

ESTUDO COMPUTACIONAL DAS PROPRIEDADES MOLECULARES DOS ISÔMEROS DO PROPANOL E BUTANO

Olivar A. C. Junior¹, Raquel A. de A. Costa², Ricardo C. Soares³, Rafaela G. Faustino⁴, Guilherme R. Araújo⁵, Raquel M. T. Fernandes⁶, Alamgir Khan⁷

¹ Universidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

² Universidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

³ Universidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, Viana, Maranhão, Brasil, 65.215-000.

⁴ Universidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, Itapecuru-Mirim, Maranhão, Brasil, 65485-000.

⁵ Universidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, Itapecuru-Mirim, Maranhão, Brasil, 65485-000.

⁶ Universidade Estadual do Maranhão, Núcleo de Estudos em Química Teórica e Aplicada - NEQTA, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

⁷ Universidade Estadual do Maranhão, Núcleo de Estudos em Química Teórica e Aplicada - NEQTA, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

¹**e-mail:** cavalcanteolivar@gmail.com

²**e-mail:** raqabigailcosta@gmail.com

³**e-mail:** ricardo.20220053199@aluno.uema.br

⁴**e-mail:** rafaela.faustino27@gmail.com

⁵**e-mail:** guilherme.araujo1201@gmail.com

⁶**e-mail:** raquelfernandes@professor.uema.br

⁷**e-mail:** alamgir@cecen.uema.br

Desde o século XX até o presente, a sociedade tem dependido constantemente dos combustíveis fósseis, especialmente os derivados do petróleo, o que tem gerado preocupações ambientais. O crescimento constante da demanda energética destaca a urgência em reduzir o aquecimento global e impulsiona a pesquisa por combustíveis alternativos e renováveis. Estudam-se as propriedades físico-químicas para compreender o processo de reação de combustão e aprimorar a qualidade dos combustíveis. Assim, os pesquisadores buscaram descobrir a viabilidade de combustíveis alternativos benignos (como etanol, biodiesel etc.) ou como aditivos para combustíveis tradicionais. Nesse contexto, ressalta-se a possibilidade de butanol e propanol serem utilizados como combustíveis, com diversas aplicações. Este estudo tem como objetivo examinar as relações e impactos das estruturas isoméricas das moléculas de propanol e butanol, além de suas propriedades termodinâmicas, empregando os métodos teóricos de DFT (B3LYP e PBE0) e o método semiempírico PM6. O programa Gaussian9 foi utilizado para calcular as propriedades moleculares das estruturas de interesse. Observa-se que os métodos de DFT apresentaram uma boa concordância na estimativa da energia livre de Gibbs e outros parâmetros termoquímicos para os isômeros do propanol, n-butanol e sec-butanol em relação ao método PM6, além de se alinharem aos valores de referência. O estudo da excitação eletrônica, na perspectiva do espectro de absorção e dos orbitais de fronteira (HOMO-LUMO), mostrou que a diferença entre os orbitais HOMO e LUMO está relacionada à reatividade e à possível formação de radicais nas câmaras de reação de combustão. Por fim, a análise de componentes principais foi utilizada para diagnosticar as variações e diferenças mínimas nas propriedades termodinâmicas entre as estruturas das moléculas energéticas de interesse. Este trabalho concluiu que os estudos teóricos envolvendo os isômeros de butanol e propanol foram alcançados. De forma direta, isso pode ser um trabalho de grande relevância para a construção de uma literatura mais aprofundada sobre esse tema na química computacional.

Agradecimentos: Agradecemos ao Laboratório de Físico-Química (LFQ) da Universidade Estadual do Maranhão e ao grupo de pesquisa NEQTA pelo apoio técnico e científico para a realização deste trabalho.

Houghton, J.T.; Ding, Y.; Griggs, D.J.; Noguier, M.; van der Linden, P.J.; Dai, X.; Maskell, K.; Johnson, C.A. Climate Change 2001: The Scientific Basis. Cambridge University Press, 2001.

Zhao, L.; Wang, Q. A comprehensive study on thermodynamic properties of hydrocarbons. Journal of Chemical Physics, 2020

ZETTILLI, Nouredine. Quantum mechanics: concepts and applications. 2003

