

CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA  
(ORGANIZADOR)

---

*Collection:*

# APPLIED CHEMICAL ENGINEERING

---

Atena  
Editora  
Ano 2022

CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA  
(ORGANIZADOR)

---

*Collection:*

# APPLIED CHEMICAL ENGINEERING

---

Atena  
Editora  
Ano 2022

**Editora chefe**

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Editora executiva**

Natalia Oliveira

**Assistente editorial**

Flávia Roberta Barão

**Bibliotecária**

Janaina Ramos

**Projeto gráfico**

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

**Imagens da capa**

iStock

**Edição de arte**

Luiza Alves Batista

2022 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2022 Os autores

Copyright da edição © 2022 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição-Não-Comercial-Não-Derivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

**Conselho Editorial**

**Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Profª Drª Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná



Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás  
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho  
Prof. Dr. Juliano Bitencourt Campos – Universidade do Extremo Sul Catarinense  
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá  
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista



**Diagramação:** Daphynny Pamplona  
**Correção:** Yaidy Paola Martinez  
**Indexação:** Amanda Kelly da Costa Veiga  
**Revisão:** Os autores  
**Organizador:** Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**

C697 Collection: applied chemical engineering / Organizador  
Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. – Ponta Grossa -  
PR: Atena, 2022.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5983-856-1

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.561223101>

1. Chemical engineering. I. Paniagua, Cleiseano  
Emanuel da Silva (Organizador). II. Título.

CDD 660

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

**Atena Editora**

Ponta Grossa – Paraná – Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

contato@atenaeditora.com.br



## DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.



## DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access*, *desta forma* não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.



## APRESENTAÇÃO

The e-book: “Collection: Applied chemical engineering” consists of ten book chapters that were organized and divided into four thematic units, namely: *i*) natural products: extraction and purification of active principles; *ii*) development of new materials: study, comparison, different properties and applications; *iii*) use of analytical instruments for food quality control and; *iv*) development and application of bioadsorbents and advanced treatment technologies to remove contaminants from aquatic matrices.

The first theme presents two studies that evaluated the extraction of essential oil from the Baru species plant (*Dipteryxalata Vog.*) with nematicidal activity in combating *Meloidogyne javanica*. The second work evaluated triterpene purification processes from plant bioactives of Amazonian species. The second theme consists of three book chapters aimed at the study and comparison of natural, glass and mixed fibers for future applications; preparation of graphene oxides for production as composites in the form Cu/TiO<sub>2</sub>/rGO and estimates of thermodynamic properties of esters used in the production of biodiesel using a Gaussian software associated with the Constantinou and Gani group method.

The third thematic unit consists of two works, one using the UV-Vis spectrophotometry technique to quantify the metallic ions of cadmium, copper, chromium, mercury, nickel and lead in cheeses produced by hand on rural properties; the second work evaluated the Kombucha probiotic and its importance in fermented foods. Finally, the fourth and last theme consists of three works with different approaches. The first deals with the possible environmental impacts that can be caused to water and soil as a result of exposure to Fracking gas present in Mexico. The second presents the study of the adsorption capacity from the biomass generated by the Andiroba species (*Carapaguianensis Aubl.*) in the removal of copper ions present in wastewater from industrial activities. The third chapter presents the study of the influence of the complexity of different aqueous matrices on the degradation of a mixture of drugs using the solar photolysis processes, TiO<sub>2</sub>/Solar and its combination with the addition of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. This process constitutes one of the advanced treatment technologies to be made feasible on a large scale as a complementary step to conventional water and sewage treatment processes.

In this perspective, Atena Editora has been working with the aim of stimulating and encouraging both Brazilian researchers and those from other countries to publish their work with quality assurance and excellence in the form of books, book chapters and articles that are available in the Editora’s website and other digital platforms with free access.

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

## SUMÁRIO

### **CAPÍTULO 1..... 1**

ATIVIDADE NEMATICIDA DO ÓLEO ESSENCIAL DE BARU (*Dipteryx alata* Vog.) SOBRE *Meloidogyne javanica*

Gabriela Araújo Martins  
Rodrigo Vieira da Silva  
Ana Paula Gonçalves Ferreira  
João Pedro Elias Gondim  
Lara Nascimento Guimarães  
Nathália Nascimento Guimarães  
Edcarlos Silva Alves  
Rafaella Alves Rodrigues

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231011>

### **CAPÍTULO 2..... 12**

PURIFICAÇÃO DE TRITERPENOS BIOATIVOS A PARTIR DE ESPÉCIES AMAZÔNICAS: IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS E PADRONIZAÇÃO DO PROCESSO

Lucas Orlean Nunes do Nascimento  
Yanne Katiussy Pereira Gurgel Aum  
Erick Max Mourão Monteiro de Aguiar

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231012>

### **CAPÍTULO 3..... 19**

ESTUDO E COMPARAÇÃO ENTRE COMPÓSITOS REFORÇADOS COM FIBRAS NATURAIS, FIBRAS DE VIDRO E HÍBRIDOS

Samuel de Castro Silva  
Gabriel Melo Nascimento  
Roberto Tetsuo Fujiyama

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231013>

### **CAPÍTULO 4..... 25**

PREPARAÇÃO DE ÓXIDO DE GRAFITE PARA PRODUÇÃO DE COMPÓSITOS Cu/TiO<sub>2</sub>/rGO

Gimerson Weigert Subtil  
Leonardo Zavilenski Fogaça  
Daiane Marques de Oliveira  
Jean César Marinozi Vicentini  
Mara Heloisa Neves Olsen Scaliante

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231014>

### **CAPÍTULO 5..... 37**

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE FORMAÇÃO ESTIMADAS PARA ÉSTERES DE BIODIESEL USANDO SOFTWARE DE QUÍMICA QUÂNTICA GAUSSIAN E O MÉTODO DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO DE CONSTANTINOU E GANI

Erich Potrich  
Larissa Souza Amaral

Fernando Augusto Pedersen Voll  
Vladimir Ferreira Cabral  
Lúcio Cardozo Filho

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231015>

**CAPÍTULO 6..... 51**

DETERMINAÇÃO QUANTITATIVA DE CÁDMIO, CHUMBO, COBRE, CROMO, MERCÚRIO E NÍQUEL EM QUEIJOS ARTESANAIS RURAIS E INDUSTRIAIS EMPREGANDO ESPECTROFOTOMETRIA UV-VIS

Alexandre Mendes Muchon  
Alex Magalhães de Almeida

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231016>

**CAPÍTULO 7..... 63**

PRODUÇÃO DE KOMBUCHA: APRESENTAÇÃO DO PROCESSO, POSSÍVEIS OBSTÁCULOS E PONTOS CRÍTICOS DE CONTROLE

Thainá Inácia da Silva  
Louiza Stefhany Santos Tibes  
Carla Adriana Pizarro Schmidt

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231017>

**CAPÍTULO 8..... 78**

MEXICO'S WATER AND SOIL, THREATENED BY FRACKING GAS?

