

Simulações Computacionais de glicerídeos em metanol visando a produção de biodiesel.

Marcos Vinícius R. Garcia^{1*} (PG), Rafael S. Margarido¹ (PG), Sérgio L.E. Perza¹ (PG), Felipe F. V. Onselen¹ (IC), Wivirkins R. Maciel¹(IC), Walkimar J.M. Carneiro² (PQ), Marcos S. do Amaral¹ (PQ)

¹Laboratório de Modelagem Molecular, CCET, UFMS, Campo Grande, MS – *E-mail: mvrifon@gmail.com

²instituto de Química, UFF, Niterói, RJ

Palavras Chave: glicerídeos, biodiesel, metanol, modelagem molecular.

Introdução

O biodiesel é considerado um importante substituto do diesel de petróleo por possuir propriedades físico-químicas semelhantes, tendo como principais vantagens: a diminuição da emissão de poluentes, ser uma fonte renovável de energia.¹

Obteve-se as estruturas químicas pelo programa *Ghemical*, variando o tamanho das cadeias alquílicas (C_nH_{2n+1}) dos glicerídeos, de modo que $n = 1, 2, \dots, 5$. Realizou-se, no vácuo, cálculos de otimização de geometria de todas as estruturas², no nível de teoria *HF/4-31G* utilizando o programa *Gaussian 3.0*. Após foram dessolvatadas em metanol, as simulações do sistema ocorreram utilizando o Campo de Forças *PM3/AMBER99SB*, no esquema híbrido *QM/MM*³, em equilíbrio termodinâmico, durante 2,0 ns à temperatura de 298 K em caixas cúbicas de 15 angstroms de lado e condições periódicas de contorno. (Figura 1)

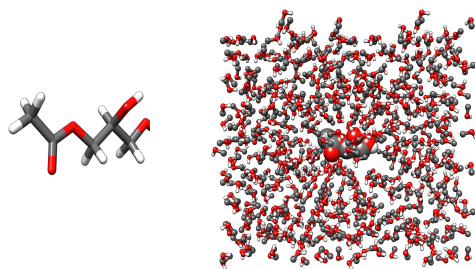


Figura 1: Monoglicerídeo e Sistema monoglicerídeo solvatado

Verificou-se as funções radiais dos átomos de oxigênio precedentes a função éster dos monoglicerídeos e os átomos de carbonos do solvente a fim de observar a estabilização do metanol em torno do soluto.

Resultados e Discussão

A energia potencial, gráfico 1, se manteve estável em valores próximos de zero. Isso é um sinal de que a dinâmica está levando a conformação de menor energia.

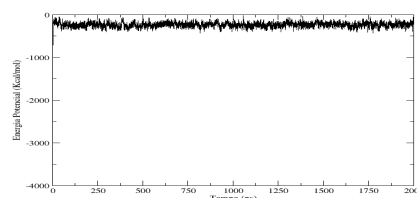


Gráfico 1

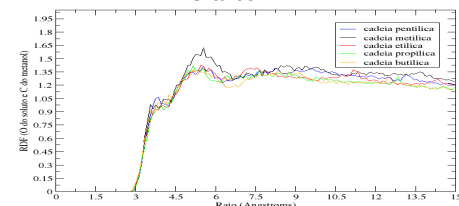


Gráfico 2

No gráfico 2, observa-se a estabilização do solvente em torno do oxigênio dos glicerídeos-modelo

Conclusões

Simulações por DM usando *QM/MM* permitem investigar o comportamento da estrutura dos monoglicerídeos na presença do solvente metanol.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CNPq, CAPES e Fundect

¹Carvalho, C. E. G.; Farias, A. M. D.; Pastura, N. M. R.; Scofield, C. F.; Borges, L. E. P.; Gonzales, W. A. Biodiesel, 101-106. <http://www.biodiesel.gov.br/docs/congressso2006/produção/Niobia.pdf>

²Warshel, A.; Levitt, M. J. Mol. Biol. 103, 227, 1976 AMBER, Release 9. Disponível em: www.amber.scripps.edu

³ Broggio Costa, S.T. Tese de doutorado para a obtenção do título de Doutor em Biofísica Molecular, área de concentração Biofísica Molecular.