

ESTUDO TEÓRICO DAS REAÇÕES DE PRODUÇÃO DE BIODIESEL ATRAVÉS DE MÉTODOS DE QUÍMICA QUÂNTICA

Jeconias Rocha Guimarães

Járlesson Gama Amazonas

Stephani Sufredini

O interesse no estudo de combustíveis é o foco de diversos setores de pesquisa, que vai desde o científico até o tecnológico. Neste trabalho apresentamos um estudo da energia de ligação liberada nas reações de combustão de combustível do tipo diesel. Nossa abordagem se dá via os métodos de física quântica, mais especificamente utilizamos a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). A DFT constitui a ferramenta mais utilizada atualmente em pesquisa de materiais, tanto pela qualidade das propriedades obtidas quanto pelo custo computacional bastante reduzido. Investigamos diferentes estruturas moleculares do diesel, variando sistematicamente o tamanho e o tipo de ligação de suas ramificações. Com a DFT calculamos a energia do estado fundamental dos reagentes e dos produtos, e a energia de ligação é obtida com a diferença de energia entre estes. O caminho de reação não foi avaliado. Os resultados obtidos fornecem o comportamento da energia liberada, indicando qual é a tendência para o aproveitamento máximo dessas estruturas, no uso de sua energia liberada.

Palavras-chave: Biodiesel; Teoria do Funcional da Densidade; Estruturas moleculares; Energia.