Victor Hugo Ferman-Avila  
Maria del Carmen Avitia-Talamantes  
Hugo Esteban Ferman-Corral

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231018>

**CAPÍTULO 9..... 87**

PRODUÇÃO DE BIOADSORVENTE DE RESÍDUOS DE CASCAS DE SEMENTES DE ANDIROBA (*Carapa guianensis Aubl.*) E POTENCIAL USO NA ADSORÇÃO DE ÍONS COBRE EM ÁGUAS RESIDUÁRIAS INDUSTRIAIS

Carlos Castro Vieira Quaresma  
Gabriela Cristina Brito Nery  
Agnes Naiá Gomes de Sá Fernandes  
Sérgio Duvoisin Júnior  
Nélio Teixeira Machado  
Marla Karolyne dos Santos Horta  
Douglas Alberto Rocha de Castro

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5612231019>

**CAPÍTULO 10..... 100**

INFLUENCE OF MATRIX COMPOSITION ON THE DEGRADATION OF A PHARMACEUTICALS MIXTURE THROUGH HETEROGENEOUS PHOTOLYSIS AND PHOTOCATALYSIS UNDER SOLAR RADIATION PROCESSES

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56122310110>

<b>SOBRE O ORGANIZADOR.....</b>	<b>113</b>
<b>ÍNDICE REMISSIVO.....</b>	<b>114</b>

## PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE FORMAÇÃO ESTIMADAS PARA ÉSTERES DE BIODIESEL USANDO SOFTWARE DE QUÍMICA QUÂNTICA GAUSSIAN E O MÉTODO DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO DE CONSTANTINO E GANI

Data de aceite: 01/01/2022

**Erich Potrich**

Universidade do Estado do Amapá (UEAP)  
Macapá-AP

**Larissa Souza Amaral**

Universidade do Estado de Minas Gerais  
(UEMG)  
Frutal - MG

**Fernando Augusto Pedersen Voll**

Universidade Federal do Paraná (UFPR)  
Curitiba – PR

**Vladimir Ferreira Cabral**

Universidade Estadual de Maringá (UEM)  
Maringá - PR

**Lúcio Cardozo Filho**

Universidade Estadual de Maringá (UEM)  
Maringá – PR

**RESUMO:** Pesquisas mais recentes tem se focado no estudo de melhorar a produção de biodiesel. No entanto, é necessário um conhecimento das propriedades termodinâmicas dos componentes de reação. Neste trabalho, a entalpia da formação e a energia livre de Gibbs de formação para ésteres de metil a pentil foram calculadas utilizando-se o software de química quântica Gaussian (modelo B3LYP/6-31G(d,p)) e o método de contribuição de grupo de Constantinou e Gani (MCG). Os parâmetros de correção, que são uma função do tamanho da cadeia molecular de 26 moléculas, foram

necessários para extrapolar os resultados para moléculas maiores de interesse. O desvio médio entre os valores experimentais e calculados por Gaussian foi de 0,723% para a entalpia e 1,087% para Gibbs, enquanto para MCG, foi de 1,324% e 2,540%, respectivamente. Por meio do ajuste, foram estimadas as propriedades de 23 ésteres amplamente utilizadas na produção de biodiesel, que serão utilizadas para calcular dados de equilíbrio e reacionais de novos catalisadores.

**PALAVRAS-CHAVE:** Biodiesel; Entalpia de formação; Energia livre de Gibbs de formação; Química quântica; Métodos de contribuição de grupo.

**ABSTRACT:** More recent research has focused on the study of improving biodiesel production. However, a knowledge of the thermodynamic properties of the reaction components is necessary. In this work the enthalpy of formation and Gibbs free energy of formation for methyl to pentyl esters were calculated using the Gaussian quantum chemistry software (model B3LYP/6-31G(d,p)) and the group contribution method of Constantinou and Gani (MCG). Correction parameters, which are a function of the molecular chain size of 26 molecules, were required to extrapolate the results to larger molecules of interest. The mean deviation between the experimental and calculated values by Gaussian was 0.723% for enthalpy and 1.087% for Gibbs, whereas for MCG, it was 1.324% and 2.540%, respectively. By means of the adjustment, the properties of 23 esters widely used in biodiesel production were estimated, which will be used to calculate equilibrium and reactional data of new

catalysts.

**KEYWORDS:** Biodiesel; Enthalpy of formation; Gibbs free energy of formation; Quantum chemistry; Group contribution method.

## INTRODUÇÃO

O Brasil é o terceiro maior produtor mundial de biodiesel, sendo os EUA o maior produtor e a Indonésia na vice liderança. Em 2020, o Brasil produziu 6,43 milhões de m<sup>3</sup> de biodiesel, 9% a mais do que produziu no ano anterior. No início do ano de 2021 era usado a mistura de 12% de biodiesel e 88% de diesel, o B12, chegando a ficar B13 em março de 2021. Contudo, devido ao alto valor do óleo de soja, que a principal matéria-prima do biodiesel, a porcentagem de biodiesel no diesel caiu para 10% no último bimestre de 2021. Só que há a perspectiva de se chegar em B15 no ano de 2023 e, talvez, até no B30 em 2030. (ANP, 2021).

