isabela Quintela Matos

Partition Coefficient Calculations of Molecules Mimicking Asphaltenes Through Molecular Simulation Using The Coarse-Grained SAFT- $\gamma$  Mie Force Field/ Isabela Quintela Matos. – Rio de Janeiro, 2018-

39 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Supervisor: Charlles Rubber de Almeida Abreu

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro

Escola de Química

Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, 2018.

1. Palavra-chave1. 2. Palavra-chave2. 2. Palavra-chave3. I. Orientador. II. Universidade xxx. III. Faculdade de xxx. IV. Título

# Errata sheet

Elemento opcional da ??, 4.2.1.2). Exemplo:

FERRIGNO, C. R. A. **Tratamento de neoplasias ósseas apendiculares com reimplantação de enxerto ósseo autólogo autoclavado associado ao plasma rico em plaquetas**: estudo crítico na cirurgia de preservação de membro em cães. 2011. 128 f. Tese (Livre-Docência) - Faculdade de Medicina Veterinária e Zootecnia, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011.

Folha	Linha	Onde se lê	Leia-se
1	10	auto-conclavo	autoconclavo



Isabela Quintela Matos

# **Partition Coefficient Calculations of Molecules Mimicking Asphaltenes Through Molecular Simulation Using The Coarse-Grained SAFT- $\gamma$ Mie Force Field**

Dissertação de Mestrado apresentada ao  
Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos,  
Escola de Química, Universidade Federal  
do Rio de Janeiro, como requisitos parcial à  
obtenção do título de Mestre em Engenharia  
Química.

Trabalho aprovado. Rio de Janeiro, 24 de novembro de 2012:

---

**Charles Rubber de Almeida Abreu**  
Orientador

---

**Professor**  
Convidado 1

---

**Professor**  
Convidado 2

Rio de Janeiro  
2018





*Este trabalho é dedicado às crianças adultas que,  
quando pequenas, sonharam em se tornar cientistas.*



# Acknowledgements

Os agradecimentos principais são direcionados à Gerald Weber, Miguel Frasson, Leslie H. Watter, Bruno Parente Lima, Flávio de Vasconcellos Corrêa, Otavio Real Salvador, Renato Machnievscz<sup>1</sup> e todos aqueles que contribuíram para que a produção de trabalhos acadêmicos conforme as normas ABNT com L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X fosse possível.

Agradecimentos especiais são direcionados ao Centro de Pesquisa em Arquitetura da Informação<sup>2</sup> da Universidade de Brasília (CPAI), ao grupo de usuários *latex-br*<sup>3</sup> e aos novos voluntários do grupo *abnT<sub>E</sub>X2*<sup>4</sup> que contribuíram e que ainda contribuirão para a evolução do *abnT<sub>E</sub>X2*.

---

<sup>1</sup> Os nomes dos integrantes do primeiro projeto *abnT<sub>E</sub>X* foram extraídos de <<http://codigolivres.org.br/projects/abntex/>>

<sup>2</sup> <<http://www.cpai.unb.br/>>

<sup>3</sup> <<http://groups.google.com/group/latex-br>>

<sup>4</sup> <<http://groups.google.com/group/abntex2>> e <<http://www.abntex.net.br/>>



*“Não vos amoldeis às estruturas deste mundo,  
mas transformai-vos pela renovação da mente,  
a fim de distinguir qual é a vontade de Deus:  
o que é bom, o que Lhe é agradável, o que é perfeito.  
(Bíblia Sagrada, Romanos 12, 2)*



# Abstract

Segundo a ??, 3.1-3.2), o resumo deve ressaltar o objetivo, o método, os resultados e as conclusões do documento. A ordem e a extensão destes itens dependem do tipo de resumo (informativo ou indicativo) e do tratamento que cada item recebe no documento original. O resumo deve ser precedido da referência do documento, com exceção do resumo inserido no próprio documento. (...) As palavras-chave devem figurar logo abaixo do resumo, antecidas da expressão Palavras-chave:, separadas entre si por ponto e finalizadas também por ponto.

**Palavras-chave:** latex. abntex. editoração de texto.





# Abstract

This is the english abstract.

