

Título: BIODIESEL: ESTUDO DE PROPRIEDADES FÍSICAS E FÍSICO-QUÍMICAS POR SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Resumo: O combustível biodiesel, substituto do diesel do petróleo, vem da reação química de transesterificação de um glicerídeo (triglicerídeo). Levando em considerações químicas (toxicidade, número de cetano e lubricidade), ambientais (renovável) e econômicas (produção consolidada do nosso país) o álcool mais indicado e usado na reação é etanol. Os ésteres mais utilizados no Brasil são aqueles encontrados nos óleos vegetais, apesar de encontrá-los também em fontes animais. Nesta pesquisa analisou-se as propriedades apresentadas pelos ésteres: etil-hexadecanoato (C16:0), etil-octadecanoato (C18:0), 9-octadeca-(9Z)-enoato de etila (C18:1), 9,12-octadecadi-(9Z,12Z)-enoato de etila (C18:2) e 9,12,15-octadecatri-(9Z,12Z,15Z)-enoato de etila (C18:3), presentes na composição dos biodieseis etílicos derivado dos óleos de soja e de linhaça. Obteve-se as estruturas dos compostos utilizando o método DFT (Density Functional Theory) na base B3LYP/6-31G. Após, criou-se sistemas cúbicos de 94 Angstroms de aresta, usando o programa gráfico packmol, contendo as estruturas obtidas. As condições para a dinâmica molecular: campo de forças gaff do AMBER num equilíbrio termodinâmico em 323K, NPT e condições periódicas de contorno nos programas Ambertools14 e Amber16. Verificou-se as propriedades físicas (densidade e viscosidades) e físico-químicas (equilíbrio energético e termodinâmico) que diferenciam os compostos: viscosidade, volume em equilíbrio, densidade e as energias do sistema que indicam qual deles apresenta maior rendimento e menos danos ao motor.

Palavras Chaves: ésteres, biodiesel, modelagem molecular, propriedades físicas/ física-químicas

Title:BIODIESEL: STUDY OF PHYSICAL AND PHYSICAL-CHEMICAL PROPERTIES BY COMPUTATIONAL SIMULATIONS

Absrtact: Biodiesel fuel, a substitute for diesel, comes from the chemical reaction of transesterification of a glyceride (triglyceride). Taking into consideration chemical, environmental (renewable) and economic (consolidated production of your country) or alcohol more indicated and used in the reaction is ethanol. The esters most used in Brazil are found in our vegetable oils, although they are also found in animal sources. ethylhexadecanoate (C16:0), ethyl octadecanoate (C18:0), ethyl (9Z)-9-octadecadienoate (C18:1), ethyl (9Z,12Z)-9,12-octadecadienoate (C18:2) and ethyl (9Z,12Z,15Z)-9,12,15-octadecadienoate (C18:3), presents in the composition of the biodiesel and derivatives derived from the soybean and the line. Obtain as process structures using the DFT (Density Functional Theory) method on base B3LYP / 6-31G. Afterwards, cubic systems of 94 Angstroms of edge were created, using the graphic program packmol, containing as structures obtained. As conditions for a molecular dynamics: field of AMBER forces in a thermodynamic equilibrium in 323K, NPT and conditions of execution of programs Ambertools14 and Amber12. Physical properties (density and viscosity) and physicochemical properties (ICP, energy and thermodynamic equilibrium) were determined to differentiate the compounds: viscosity, equilibrium volume, density and energies.

Keywords: esters, biodiesel, molecular modeling, physical / physical-chemical

Área do conhecimento, de acordo com a tabela do CNPq anexa: 1.06.01.03-1 (Físico-química Orgânica)/1.06.03.07-7 (Química Teórica)

Projeto: Biocombustíveis (biodiesel): estudos teóricos das propriedades físicas e físico-químicas