O biodiesel é um éster de ácido graxo obtido da reação química entre um óleo ou gordura (triglicerídeos), de origem vegetal e animal, respectivamente, e um álcool na presença de um catalisador (reação de transesterificação), cujo subproduto é o glicerol. Sendo os principais óleos utilizados os de soja, mamona, dendê e de girassol. Já o álcool, geralmente é primário e de cadeia curta, como o metanol e o etanol. O biodiesel também pode ser obtido com a esterificação de ácidos graxos livre com álcoois. (Bucalá *et al.*, 2006)

Um procedimento importante para o entendimento e melhoramento de reações reversíveis (como a esterificação de ácidos graxos livres) é o cálculo do equilíbrio químico e de fases do sistema, sobre diversas condições operacionais. O cálculo de equilíbrio químico requer informações dos compostos envolvidos na reação, tais como a entalpia de formação e a energia livre de Gibbs de formação. Estas propriedades termodinâmicas não estão atualmente disponíveis na literatura para um grande número de moléculas de ésteres de cadeia longa.

A entalpia de formação e a energia livre de Gibbs de formação podem ser estimadas usando a teoria da química quântica. Tais aplicações estão disponíveis em programas computacionais como o Gaussian 03W (Liu *et al.*, 2004; Osmont *et al.*, 2007). Esse programa trabalha na resolução das equações de onda de Schrödinger. Como a resolução das equações de onda é muito complicada, o programa utiliza várias simplificações e, conseqüentemente, correções para minimizar os erros obtidos com as aproximações utilizadas. Cada tipo de simplificação e de correção corresponde a um modelo diferente na resolução da equação. Os modelos computacionais consistem de um método de cálculo e pelas características particulares do mesmo (conjunto de base).

Os métodos de DFT (baseados na teoria do funcional da densidade) são formados por uma palavra-chave que identifica o tipo de potencial de troca e outra que identifica o potencial de correlação. O método B3LYP, ao qual se dará ênfase neste trabalho,

pertencente ao grupo dos DFT, identifica os métodos de gradiente da troca exata de Hartree-Fock (métodos ACM, *adiabatically coupled functionals*). (GAUSSIAN, 2009)

O conjunto de base utilizado é 6-31G, que é uma base split-valence p-q1G, juntamente com o complemento (d,p), onde “d” agrega funções de polarização nos átomos principais e “p” agrega funções nos átomos de hidrogênio. O modelo B3LYP/6-31G(d,p) foi citado nos trabalhos de Osmont *et al.* (2007) e Liu *et al.* (2004), onde apresentou bons resultados.

Outro método para estimar a entalpia de formação e a energia livre de Gibbs de formação é o método de contribuição de grupo. Este método tem como princípio que as propriedades das estruturas dos componentes químicos são sempre as mesmas, independentemente do tipo da molécula. Prevê propriedades de componentes puros e misturas utilizando propriedades do grupo ou átomo, reduzindo drasticamente o número de dados necessários à estimativa.

Santander *et al.* (2012) e Arvelos *et al.* (2014) compararam inúmeros métodos de contribuição de grupo para estimar propriedades triglicerídeos e éster. Ambos os trabalhos concluíram que o método de Constantinou e Gani (Constantinou e Gani, 1994), utilizado neste trabalho, apresentou um dos melhores resultados para o cálculo da termodinâmica de propriedades de formação.

O presente trabalho tem como objetivo principal o cálculo da entalpia de formação e da energia livre de Gibbs de formação de ésteres de cadeia longa (biodiesel), cujos valores não estão disponíveis na literatura. As moléculas de biodiesel estimadas derivam da reação de transesterificação entre os cinco grandes álcoois (metanol, etanol, n-propanol, n-butanol e n-pentanol) e os cinco principais ácidos graxos (ácido palmítico, ácido esteárico, ácido oleico, ácido linoleico e ácido linolênico). Todos os dados termodinâmicos utilizados nesta pesquisa estão no estado de ideal gás à 298,15 K e 1 atm. Os cálculos são realizados utilizando-se o software de química quântica Gaussian 03W e o método de contribuição de grupo de Constantinou e Gani. Como os resultados obtidos pelas duas metodologias não são numericamente satisfatórios, este trabalho também visa ajustar, por meio de parâmetros de correção, os valores estimados.

## MATERIAIS E MÉTODOS

O passo inicial foi o desenho das moléculas. Ao todo, foram construídas 49 estruturas moleculares de ésteres de ácidos graxos, moléculas de peso molecular entre 60,05 g/mol (metanoato de metila -  $C_2H_4O_2$ ) e 354,61 g/mol (esterato de pentila -  $C_{23}H_{46}O_2$ ). O programa utilizado para a construção de estruturas moleculares foi Ovogadro 0.9.8 (Hanwell *et al.*, 2012). Optou-se por projetá-las com geometria planar e na conformação trans para ter um padrão entre as estruturas das moléculas para a posterior determinação dos parâmetros de correção.

Após serem projetadas, as moléculas foram submetidas ao CENAPAD (Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo) via SSH, programa utilizado para acessar outro computador utilizando uma rede. Os cálculos foram realizados em um único processador de 8 GB de RAM no ambiente SGI. O sistema SGI Altix 1350 / Altix 450 instalado no CENAPAD-SP tem 174 CPUs Intel Itanium2 (278 cores), 866 GB de RAM, tecnologia NUMAFlex Generation 4, interconexão Infiniband e sistema de armazenamento SGI TP9300 com 43 TB. A capacidade de processamento teórico do sistema é de 1,5 TFLOPS. A versão do software Gaussian disponível neste ambiente é a Gaussian 03W.