**Keywords:** latex. abntex. text editoration.



# List of Figures



# List of Tables



# List of symbols

$\Gamma$	Letra grega Gama
$\Lambda$	Lambda
$\zeta$	Letra grega minúscula zeta
$\in$	Pertence





# Contents

<b>1</b>	<b>SAFT-<math>\gamma</math> MIE FORCE FIELD</b>	<b>25</b>
<b>1.1</b>	<b>SAFT-VR Mie</b>	<b>25</b>
1.1.1	Ideal Contribution	25
1.1.2	Monomer Contribution	25
<b>1.2</b>	<b>Main Section 2</b>	<b>25</b>
	 <b>APPENDIX</b>	 <b>27</b>
	<b>APPENDIX A – QUISQUE LIBERO JUSTO</b>	<b>29</b>
	<b>APPENDIX B – NULLAM ELEMENTUM URNA VEL IMPERDIET SODALES ELIT IPSUM PHARETRA LIGULA AC PRETIUM ANTE JUSTO A NULLA CURABITUR TRISTIQUE ARCU EU METUS</b>	<b>31</b>
	 <b>ANNEX</b>	 <b>33</b>
	<b>ANNEX A – MORBI ULTRICES RUTRUM LOREM.</b>	<b>35</b>
	<b>ANNEX B – CRAS NON URNA SED FEUGIAT CUM SOCIIS NA- TOQUE PENATIBUS ET MAGNIS DIS PARTURIENT MONTES NASCETUR RIDICULUS MUS</b>	<b>37</b>
	<b>ANNEX C – FUSCE FACILISIS LACINIA DUI</b>	<b>39</b>



# 1 SAFT- $\gamma$ Mie Force Field

## 1.1 SAFT-VR Mie

The SAFT-VR Mie equation of state (??) describes chain molecule formed from fused Mie segments using the Mie attractive and repulsive potential:

$$U_{mie}(r) = C\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{\lambda_r} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{\lambda_a} \right) \quad (1.1)$$

with

$$C = \frac{\lambda_r}{\lambda_r - \lambda_a} \left( \frac{\lambda_r}{\lambda_a} \right)^{\left( \frac{\lambda_a}{\lambda_r - \lambda_a} \right)} \quad (1.2)$$

$$a = a^{IDEAL} + a^{MONO} + a^{CHAIN} \quad (1.3)$$

### 1.1.1 Ideal Contribution

The ideal contribution is given by:

$$a^{IDEAL} = \ln(\rho\Lambda^3) - 1 \quad (1.4)$$

where  $\rho$  is the molar density of chain molecules,  $\lambda$  is de Broglie wavelength.

### 1.1.2 Monomer Contribution

For a fluid wit N chains formed of  $m_s$  segments, the monomer contribution is given by:

$$a^{MONO} = l m_s a^M \quad (1.5)$$

## 1.2 Main Section 2

Sed ullamcorper quam eu nisl interdum at interdum enim egestas. Aliquam placerat justo sed lectus lobortis ut porta nisl porttitor. Vestibulum mi dolor, lacinia molestie gravida at, tempus vitae ligula. Donec eget quam sapien, in viverra eros. Donec pellentesque justo a massa fringilla non vestibulum metus vestibulum. Vestibulum in orci quis felis tempor lacinia. Vivamus ornare ultrices facilisis. Ut hendrerit volutpat vulputate. Morbi condimentum venenatis augue, id porta ipsum vulputate in. Curabitur luctus tempus justo. Vestibulum risus lectus, adipiscing nec condimentum quis, condimentum nec nisl. Aliquam dictum sagittis velit sed iaculis. Morbi tristique augue sit amet nulla pulvinar id facilisis ligula mollis. Nam elit libero, tincidunt ut aliquam at, molestie in quam. Aenean rhoncus vehicula hendrerit.



# Bibliography

ARAUJO, L. C. *A classe abntex2: Modelo canônico de trabalhos acadêmicos brasileiros compatível com as normas ABNT NBR 14724:2011, ABNT NBR 6024:2012 e outras*. [S.l.], 2015. Disponível em: <<http://www.abntex.net.br/>>. Citado na página 25.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. *NBR 6028: Resumo - apresentação*. Rio de Janeiro, 2003. 2 p. Citado na página 13.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. *NBR 14724: Informação e documentação — trabalhos acadêmicos — apresentação*. Rio de Janeiro, 2011. 15 p. Substitui a Ref. ??). Citado na página 3.



