



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOTECNOLOGIA

REDE NORDESTE DE BIOTECNOLOGIA

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ

Obtenção de biocombustíveis por craqueamento térmico e termocatalítico de óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) sobre bauxita: Um estudo teórico e experimental

Cícero Oliveira Costa Neto

TERESINA-PI

2018

CÍCERO OLIVEIRA COSTA NETO

Obtenção de biocombustíveis por craqueamento térmico e termocatalítico de óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) sobre bauxita: Um estudo teórico e experimental

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia da Rede Nordeste de Biotecnologia-RENORBIO, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Biotecnologia.

Orientador:

Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima

Co-orientador:

Prof. Dr. Geraldo Eduardo da Luz Júnior

TERESINA-PI

2018

FICHA CATALOGRÁFICA
Universidade Federal do Piauí
Biblioteca Setorial do Centro de Ciências Agrárias
Serviço de Processamento Técnico

C837o Costa Neto, Cícero Oliveira

Obtenção de biocombustíveis por craqueamento e termocatalítico de óleo de babaçú (*Orgnya phalerata*) sobre bauxita :Um estudo teórico experimental / Cícero Oliveira Costa Neto - 2018
- 200 f.: il.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Piauí, Programa de pós-graduação em Biotecnologia – RENORBIO, Teresina, 2018.
Orientação: Prf. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima

1. Biocombustível 2. Óleo de babaçú 3. Ácido láurico 4. Bauxita
5. Pirólise 6. Craqueamento térmico e craqueamento termocatalítico I. Título

CDD 662.8

FOLHA DE APROVAÇÃO – DEFESA DE TESE

ALUNO: CÍCERO OLIVEIRA COSTA NETO

TÍTULO DO PROJETO: “Obtenção de biocombustíveis por craqueamento térmico e termocatalítico de óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) sobre bauxita: Um estudo teórico e experimental.”

PROFESSOR ORIENTADOR: Francisco das Chagas Alves Lima

BANCA EXAMINADORA:

CONCEITO

ASSINATURA

Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima - UESPI
(Presidente)

Satisfatório

[Assinatura]

Prof. Dr. Geraldo Eduardo da Luz Júnior - UESPI
(Coorientador)

Satisfatório

[Assinatura]

Prof. Dr. Maria Rita De Moraes Chaves Santos - UFPI
(Examinadora)

Satisfatório

[Assinatura]

Prof. Dr. Edmilson Miranda De Moura - UFPI
(Examinadora)

Satisfatório

[Assinatura]

Prof. Dr. Joaquim Soares Da Costa Junior – IFPI
(Examinador)

Satisfatório

[Assinatura]

Prof. Dr. José Milton Elias De Matos - UFPI
(Examinador)

Satisfatório

[Assinatura]

DATA DA AVALIAÇÃO: 02 de Fevereiro de 2018.

HORÁRIO: 08:30h

LOCAL: Na sala de reuniões do Campus Ministro Reis Veloso - Parnaíba.

Dedicatória

A Deus, a minha família e aos meus amigos pelo apoio e amor sincero

Agradecimentos

A Deus por está sempre me iluminando, dando-me força, coragem, determinação e saúde.

Aos meus pais, José de Oliveira Costa (*in memória*) e Zelina Ferreira Soares pelo exemplo de amor e cidadania que me transmitiram.

A minha tia, Gonçala Ferreira Soares (*in memória*), por assumir o papel de segunda mãe.

A minha esposa Rosângela da Silva Amorim, pelo amor, companheirismo e dedicação à família.

Aos meus filhos, Caio Amorim Costa e Ingrid Amorim Costa, pelo amor mais sincero que existe desde os primórdios.

Aos meus irmãos, Neuton Oliveira Costa, Nelita Oliveira Costa, Nedite Oliveira Costa, Antônio Oliveira Costa, Nazaré Oliveira Costa, José Raimundo Oliveira Costa, Oneide Oliveira Costa e Maria de Jesus Oliveira Costa e José Maria Porfírio de Sousa (*in memória*), pelo amor, carinho e amizade.

A todos os meus amigos, pelo apoio e amizade.

Ao meu aluno de graduação, Antônio Rafael Oliveira, pela contribuição que deu na realização deste trabalho.

Ao curso de química da UESPI e todos seus professores, pelo companheirismo.

Ao meu co-orientador Prof. Dr. Geraldo Eduardo da Luz Júnior, pelo auxílio científico.

Ao meu orientador Prof. Dr. Francisco das Chagas Alves Lima, por tudo que fizemos na realização deste trabalho.

Ao RENORBIO: ponto focal Universidade Federal do Piauí, pela oportunidade da realização deste trabalho.