Em primeiro lugar, para realizar os cálculos de interesse, os átomos elementares que formam as moléculas (C, H e O) também foram submetidos no Gaussian. Os dados obtidos do Gaussian, através de cálculos de otimização da geometria e frequência, são energia eletrônica, correção de entalpia e correção de energia livre de Gibbs. Com os dados obtidos dos átomos elementares e das moléculas de interesse, a atomização e a atomização da energia livre de Gibbs são calculadas pelas Equações 1 e 2 (Liu *et al.*, 2004):

$$\Delta H_{atom}^o(mol) = [E^{el}(Mol) + H^{therm}(Mol)] - nC[E^{el}(C) + H^{therm}(C)] - nH[E^{el}(H) + H^{therm}(H)] - nO[E^{el}(O) + H^{therm}(O)] \quad (1)$$

$$\Delta G_{atom}^o(mol) = [E^{el}(Mol) + G^{therm}(Mol)] - nC[E^{el}(C) + G^{therm}(C)] - nH[E^{el}(H) + G^{therm}(H)] - nO[E^{el}(O) + G^{therm}(O)] \quad (2)$$

A entalpia da formação e a energia livre de Gibbs de formação da molécula podem ser escritas em função da entalpia da atomização e da energia livre de Gibbs de atomização da molécula e das enthalpies de formação e as energias livres de Gibbs de formação de cada átomo que compõe a molécula, que pode ser vista nas Equações 3 e 4:

$$\Delta H_f^o(mol) = \Delta H_{atom}^o(mol) + nC. \Delta H_f^o(C) + nH. \Delta H_f^o(H) + nO. \Delta H_f^o(O) \quad (3)$$

$$\Delta G_f^o(mol) = \Delta G_{atom}^o(mol) + nC. \Delta G_f^o(C) + nH. \Delta G_f^o(H) + nO. \Delta G_f^o(O) \quad (4)$$

Dados de entalpia de formação e energia livre de Gibbs de formação de átomos de carbono, hidrogênio e oxigênio são necessários para a resolução das Equações 3 e 4. Estes dados estão listados na Tabela 1 como gás ideal a 298,15 K e 1 atm:

Átomo	$\Delta H_f^0$ (298K) (kcal/mol)	(298K) (kcal/mol)
C	171,176	160,327
H	52,061	48,545
O	59,520	55,341

Tabela 1. Valores de entalpia de formação e energia livre de Gibbs de formação de átomos

Os valores obtidos das Equações 3 e 4 não eram quantitativamente adequados, ou seja, os valores não estavam próximos dos valores da literatura. Assim, foi proposta a inserção de três parâmetros de correção de erro para a minimização das funções de erro das Equações 5 e 6 (Liu *et al.*, 2004):

$$Erro(H) = \sum_{i=1}^N \left[ (\Delta H_{f, lit}^0(mol) - \Delta H_f^0(mol) - PCL_H - nC.PCC_H - nH.PCH_H)^2 \right] \quad (5)$$

$$Erro(G) = \sum_{i=1}^N \left[ (\Delta G_{f, lit}^0(mol) - \Delta G_f^0(mol) - PCL_G - nC.PCC_G - nH.PCH_G)^2 \right] \quad (6)$$

Os parâmetros de correção não foram inseridos em relação ao número de oxigênio, uma vez que todas as moléculas estudadas possuem o mesmo número de oxigênio, que eram 2 oxigênios. Foram utilizados dados de literatura de 26 moléculas para determinar os parâmetros de correção. O processo de minimização das funções objetivas foi realizado no “Solver”, uma ferramenta poderosa na planilha do Microsoft Excel que fornece um meio simples de encaixar funções. Os dados termodinâmicos utilizados para comparação com os valores gaussianos foram encontrados no programa DIADEMA (Rowley *et al.*, 2002).

Após a obtenção dos parâmetros de correção, calculou a entalpia da formação corrigida e a energia livre de formação de Gibbs corrigida pelas Equações 7 e 8, que são valores mais próximos da realidade.

$$\Delta H_{f_c}^0(mol) = \Delta H_f^0(mol) + PCL_H + nC.PCC_H + nH.PCH_H \quad (7)$$

$$\Delta G_{f_c}^0(mol) = \Delta G_f^0(mol) + PCL_G + nC.PCC_G + nH.PCH_G \quad (8)$$

O método de contribuição de grupo de Constantinou e Gani (MCG) utiliza dados tabulados de grupos químicos para estimar propriedades termodinâmicas moleculares. Existem 76 tipos de grupos de primeira ordem e 41 tipos de grupos de segunda ordem. As principais fórmulas utilizadas no método de Constantinou e Gani são as seguintes (Constantinou e Gani, 1994):

Gibbs livre energia de formação (kJ/mol):

$$\Delta G_f^0(mol) = -14,83 + \left[ \sum_k N_k(gf1k) + W \sum_j M_j(gf2j) \right] \quad (9)$$

Enthalpy de formação (kJ/mol):

$$\Delta H_f^0(\text{mol}) = 10,835 + \left[ \sum_k N_k(hf1k) + W \sum_j M_j(hf2j) \right] \quad (10)$$

Onde:  $N_k$  é o número de grupos de primeira ordem de tipo  $K$  na molécula, e  $M_j$  é o número de grupos de segunda ordem do tipo  $j$  na molécula.

Nessa metodologia, foram encontrados parâmetros de correção pelas Equações 5 e 6, e novas propriedades corrigidas pelas Equações 7 e 8 foram calculadas.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

A relação entre os erros obtidos antes e depois do ajuste à entalpia de formação (kcal/mol) de 26 moléculas é mostrada na Tabela 2.

Molécula	Literatura	Gaussian		MCG	
	Entalpia de formação	Valor calculado (% Erro)	Valor ajustado (% Erro)	Valor calculado (% Erro)	Valor ajustado (% Erro)
<b>Metanoato de metila (C2H4O2)</b>	-84,226	-86,265 (2,421)	-84,730 (0,598)	-87,880 (4,338)	-88,538 (5,119)
<b>Etanoato de metila (C3H6O2)</b>	-98,446	-99,217 (0,784)	-97,393 (1,070)	-101,473 (3,075)	-101,769 (3,375)
<b>Propanoato de metila (C4H8O2)</b>	-102,175	-104,930 (2,696)	-102,815 (0,627)	-105,168 (2,929)	-105,101 (2,863)
<b>Butanoato de metila (C5H10O2)</b>	-107,720	-110,060 (2,172)	-107,656 (0,059)	-110,127 (2,235)	-109,697 (1,836)
<b>Decanoato de metila (C11H22O2)</b>	-137,141	-140,890 (2,734)	-136,749 (0,286)	-139,882 (1,999)	-137,276 (0,099)
<b>Dodecanoato de metila (C13H26O2)</b>	-146,343	-151,152 (3,286)	-146,432 (0,061)	-149,800 (2,362)	-146,469 (0,086)
<b>Acrilato de metila (C4H6O2)</b>	-79,589	-72,214 (9,266)	-75,294 (5,396)	-69,371 (12,839)	-76,945 (3,322)
<b>Oleato de metila (C19H36O2)</b>	-149,618	-150,575 (0,640)	-149,312 (0,204)	-152,229 (1,745)	-154,364 (3,172)
<b>Metanoato de etila (C3H6O2)</b>	-92,806	-94,916 (2,273)	-93,091 (0,307)	-92,839 (0,035)	-93,134 (0,354)
<b>Etanoato de etila (C4H8O2)</b>	-106,238	-107,800 (1,471)	-105,686 (0,519)	-106,433 (0,183)	-106,365 (0,120)

