

Área: FIS

Estimativa dos parâmetros termodinâmicos de ativação viscosa de ésteres presentes no biodiesel utilizando um método teoricamente consistente

Gabriel Oliveira da Silva (IC),^{1*} Julio Lopes da Silva Junior (FM/PQ).¹

gabrieloliveiradasilva1705@gmail.com; julio.silva@ifc.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Catarinense – IFC - Campus Araquari – Araquari-SC, Brasil.

Palavras Chave: *Viscosidade, Biodiesel, Equação de Eyring, Ésteres de Ácidos Graxos, Parâmetros Termodinâmicos de Ativação Viscosa*

Highlights

Estimation of the Thermodynamic Parameters of Viscous Activation for Esters Present in Biodiesel Using a Theoretically Consistent Method

Avaliação da viscosidade do biodiesel pela teoria da taxa absoluta de Eyring; Integração entre dados experimentais e modelagem teórica termodinamicamente consistente; Determinação dos parâmetros ΔH^\ddagger , ΔG^\ddagger , ΔS^\ddagger e ΔC_p^\ddagger ; Correlação entre geometria molecular e mecanismo de fluxo viscoso; subsídios projeto e simulação de processos de produção de biodiesel.

Resumo/Abstract

As crescentes preocupações ambientais, bem como as metas globais de descarbonização, têm incentivado o uso de combustíveis renováveis, como o biodiesel, cuja viscosidade é um parâmetro fundamental para o controle de qualidade e o desempenho. Desta forma, é importante compreender e ter disponíveis modelos capazes de prever seu comportamento. Neste sentido, este trabalho tem como objetivo estimar os parâmetros termodinâmicos de ativação viscosa (ΔG^\ddagger , ΔH^\ddagger , ΔS^\ddagger e ΔC_p^\ddagger) de ésteres metílicos e etílicos de ácidos graxos — principais constituintes do biodiesel — por meio da aplicação da equação da taxa absoluta de Eyring. Dados experimentais de viscosidade e densidade disponíveis na literatura foram compilados e ajustados a modelos selecionados: Andrade, Vogel-Fulcher-Tammann e Ghatee para a viscosidade, e a equação de Rackett modificada para a densidade, com obtenção de excelente correlação entre os valores experimentais e calculados para a maioria dos modelos utilizados. A análise termodinâmica revelou um aumento de ΔG^\ddagger e uma diminuição de ΔH^\ddagger e ΔS^\ddagger com a temperatura, comportamento análogo ao observado para n-alcenos, indicando que o fluxo viscoso é governado pela geometria molecular e pelos efeitos do volume livre. Esses resultados fornecem uma base teórica para compreender o comportamento viscoso dos componentes do biodiesel e contribuem para o desenvolvimento de modelos preditivos voltados à otimização de processos e formulação de combustíveis.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem o Instituto Federal Catarinense - *Campus Araquari* pelo suporte e financiamento do projeto por meio do Edital nº 1/2025 - CPSIN/ARA