

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

MODELO MOLECULAR QSPR PARA A ESTIMATIVA DA ENTALPIA DE COMBUSTÃO DE DICICLOHEXILALCANOS E DIFENILALCANOS

TELITO, William de Freitas; YANO, Marcos Hideyuki Maia; FINATTO, Oberdan; WOLF, Matheus Augusto; DA ROSA, João Paulo Corrêa
MORÓN VILLARREYES, Joaquín Ariel - Orientador
william_telito@hotmail.com

Evento: Congresso de Iniciação Científica
Área do conhecimento: Tecnologia Química

Palavras-chave: Modelagem Molecular, Diciclohexilalcanos, Difenilalcanos

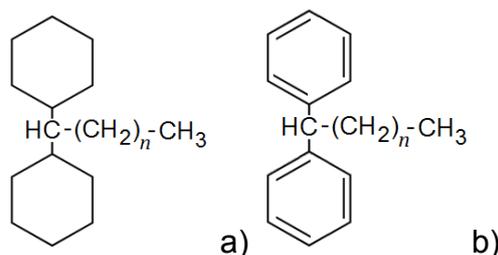
1 INTRODUÇÃO

A Modelagem Molecular QSPR (*Quantitative Structure-Property Relationships*) consiste na aplicação de diversas técnicas visando o desenvolvimento de equações para a estimativa de propriedades das substâncias. Neste trabalho são apresentados equações QSPR para a predição da entalpia de combustão (ΔH , Kcal/mol) dos difenilalcanos e diciclohexilalcanos em função do número de carbonos (n) em equações lineares do tipo $\Delta H = a \cdot n + b$. As equações preditivas obtidas foram validadas por comparação com valores experimentais da literatura técnica.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Os diciclohexilalcanos e difenilalcanos são hidrocarbonetos componentes de combustíveis de aviação militar (NA-F-48, NA-F-58, JP-4, JP-8) e de aviação civil (Jet A, Jet B, TS-1).

Figura 1 – Estrutura molecular dos diciclohexilalcanos (a) e difenilalcanos (b)



Fonte: O(s) autor (es)

Para um número equivalente de átomos de carbono, os hidrocarbonetos apresentam calor de combustão na seqüência: difenilalcanos > diciclohexilalcanos > lineares. A aviação de alta velocidade apresenta restrições de volume especialmente no transporte e consumo de combustível devido a detalhes no projeto de asas e fuselagens. Neste sentido a National Advisory Committee for Aeronautics (NACA) recomenda pesquisas sobre combustíveis com alto poder de combustão por unidade de volume.

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

Os métodos utilizados para a determinação dos modelos moleculares para a estimativa de entalpia foram os métodos de contribuição dos grupos funcionais por energias de ligação e o método de Dulong que se baseia na composição elementar dos compostos atômicos das moléculas dos biocombustíveis.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

Método de Dulong

$$\Delta H = 1700,0 + 145,9 n \text{ (kcal/mol)}$$

$$\Delta H = 1501,9 + 165,0 n \text{ (kcal/mol)}$$

Tabela 1 - Validação dos modelos QSPR obtidos de entalpia pelo método de Dulong

Diciclohexilalcanos				Difenilalcanos			
<i>n</i>	ΔH (kcal/mol) Experimental	ΔH (kcal/mol)) Calculado	Erro (%)	<i>n</i>	ΔH (kcal/mol) Experimental	ΔH (kcal/mol)) Calculado	Erro (%)
0	1700,0	1906,8	12,2	0	1443,5	1501,9	4,0
1	1845,9	2037,5	10,4	1	1593,5	1666,9	4,6
2	1997,5	2168,2	8,5	2	1733,8	1831,9	3,3
3	2138,8	2298,8	7,5	3	1886,5	1991,9	4,9
4	2285,8	2429,5	6,3	4	2032,9	2161,9	6,3

Ainda não foram obtidos os resultados para o método de ligações de contribuição dos grupos funcionais devido às suas especificações.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O método de Dulong apresentou um teor consideravelmente baixo de erro comparado com os dados experimentalmente tabelados pela literatura pesquisada.

6 REFERÊNCIAS

Wise, P H; Serijan, K T; Goodman, I; A Correlation of physical properties with molecular structure for some dicyclic hydrocarbons having high thermal-energy release per unit volume. National Advisory Committee for Aeronautics. Lewis Flight Propulsion Lab.; Cleveland, OH, United States (NACA-TR-1003); 1951 – NASA Technical report Server NTRS.