<b>Propanoato de etila (C5H10O2)</b>	-110,803	-113,493 (2,428)	-111,089 (0,258)	-110,127 (0,610)	-109,697 (0,998)
<b>Butanoato de etila (C6H12O2)</b>	-116,037	-118,645 (2,248)	-115,952 (0,073)	-115,086 (0,819)	-114,294 (1,502)
<b>Acrilato de etila (C5H8O2)</b>	-81,501	-80,822 (0,834)	-83,612 (2,590)	-74,330 (8,799)	-81,541 (0,050)
<b>Metanoato de propila (C4H8O2)</b>	-97,419	-99,975 (2,623)	-97,861 (0,453)	-97,798 (0,389)	-97,731 (0,320)
<b>Etanoato de propila (C5H10O2)</b>	-111,090	-113,203 (1,902)	-110,799 (0,262)	-111,392 (0,272)	-110,962 (0,115)
<b>Propanoato de propila (C6H12O2)</b>	-115,386	-118,555 (2,746)	-115,862 (0,412)	-115,086 (0,260)	-114,294 (0,947)
<b>Butanoato de propila (C7H14O2)</b>	-120,770	-123,596 (2,340)	-120,613 (0,130)	-120,045 (0,600)	-118,890 (1,556)
<b>Acrilato de propila (C6H10O2)</b>	-86,998	-85,871 (1,295)	-88,372 (1,579)	-79,289 (8,861)	-86,138 (0,989)
<b>Metanoato de butila (C5H10O2)</b>	-102,079	-105,035 (2,896)	-102,632 (0,542)	-102,757 (0,664)	-102,327 (0,243)
<b>Etanoato de butila (C6H12O2)</b>	-116,061	-117,903 (1,587)	-115,210 (0,733)	-116,351 (0,250)	-115,558 (0,433)
<b>Propanoato de butila (C7H14O2)</b>	-120,124	-123,595 (2,889)	-120,612 (0,406)	-120,045 (0,065)	-118,890 (1,027)
<b>Butanoato de butila (C8H16O2)</b>	-125,454	-128,752 (2,629)	-125,480 (0,021)	-125,005 (0,358)	-123,487 (1,568)
<b>Nonanoato de butila (C13H26O2)</b>	-149,852	-154,462 (3,076)	-149,742 (0,073)	-149,800 (0,034)	-146,469 (2,257)
<b>Acrilato de Butila (C7H12O2)</b>	-92,017	-90,921 (1,192)	-93,132 (1,212)	-84,248 (8,443)	-90,735 (1,394)
<b>Metanoato de pentila (C6H12O2)</b>	-107,122	-110,222 (2,894)	-107,529 (0,380)	-107,716 (0,555)	-106,924 (0,185)
<b>Etanonato de pentila (C7H14O2)</b>	-120,736	-123,076 (1,938)	-120,093 (0,532)	-121,310 (0,475)	-120,155 (0,481)
<b>% Erro médio</b>		2,433 ± 1,580	0,723 ± 1,106	2,431 ± 3,440	1,324 ± 1,321

Tabela 2. Comparação entre os erros de entalpia de formação, antes e depois do ajuste, para a metodologia Gaussian e MCG.

A Tabela 2 mostra que, antes do ajuste, os erros das duas metodologias eram semelhantes. Após o ajuste, o erro teve uma queda mais significativa para a estimativa da metodologia do software Gaussian. Na metodologia de Gaussian, o acrilato de metila apresentou um erro significativamente maior, em comparação com as outras moléculas, antes e depois do ajuste. Na metodologia MCG, os ésteres de metila apresentaram os maiores erros, antes e depois do ajuste.

A Tabela 3 mostra os erros obtidos antes e depois do ajuste para a energia livre de Gibbs de formação (kcal/mol) de 26 moléculas.

Molécula	Literatura	Gaussian		MCG	
	Energia livre de Gibbs de formação	Valor calculado (% Erro)	Valor ajustado (% Erro)	Valor calculado (% Erro)	Valor ajustado (% Erro)
<b>Metanoato de metila (C2H4O2)</b>	-70,507	-75,104 (6,520)	-70,838 (0,469)	-74,463 (5,611)	-74,610 (5,819)
<b>Etanoato de metila (C3H6O2)</b>	-77,486	-81,835 (5,613)	-77,153 (0,430)	-81,560 (5,258)	-81,508 (5,191)
<b>Propanoato de metila (C4H8O2)</b>	-74,331	-80,579 (8,405)	-75,481 (1,547)	-76,927 (3,492)	-76,676 (3,155)
<b>Butanoato de metila (C5H10O2)</b>	-72,968	-78,899 (8,128)	-73,386 (0,573)	-74,961 (2,731)	-74,511 (2,115)
<b>Decanoato de metila (C11H22O2)</b>	-60,875	-68,502 (12,530)	-60,496 (0,622)	-63,165 (3,763)	-61,522 (1,063)
<b>Dodecanoato de metila (C13H26O2)</b>	-57,361	-65,018 (13,349)	-56,181 (2,058)	-59,234 (3,264)	-57,193 (0,293)
<b>Acrilato de metila (C4H6O2)</b>	-61,424	-55,715 (9,294)	-57,095 (7,048)	-52,168 (15,069)	-58,767 (4,326)
<b>Oleato de metila (C19H36O2)</b>	-27,964	-33,209 (18,756)	-28,355 (1,398)	-28,847 (3,158)	-32,463 (16,087)
<b>Metanoato de etila (C3H6O2)</b>	-72,443	-76,939 (6,206)	-72,257 (0,257)	-72,497 (0,075)	-72,445 (0,003)
<b>Etanoato de etila (C4H8O2)</b>	-78,394	-83,653 (6,709)	-78,556 (0,207)	-79,594 (1,531)	-79,343 (1,211)
<b>Propanoato de etila (C5H10O2)</b>	-76,315	-82,369 (7,932)	-76,856 (0,708)	-74,961 (1,774)	-74,511 (2,363)
<b>Butanoato de etila (C6H12O2)</b>	-74,618	-80,725 (8,184)	-74,796 (0,239)	-72,995 (2,175)	-72,347 (3,044)

