

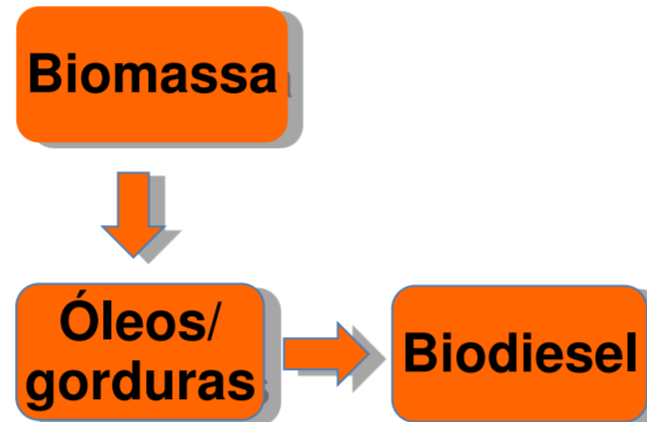
Introdução

Combustíveis fósseis: não-renováveis
↓
Procura por fontes energéticas renováveis

BIODIESEL: renovável e biodegradável

ASTM D-6751: Mistura de ésteres alquílicos de cadeia longa derivados de ácidos graxos de óleos vegetais ou gordura animal – B100;

Obtido a partir da reação de transesterificação de ácidos graxos.

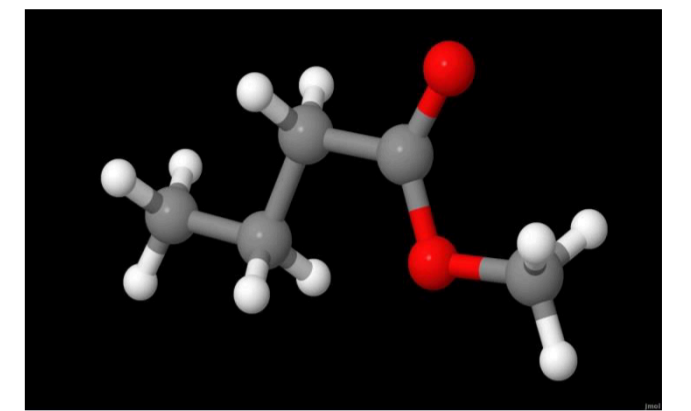


Objetivo

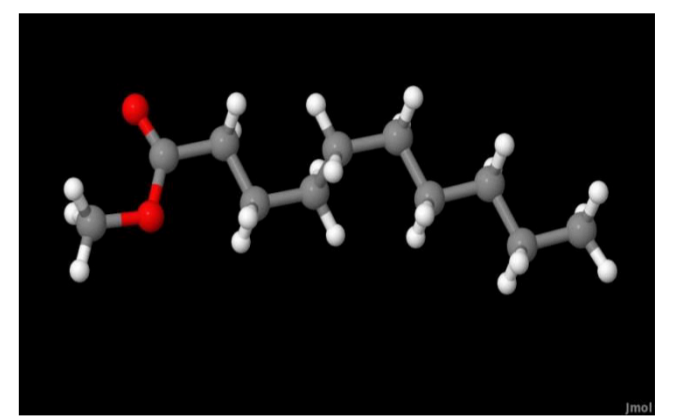
Estudar os mecanismos das reações de oxidação de ésteres presentes no biodiesel via simulações de dinâmica molecular:

- Analisar compostos intermediários e produtos finais;

- Obtenção de informações não acessíveis em experimentos laboratoriais.



