

# Estudo teórico da influência da oxigenação da cadeia carbônica na energia de dissociação carbono-carbono – uma análise da combustão do biodiesel.

Lisandra P. dos Santos (IC), Leonardo Baptista\* (PQ),

\*leobap@gmail.com

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Tecnologia, Departamento de Química e Ambiental.

Palavras Chave: dissociação, métodos multiconfiguracionais, biodiesel, energia de ligação.

## Abstract

Theoretical study of the influence of number of oxygens in the carbonic chain and its relationship with carbon-carbon dissociation – in the analysis of biodiesel combustion

The dissociation of C-C bond was studied using multiconfigurational methods and the combustion process discussed.

## Introdução

A queima de combustíveis fósseis é o meio mais utilizado para obtenção de energia. A utilização destes combustíveis, como diesel e biodiesel, gera um grande impacto ambiental devido à emissão de gases poluentes que afetam o ozônio troposférico e contribuem para o agravamento do efeito estufa.<sup>1,2</sup> O presente estudo é focado na dissociação do etano, etanol e etanoato de metila e visa determinar como a oxigenação da cadeia carbônica influencia na energia de dissociação da ligação C-C e consequentemente no processo combustão. A longo prazo, o objetivo do trabalho é calcular os coeficientes de velocidade utilizando a teoria do estado de transição convencional e variacional para inclusão e modificação de modelos de combustão. O estudo fez uso dos métodos computacionais CASSCF(6,6) e NEVPT2(6,6) com a base de cálculo 6-311G(d,p). O cálculo das propriedades termodinâmicas foi feito na faixa de 298 a 2000 K. O software utilizado para fazer os cálculos foi o ORCA 2.9.

## Resultados e Discussão

A curva de energia do processo de dissociação do etano e do etanol está mostrada na Figura 1. Pode-se perceber que a energia de dissociação do etano é 84,5 kcal.mol<sup>-1</sup> e a energia de dissociação do etanol é 68,9 kcal.mol<sup>-1</sup>.

Na Tabela 1 estão os valores de energia de dissociação, de energia livre de Gibbs em função da metodologia. Verifica-se que a inclusão do grupo funcional facilita a dissociação da ligação carbono-carbono. A equação da constante de equilíbrio para dissociação do etano usando o método CASSCF(6,6)/6-311G(d,p) é  $1,41 \times 10^{-26} e^{-834,30/T}$  e usando o método NEVPT2(6,6)/6-311G(d,p) é  $3,92 \times 10^{-25} e^{-5586,72/T}$  na faixa de 298 a 714 K.

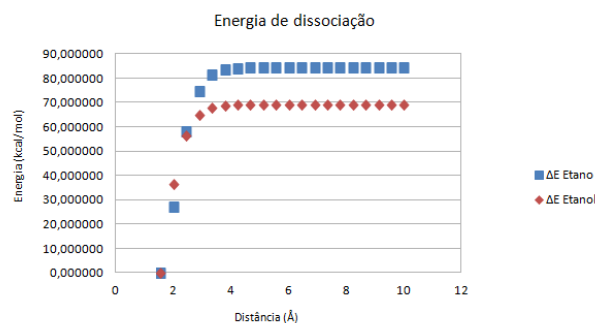


Figura 1. Gráfico da energia de dissociação em relação a distância usando o método CASSCF.

Tabela 1. Energia de dissociação e energia livre de Gibbs a 298 K. Resultados obtidos com a base 6-311G(d,p).

	CASSCF		NEVPT2	
	Etano	Etanol	Etano	Etanol
$\Delta E$ (kcal.mol <sup>-1</sup> )	84,5	68,9	94,7	75,2
$\Delta G$ (kcal.mol <sup>-1</sup> )	69,7	63	73,3	63,5

## Conclusões

Por meio da análise dos valores obtidos foi possível determinar a diferença de energia de dissociação entre a molécula de etano e a molécula de etanol. É perceptível que a reação de dissociação do etanol é favorecida em relação ao etano. No presente momento, estuda-se a dissociação da ligação C-C da molécula de etanoato de metila, a fim de avaliar a influência do grupo funcional na energia de dissociação. Este estudo permitirá que se faça inferências relacionadas à combustão do biodiesel considerando o etanoato de metila como composto modelo.

## Agradecimentos

CAPES, FAPERJ, CNPq

<sup>1</sup> Correa, S. M.; Arbilla G. *Atmos. Environ.* **2006**, *40*, 6821-6826.

<sup>2</sup> Kohse-Höinghaus, Katharina *Angewandte Chemie International Edition* **2010**, *49*, 3572-3597.