<b>Acrilato de etila (C5H8O2)</b>	-56,644	-57,541 (1,584)	-58,505 (3,285)	-50,202 (11,373)	-56,602 (0,075)
<b>Metanoato de propila (C4H8O2)</b>	-70,172	-75,219 (7,192)	-70,122 (0,072)	-70,531 (0,512)	-70,280 (0,154)
<b>Etanoato de propila (C5H10O2)</b>	-76,577	-80,875 (5,613)	-75,362 (1,586)	-77,628 (1,373)	-77,179 (0,786)
<b>Propanoato de propila (C6H12O2)</b>	-74,018	-80,621 (8,921)	-74,692 (0,911)	-72,995 (1,382)	-72,347 (2,258)
<b>Butanoato de propila (C7H14O2)</b>	-72,467	-78,862 (8,825)	-72,518 (0,070)	-71,029 (1,984)	-70,182 (3,154)
<b>Acrilato de propila (C6H10O2)</b>	-55,210	-55,857 (1,172)	-56,405 (2,165)	-48,236 (12,632)	-54,437 (1,400)
<b>Metanoato de butila (C5H10O2)</b>	-67,973	-73,498 (8,129)	-67,985 (0,018)	-68,565 (0,871)	-68,116 (0,210)
<b>Etanoato de butila (C6H12O2)</b>	-74,713	-80,175 (7,311)	-74,247 (0,624)	-75,662 (1,271)	-75,014 (0,403)
<b>Propanoato de butila (C7H14O2)</b>	-71,821	-78,906 (9,864)	-72,561 (1,031)	-71,029 (1,102)	-70,182 (2,282)
<b>Butanoato de butila (C8H16O2)</b>	-70,292	-77,262 (9,916)	-70,502 (0,299)	-69,063 (1,748)	-68,017 (3,237)
<b>Nonanoato de butila (C13H26O2)</b>	-60,189	-68,817 (14,335)	-59,980 (0,348)	-59,234 (1,587)	-57,193 (4,978)
<b>Acrilato de Butila (C7H12O2)</b>	-53,298	-54,048 (1,407)	-54,181 (1,656)	-46,270 (13,186)	-52,272 (1,925)
<b>Metanoato de pentila (C6H12O2)</b>	-65,966	-71,754 (8,774)	-65,825 (0,213)	-66,599 (0,960)	-65,951 (0,023)
<b>Etanonato de pentila (C7H14O2)</b>	-72,489	-78,525 (8,327)	-72,181 (0,425)	-73,696 (1,666)	-72,849 (0,496)
<b>% Erro médio</b>		8,192 ± 3,827	1,087 ± 1,453	3,829 ± 4,259	2,540 ± 3,254

Tabela 3. Comparação entre os erros da energia livre de Gibbs de formação antes e depois do ajuste, para a metodologia Gaussian e MCG.

A Tabela 3 mostra que a metodologia MCG foi a melhor antes do ajuste. No entanto, após o ajuste, a metodologia de Gaussian mostrou-se melhor.

Nas Tabelas 2 e 3 nota-se que a metodologia via MCG antes do ajuste não é tão adequada para estimar propriedades para moléculas com insaturação. Além disso, o ajuste

é melhor na metodologia de Gaussian porque tem um desvio padrão menor.

A Tabela 4 mostra os valores obtidos para os parâmetros de correção das Equações 5 e 6.

Parâmetro	Gaussian (kcal/mol)	MCG (kcal/mol)
$PCL_H$	0,956	-1,383
$PCC_H$	-4,905	-7,279
$PCH_H$	2,597	3,821
$PCL_G$	3,435	-0,545
$PCC_G$	-6,061	-6,651
$PCH_G$	3,238	3,425

Tabela 4. Valores dos parâmetros de correção obtidos após o ajuste.

A Tabela 5 mostra a entalpia da formação e a energia livre de Gibbs de formação de 23 moléculas, cujos dados não estão presentes ainda na literatura. Esses dados foram estimados com base nas duas metodologias propostas por este trabalho.

Molécula	Entalpia de formação (kcal/mol)			Gibbs energia livre de formação (kcal/mol)		
	Metodologia Gaussian	Metodologia MCG	$\Delta$	Metodologia Gaussian	Metodologia MCG	$\Delta$
Palmitato de metila (C17H34O2)	-165,795	-164,856	0,940	-47,475	-48,533	1,059
Estearato de metila (C19H38O2)	-175,479	-174,049	1,430	-43,098	-44,204	1,106
Linoleato de metila (C19H34O2)	-122,755	-135,031	12,276	-12,051	-20,888	8,837
Linolenato de metila (C19H32O2)	-96,047	-115,698	19,651	4,847	-9,314	14,161
Palmitato de etila (C18H36O2)	-174,074	-169,452	4,622	-48,968	-46,369	2,600
Estearato de etila (C20H40O2)	-183,759	-178,645	5,114	-44,620	-42,039	2,581