Butanoato de metila



Decanoato de metila

Metodologia

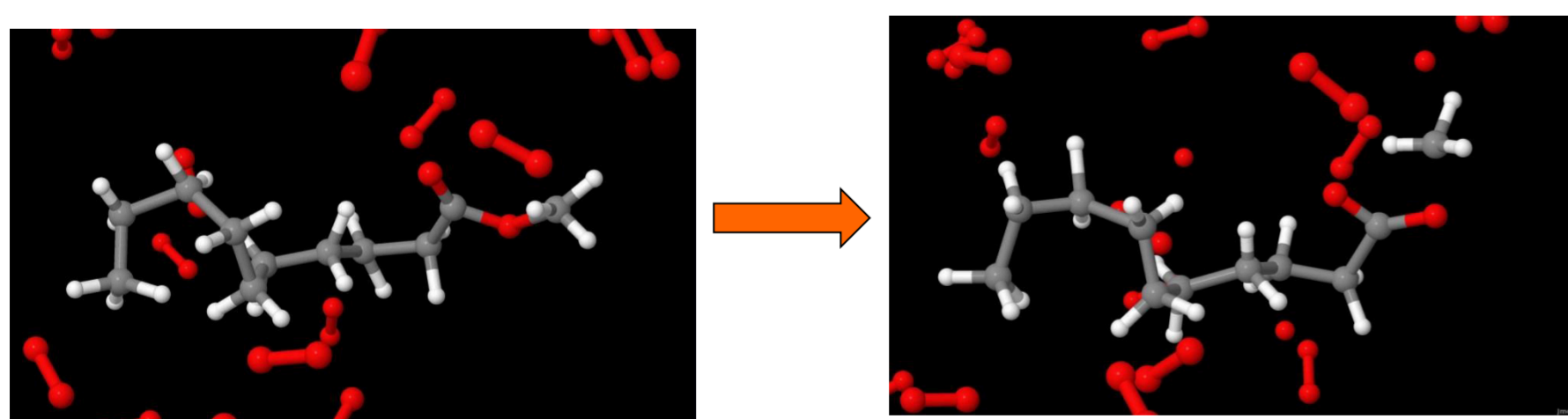
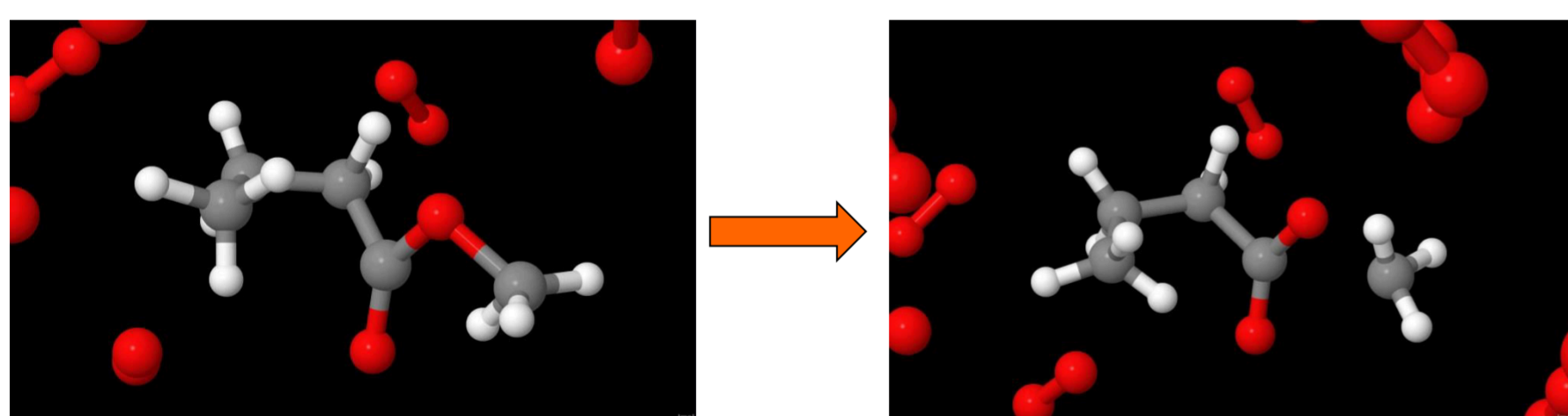
- Utilização de simulações de dinâmica molecular;
- Potencial interatômico reativo ReaxFF;
- Utilização do software de código aberto – LAMMPS;
- Obtenção de geometrias otimizadas e testes de estabilidade;

- Simulações dinâmicas da oxidação do butanoato de metila e do decanoato de metila;
- Ensemble NVT;
- Temperatura: 300 - 1900K; Δt: 0.1 fs; tempo total: 20ns - 30 ns.

