ENG MAT CON
II CONGRESSO ONLINE DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

CARACTERIZAÇÃO ELETRÔNICA DE ADITIVO DO BIODIESEL

Adriano Santos da Rocha[1]

RESUMO

Atualmente, a matriz energética mundial ainda depende quase 80% de fontes de combustíveis fósseis. E embora muitas alternativas tenham surgido, algumas delas esbarram em entraves inerentes à sua natureza, como é o caso do Biodiesel. Entre outras dificuldades encontradas no emprego desse recurso energético, citamos nesse trabalho a oxidação que o combustível sofre. Dificuldades como essas são comumente resolvidas com a utilização de aditivos, sendo fundamental a investigação de propriedades destes aditivos para que se possa melhorar seus desempenho e custo. O objetivo do presente trabalho é investigar as propriedades eletrônicas do aditivo antioxidante Ácido Gálico ($C_7H_6O_5$) que se destaca na literatura por ser uma alternativa natural e apresentar bons resultados quando comparado às propostas sintéticas. A investigação das propriedades estudadas se baseou no uso da Teoria do Funcional da Densidade aplicadas por meio de softwares específicos. Foi realizada o desenho da molécula no software Avogadro e uma otimização preliminar da geometria. Na etapa seguinte, realizou-se uma nova otimização e mais sofisticada recorrendo às técnicas de Teoria do Funcional da Densidade (DFT) empregando o funcional B3LYP. Na análise dos resultados, utilizou-se o programa Chemcraft 1.6, onde encontrou-se que o aditivo antioxidante de origem natural apresenta uma densidade de estados superior a algumas alternativas sintéticas (como o Pirogalol) já relatadas em outros trabalho. O Ácido Gálico possui 192 orbitais (entre ocupados e desocupados) na composição do espectro energético. Outro dado importante nessas abordagens é o cálculo do Gap de Energia, diferença de energia entres os Orbitais HOMO (mais alto orbital molecular ocupado) e LUMO (mais baixo orbital molecular desocupado), para esse aditivo o valor encontrado foi de $\Delta E = 4{,}93$ eV. Esses resultados são úteis, entre outros, para a discussões sobre a reatividade química do composto. E embora as alternativas sintéticas já tenham se mostrado mais eficientes do que as naturais, compreender essas propriedades eletrônicas pode levar à novas abordagens sobre o uso dessas substâncias.

Palavras-chave: **Ácido Gálico, DFT, Antioxidante**

[1] Instituto Federal do Pará, Campus Castanhal, Castanhal-Pará. Email: adriano.rocha@ifpa.edu.br