<b>Oleato de etila (C20H38O2)</b>	-157,607	-158,961	1,354	-29,571	-30,298	0,726
<b>Linoleato de etila (C20H36O2)</b>	-135,845	-139,628	3,783	-15,361	-18,724	3,362
<b>Linolenato de etila (C20H34O2)</b>	-104,344	-120,295	15,950	3,528	-7,149	10,677
<b>Palmitato de propila (C19H38O2)</b>	-178,829	-174,049	4,781	-46,652	-44,204	2,448
<b>Estearato de propila (C21H42O2)</b>	-188,513	-183,242	5,271	-42,291	-39,874	2,417
<b>Oleato de propila (C21H40O2)</b>	-162,330	-163,557	1,228	-27,183	-28,133	0,950
<b>Linoleato de propila (C21H38O2)</b>	-135,797	-144,224	8,427	-10,459	-16,559	6,100
<b>Linolenato de propila (C21H36O2)</b>	-109,131	-124,891	15,760	6,035	-4,985	11,019
<b>Palmitato de butila (C20H40O2)</b>	-183,608	-178,645	4,963	-44,499	-42,039	2,460
<b>Oleato de butila (C22H42O2)</b>	-167,122	-168,154	1,031	-25,510	-25,968	0,458
<b>Linoleato de butila (C22H40O2)</b>	-140,121	-148,821	8,700	-2,168	-14,394	12,226
<b>Linolenato de butila (C22H38O2)</b>	-113,903	-129,488	15,584	8,328	-2,820	11,148
<b>Palmitato de pentila (C21H42O2)</b>	-188,492	-183,242	5,250	-42,427	-39,874	2,553
<b>Estearato de pentila (C23H46O2)</b>	-198,174	-192,435	5,739	-38,080	-35,544	2,536
<b>Oleato de pentila (C23H44O2)</b>	-171,988	-172,750	0,762	-22,606	-23,803	1,198
<b>Linoleato de pentila (C23H42O2)</b>	-144,905	-153,417	8,512	-5,483	-12,229	6,746
<b>Linolenato de pentila (C23H40O2)</b>	-117,647	-134,084	16,437	12,276	-0,655	12,931
<b>Média</b>			7,285			5,230

Tabela 5. Entalpia de formação e energia livre de Gibbs de formação estimada pelas metodologias Gaussian e MCG (Equações 7 e 8).

A Tabela 5 mostra que os valores apresentam maior divergência para os linolenatos, provavelmente devido ao maior número de insaturação, uma vez que a metodologia MCG não é muito precisa para estimar valores para moléculas com insaturação.

## CONCLUSÕES

A metodologia proposta mostrou-se eficiente na previsão de entalpia de formação e energia livre de Gibbs de formação para diferentes moléculas de éster de biodiesel. Sem parâmetros de correção, a metodologia do software Gaussian proporciona um erro médio de 2,433% para a entalpia e 8,192% para Gibbs, enquanto o método de Contantinou e Gani (MCG) deu um erro médio de 2,431% e 3,829%, respectivamente. Com parâmetros de correção, o desvio médio entre os valores experimentais e calculados para a metodologia de Gaussian foi de 0,723% para a entalpia e 1,087% para Gibbs, enquanto para MCG, foi de 1,324% e 2,540%, respectivamente. Esses valores mostram a importância dos parâmetros de correção com base em dados experimentais para um cálculo mais preciso das propriedades termodinâmicas. À medida que o erro aumenta com o tamanho da molécula, extrapolações extensas em ambos os métodos devem ser evitadas. A metodologia utilizada neste trabalho mostrou-se uma ferramenta útil no cálculo de dados termodinâmicos cuja obtenção experimental seja difícil ou até impossível.

## NOMENCLATURA

$G^{therm}(Mol)$  - correção de energia livre de Gibbs para a molécula;

$G^{therm}(C)$  - correção de energia livre de Gibbs para o átomo de carbono;

$G^{therm}(H)$  - correção de energia livre de Gibbs para o átomo de hidrogênio;

$G^{therm}(O)$  - correção de energia livre de Gibbs para o átomo de oxigênio;

$H^{therm}(Mol)$  - correção de entalpia para a molécula;

$H^{therm}(C)$  - correção de entalpia para o átomo de carbono;

$H^{therm}(H)$  - correção de entalpia para o átomo de hidrogênio;

$H^{therm}(O)$  - correção de entalpia para o átomo de oxigênio;

$E^{el}(Mol)$  - energia eletrônica da molécula;

$E^{el}(C)$  - energia eletrônica do átomo de carbono;

$E^{el}(H)$  - energia eletrônica do átomo de hidrogênio;

$E^{el}(O)$  - energia eletrônica do átomo de oxigênio;

$\Delta G_{atom,C}^o$  - energia livre de Gibbs de atomização corrigida;

$\Delta G_{atom}^o$  - energia livre de Gibbs de atomização da molécula;

$\Delta G_{atom,R}^o$  - energia livre de Gibbs de atomização de referência;

$\Delta G_f^{\circ} (Mol)$  - energia livre de Gibbs de formação da molécula;  
 $\Delta G_f^{\circ} (C)$  - energia livre de Gibbs de formação do átomo de carbono;  
 $\Delta G_f^{\circ} (H)$  - energia livre de Gibbs de formação do átomo de hidrogênio;  
 $\Delta G_f^{\circ} (O)$  - energia livre de Gibbs de formação do átomo de oxigênio;  
 $\Delta H_{atom\_C}^{\circ}$  - entalpia de atomização corrigida;  
 $\Delta H_{atom}^{\circ}$  - entalpia de atomização da molécula;  
 $\Delta H_{atom\_R}^{\circ}$  - entalpia de atomização de referência;  
 $\Delta H_f^{\circ} (Mol)$  - entalpia de formação da molécula;  
 $\Delta H_f^{\circ} (C)$  - entalpia de formação do átomo de carbono;  
 $\Delta H_f^{\circ} (H)$  - entalpia de formação do átomo de hidrogênio;  
 $\Delta H_f^{\circ} (O)$  - entalpia de formação do átomo de oxigênio;  
 $PCL_H$  - parâmetro de correção linear para entalpia;  
 $PCC_H$  - parâmetro de correção de entalpia em relação ao número de átomos de carbono da molécula;  
 $PCH_H$  - parâmetro de correção de entalpia em relação ao número de hidrogênios da molécula;  
 $PCL_G$  - parâmetro de correção linear para a energia livre de Gibbs;  
 $PCC_G$  - parâmetro de correção de energia livre de Gibbs em relação ao número de átomos de carbono da molécula;  
 $PCH_G$  - parâmetro de correção de energia livre de Gibbs em relação ao número de hidrogênios da molécula;  
 $N$  - número de moléculas  $i$  utilizadas no ajuste;  
 $nC$  - número de átomos de carbono presentes na molécula;  
 $nH$  - número de átomos de hidrogênio presentes na molécula;  
 $nO$  - número de átomos de oxigênio presentes na molécula.