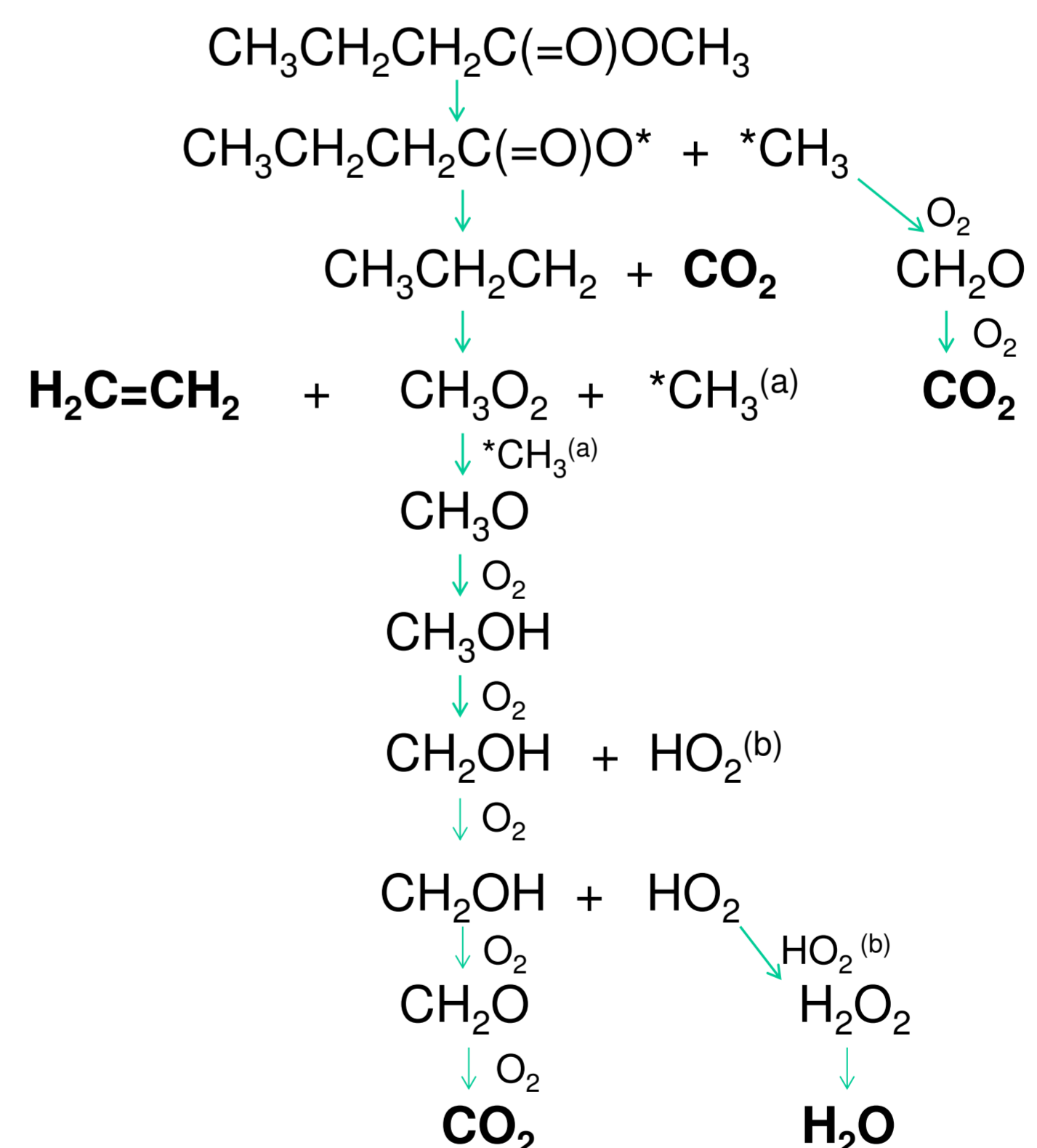
Resultados

Foram realizadas simulações da oxidação do butanoato de metila e do decanoato de metila, através da inserção da molécula previamente relaxada num ambiente com excesso de oxigênio e com densidade constante, a fim de determinar os mecanismos de reação e intermediários presentes.

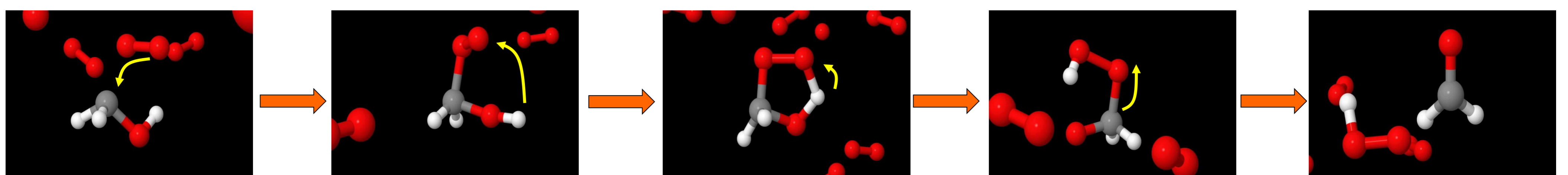
Foi observada a mesma reação de iniciação molecular para ambas as moléculas – **abstração do grupo metila terminal**.



O esquema abaixo mostra o mecanismo de reação observado na simulação da oxidação do butanoato de metila:



Um exemplo de mecanismo observado em radicais intermediários obtidos a partir da oxidação do butanoato de metila é dado abaixo:



Considerações Finais

O método de simulações reativas de dinâmica molecular se apresenta como uma ferramenta promissora, rápida e de baixo custo na investigação de mecanismos da combustão do biodiesel, complementando os estudos experimentais. Dessa forma, testes com diferentes ésteres durante maiores tempos de simulação e diferentes condições iniciais podem resultar na observação de diferentes caminhos de reação, intermediários e produtos finais. Entretanto, é indispensável a realização de testes iniciais para validação dos parâmetros a serem utilizados, ou ainda a reparametrização adequada do potencial interatômico reativo ReaxFF.