# Appendix





## APPENDIX A – Quisque libero justo

Quisque facilisis auctor sapien. Pellentesque gravida hendrerit lectus. Mauris rutrum sodales sapien. Fusce hendrerit sem vel lorem. Integer pellentesque massa vel augue. Integer elit tortor, feugiat quis, sagittis et, ornare non, lacus. Vestibulum posuere pellentesque eros. Quisque venenatis ipsum dictum nulla. Aliquam quis quam non metus eleifend interdum. Nam eget sapien ac mauris malesuada adipiscing. Etiam eleifend neque sed quam. Nulla facilisi. Proin a ligula. Sed id dui eu nibh egestas tincidunt. Suspendisse arcu.



## APPENDIX B – Nullam elementum urna vel imperdiet sodales elit ipsum pharetra ligula ac pretium ante justo a nulla curabitur tristique arcu eu metus

Nunc velit. Nullam elit sapien, eleifend eu, commodo nec, semper sit amet, elit. Nulla lectus risus, condimentum ut, laoreet eget, viverra nec, odio. Proin lobortis. Curabitur dictum arcu vel wisi. Cras id nulla venenatis tortor congue ultrices. Pellentesque eget pede. Sed eleifend sagittis elit. Nam sed tellus sit amet lectus ullamcorper tristique. Mauris enim sem, tristique eu, accumsan at, scelerisque vulputate, neque. Quisque lacus. Donec et ipsum sit amet elit nonummy aliquet. Sed viverra nisl at sem. Nam diam. Mauris ut dolor. Curabitur ornare tortor cursus velit.

Morbi tincidunt posuere arcu. Cras venenatis est vitae dolor. Vivamus scelerisque semper mi. Donec ipsum arcu, consequat scelerisque, viverra id, dictum at, metus. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut pede sem, tempus ut, porttitor bibendum, molestie eu, elit. Suspendisse potenti. Sed id lectus sit amet purus faucibus vehicula. Praesent sed sem non dui pharetra interdum. Nam viverra ultrices magna.

Aenean laoreet aliquam orci. Nunc interdum elementum urna. Quisque erat. Nullam tempor neque. Maecenas velit nibh, scelerisque a, consequat ut, viverra in, enim. Duis magna. Donec odio neque, tristique et, tincidunt eu, rhoncus ac, nunc. Mauris malesuada malesuada elit. Etiam lacus mauris, pretium vel, blandit in, ultricies id, libero. Phasellus bibendum erat ut diam. In congue imperdiet lectus.



## Annex



## ANNEX A – Morbi ultrices rutrum lorem.

Sed mattis, erat sit amet gravida malesuada, elit augue egestas diam, tempus scelerisque nunc nisl vitae libero. Sed consequat feugiat massa. Nunc porta, eros in eleifend varius, erat leo rutrum dui, non convallis lectus orci ut nibh. Sed lorem massa, nonummy quis, egestas id, condimentum at, nisl. Maecenas at nibh. Aliquam et augue at nunc pellentesque ullamcorper. Duis nisl nibh, laoreet suscipit, convallis ut, rutrum id, enim. Phasellus odio. Nulla nulla elit, molestie non, scelerisque at, vestibulum eu, nulla. Ut odio nisl, facilisis id, mollis et, scelerisque nec, enim. Aenean sem leo, pellentesque sit amet, scelerisque sit amet, vehicula pellentesque, sapien.





# ANNEX B – Cras non urna sed feugiat cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes nascetur ridiculus mus

Sed consequat tellus et tortor. Ut tempor laoreet quam. Nullam id wisi a libero tristique semper. Nullam nisl massa, rutrum ut, egestas semper, mollis id, leo. Nulla ac massa eu risus blandit mattis. Mauris ut nunc. In hac habitasse platea dictumst. Aliquam eget tortor. Quisque dapibus pede in erat. Nunc enim. In dui nulla, commodo at, consectetur nec, malesuada nec, elit. Aliquam ornare tellus eu urna. Sed nec metus. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas.



## ANNEX C – Fusce facilisis lacinia dui

Phasellus id magna. Duis malesuada interdum arcu. Integer metus. Morbi pulvinar pellentesque mi. Suspendisse sed est eu magna molestie egestas. Quisque mi lorem, pulvinar eget, egestas quis, luctus at, ante. Proin auctor vehicula purus. Fusce ac nisl aliquam ante hendrerit pellentesque. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos hymenaeos. Morbi wisi. Etiam arcu mauris, facilisis sed, eleifend non, nonummy ut, pede. Cras ut lacus tempor metus mollis placerat. Vivamus eu tortor vel metus interdum malesuada.