## REFERÊNCIAS

ANP – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Disponível em: [www.anp.gov.br/producao-de-biocombustiveis](http://www.anp.gov.br/producao-de-biocombustiveis). Acessado em: Out. 2021.

ARVELOS, S., RADE, L.L., WATENABE, C.E., HORI, C.E., ROMANIELO, L.L. **Evaluation of different contribution methods over the performance of Peng-Robinson and CPA equation of state in the correlation of VLE of triglycerides, fatty esters and glycerol + CO<sub>2</sub> and alcohol.** Fluid Phase Equilibr. 362, 136-146, 2014.

BUCALÁ, V., FORESTI, M.L., TRUBIANO G., FERREIRA M.L., BRIOZZO, M., BOTTINI, S. **Analysis of solvent-free ethyl oleate enzymatic synthesis at equilibrium conditions.** Enzym. Microb. Tech., v. 38, p. 914-920, 2006.

CONSTANTINO, L., GANI, R. **New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds**. *Aiche J.* 40, 1697-1710, 1994.

GAUSSIAN 94. Disponível em: <<http://www.ccbg.fq.edu.uy/courses/QFM102/Tutorials/g94.pdf>>. Acesso em: out, 2021.

HANWELL, M.D., CURTIS, D.E., LONIE, D.C., VANDERMEERSCH, T., ZUREK, E., HUTCHISON, G.R. **Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform**. *J. Cheminformatics.* 4, 17, 2012.

LIU, M., CHEN C., HONG, Y. **Improved modification for the density-functional theory calculation of thermodynamic properties for C–H–O composite compounds**. *J. Chem. Phys.*, v. 122, p. 064312-064312-6, 2004.

OSMONT, A., CATOIRE, L., GÖKALP, I. **Thermochemistry of Methyl and Ethyl Esters from Vegetable Oils**. *Int. J. Chem Kinet.*, v. 39, p. 481 – 491, 2007.

ROWLEY, J.R., WILDING, W.V., OSCARSON, J.L., ROWNLEY, R.L. **DIADEM, DIPPR Information and Data Evaluation Manager**. Brigham Young University, Provo, Utah, 2002.

SANTANDER, C.M.G., RUEDA, S.M.G., SILVA, N.L., CAMARGO, C.L., KIECKBUSCH, T.G., MACIEL, M.R.W. **Measurements of normal boiling points of fatty acid ethyl esters and triacylglycerols by thermogravimetric analysis**. *Fuel.* 92(1), 158-161, 2012.

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

Adsorbent 78, 85, 88

Adsorption 2, 85, 88, 98, 108

Advanced Oxidative Processes (AOPs) 102

Agro-industrial waste 88

Anti-inflammatory 17

Aqueous matrices 2, 100, 103, 105, 112

### B

Bacterium 100, 108, 109, 110, 111

Bioactive 12

Biodiesel 2, 3, 37, 38, 39, 48

### C

Cadmium 2, 51

Cheese 51

Contaminants of Emerging Concern (CEC) 101

Copper 2, 26, 33, 34, 51, 83, 88

### D

Detection Limit 100, 106

### E

Essential oil 2, 2

Esters 2, 37, 49, 50

### F

Fermentation 63, 76, 77

Fibers 2

Fracking gas 2, 4, 78, 79

### G

Gibbs free energy 37, 38

Graphite oxide 25

### H

Heavy metals 88

Hydrosphere 79

## **K**

Kombucha 2, 4, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 73, 74, 75, 76, 77

## **L**

Lead 2, 51, 81, 82

Lithosphere 79

## **M**

Meloidogyne javanica 2, 3, 1, 2, 5, 6, 7, 10, 11

Mercury 2, 51

Metallic ions 2

Mineralization 100, 105, 107, 110, 111, 112

## **N**

Nematicidal activity 2, 2

Nematodes 2

Nickel 2, 51

## **O**

Organic matter 102, 108, 110, 111

## **P**

Pharmaceuticals 4, 100, 101, 102, 103, 105, 106, 107, 109, 110, 111, 112

Photocatalysis 4, 25, 34, 100, 103, 105, 111, 112, 113

Photocatalyst 33, 34, 35, 36, 106, 107, 108, 109, 110

Photolysis 2, 4, 100, 103, 106, 107, 109, 111

Photonic microscope 2

Photosystems 26

Probiotics 63, 76

Pyrolysis 88, 99

## **Q**

Quantum chemistry 37, 38

## **R**

River Water (RW) 103

## **S**

Soil 2, 4, 78

Solar photolysis 2, 106, 107, 109

Solar radiation 4, 100, 103, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 113

Solar spectrum 25

## **T**

Thermodynamic properties 2, 37, 50

Toxicity 76, 78, 81, 86, 100, 105, 108, 109, 110, 111, 112

Triterpenoids 12

## **U**

UV-Vis spectrophotometry 2, 51

## **V**

Vibrio fischeri 100, 105, 108, 109, 110, 111

## **W**

Wastewater 2, 88, 103, 104, 112

Water 2, 4, 34, 35, 36, 78, 79, 80, 81, 84, 85, 86, 88, 100, 101, 102, 103, 104, 107, 110, 111, 112, 113

 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
 [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)  
 @atenaeditora  
 [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](http://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)

---

*Collection:*

# APPLIED CHEMICAL ENGINEERING

---

  
Ano 2022

 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
 [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)  
 @atenaeditora  
 [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](http://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)

*Collection:*

# APPLIED CHEMICAL ENGINEERING

  
Ano 2022