

**Proposta de Tema para Dissertação de
Mestrado em Química
(2019-2020)**

Título	Estudo da Solubilidade de Compostos Apolares e Polares em Água Subcrítica
Resumo (incluindo objetivos a atingir)	<p>A água subcrítica é definida como água líquida a temperaturas acima da temperatura de ebulição e pressões acima da sua pressão de vapor. Nestas condições a água permanece líquida e pode ser utilizada como solvente na extracção de compostos orgânicos apolares e polares com baixa solubilidade à temperatura ambiente. Este processo constitui assim uma alternativa “verde” a outros processos de extracção envolvendo o uso de solventes orgânicos, normalmente tóxicos. Embora este fenómeno seja associado à diminuição da constante dielétrica da água com a temperatura, a relação entre a constante dielétrica da água, a hidratação e a solubilidade destes compostos, é ainda mal compreendida. Neste projecto propomos o estudo da hidratação e da solubilidade de compostos polares e apolares em água subcrítica através de métodos de química computacional, em particular dinâmica molecular (DM). O método de DM permite estudar a hidratação e a solubilidade e ao mesmo tempo obter informação estrutural e dinâmica a um nível molecular. Os objectivos deste estudo incluem: (a) estudo da termodinâmica de hidratação e a solubilidade de compostos polares (e.g. ácido gálico) e apolares (e.g., naftaleno) modelo; (b) estudo da relação entre a constante dielétrica da água em condições subcríticas e a solubilidade; (c) definição das propriedades de interesse da água e soluto no desenvolvimento de um modelo para a previsão da solubilidade.</p>
Local de trabalho	CQB e BioISI da FCUL, Edifício C8
Orientador(s)	Nuno Galamba e Benedito Cabral
Informações	Contactar: njgalamba@fc.ul.pt (Sala 8.5.53) para mais informações.