Epígrafe

*“...A felicidade não se resume na ausência de problemas,
mais sim na sua capacidade de lidar com eles...”*

(Albert Einstein)

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

OPEP	Organização dos Países Exportadores de Petróleo
PROÁLCOOL	Programa Nacional do Álcool
DFT	Teoria do funcional da densidade
DRX	Difração de raios-X
FTIR	Infravermelho com transformada de Fourier
CNPE	Conselho nacional do petróleo
ANP	Agencia nacional do petróleo
SE	Semi-empíricos
HF	Hartree-Fock
LO	Líquido orgânico
BJH	Brunauer, Emmett e Teller
DP	Desvio padrão
ASTM	American Standards Technical Methods
BET	Barret, Joinet e Halenda
AOCS	American Oil Chemical Society
CNE	Comité Européen de Normalisation

LISTA DE FIGURAS

Figura01	Estrutura em 3D dos principais constituintes da bauxita	34
Figura 02	Reação em estado sólido para formação da alfa-alumina a partir da gibbsita	35
Figura 03	Reação de formação dos triacilglicerol	36
Figura 04	Palmeiras de coco babaçu (<i>Orbignya phalerata</i>)	38
Figura 05	Tamanho e Composição média do Fruto do Babaçu	38
CAPÍTULO I		
Figura 1	Sistema utilizado no processo de pirólise do óleo de babaçu	53
Figura 2	Espectro de absorção FT-IR do LO obtido na da pirólise do óleo de babaçu	55
Figura 3	Cromatogramas dos LO oriundos da pirólise do óleo de babaçu	57
Figura 4	Seletividade dos compostos orgânicos, na faixa de C ₆ a C ₂₃ , presentes nos (LO)	58
Figura 5.	Mecanismo proposto para eliminação do hidrogênio β	60
Figura 6	Mecanismo proposto para a transferência do hidrogênio gama γ	63
Figura 7	Cargas e comprimentos de ligações da molécula de ácido láurico a 298 K	66
CAPÍTULO II		
Figura 1	Difratograma de Raios-X das amostras de bauxita	91
Figura 2	Espectro de absorção FTIR das amostras de bauxita	92
Figura 3	Isotermas de adsorção/dessorção de N ₂ obtida na amostra de bauxita calcinada	94
Figura 4	Isotermas de adsorção/dessorção de N ₂ obtida na amostra de bauxita protonada	94
Figura 5	Espectro de absorção FT-IR do biocombustível obtido a partir do craqueamento termocatalítico sobre amostras de bauxita	98
Figura 6	Cromatogramas dos LO oriundos dos craqueamentos	100
Figura 7	Seletividade dos hidrocarbonetos, na faixa de C ₆ a C ₂₃ , presentes nos LO	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Evolução do percentual do teor de biocombustível presente no diesel fóssil no Brasil	30
Tabela 2	Número de átomos de carbono e insaturações de alguns ácidos graxos conhecidos na natureza	37
Tabela 3.	Composição química do óleo de babaçu	39

CAPÍTULO I

Tabela 1.	Composição química do óleo de babaçu	52
Tabela 2	Índice de acidez das frações orgânicas obtidas na pirólise do óleo de babaçu	56
Tabela 3.	Energias termodinâmicas do mecanismo de eliminação do hidrogênio β	61
Tabela 4	Energias termodinâmicas para o mecanismo de transferência do hidrogênio gama (γ)	64
Tabela 5	Energias termodinâmicas das quebras das ligações do ácido láurico	67
Tabela 6.	Energias termodinâmicas de quebra das ligações na carboxila do ácido láurico	68
Tabela 7	Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C ₆ , C ₇ e C ₈ , a 448 K	70
Tabela 8	Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C ₉ , C ₁₀ e C ₁₁ , a 448 K	71
Tabela 9	Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C ₁₂ , C ₁₃ e C ₁₄ , a 448 K	73
Tabela 10	Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C ₁₅ , C ₁₆ e C ₁₇ , a 448 K	74
Tabela 11	Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C ₁₈ , C ₁₉ e C ₂₀ , a 448 K	75

CAPÍTULO II

Tabela 1	Composição química do óleo de babaçu	89
Tabela 2	Propriedades texturais das amostras de bauxita	95
Tabela 3	Índice de acidez dos biocombustíveis do óleo de babaçu sobre	96

catalisadores de bauxita e craqueamento térmico

Tabela 4 Balanço de massa para o craqueamento térmico e termocatalítico 97
sobre amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada

Tabela 5 Propriedades físico-químicas do LO do craqueamento termocatalítico 102
do óleo de babaçu sobre a amostra de bauxita protonada

Resumo

No presente trabalho, as reações de craqueamento térmico e termocatalítico do óleo de babaçu foram utilizadas para a produção de combustíveis alternativos. A caracterização dos líquidos orgânicos (LO) foi feita por espectroscopia na região do infravermelho (FTIR) e a medida da acidez por estimativa direta da quantidade de ácidos livres. Os produtos da pirólise obtidos sem a utilização de catalisadores apresentou acidez muito elevada, sendo que a fração leve apresentou acidez maior do que a fração pesada. Para obtenção de biocombustíveis menos ácidos utilizou-se um catalisador heterogêneo, bauxita. A seleção deste catalisador foi devido aos sítios ácidos de Lewis que ele apresenta. Sua caracterização foi realizada por meio de difração de Raios-X (DRX), espectroscopia na região do Infravermelho (FTIR) e adsorção-desorção de nitrogênio. O catalisador utilizado se mostrou bastante promissor nas reações de desoxigenação do óleo de babaçu resultando em líquidos orgânicos (LO) de acidez relativamente baixa, mostrando a ação desoxigenante do catalisador utilizado. A cromatografia gasosa dos líquidos orgânicos, obtidos no craqueamento térmico e termocatalítico, mostraram picos de C₆ a C₂₃ indicando a existência de elevadas quantidades de substâncias orgânicas nas amostras. As estruturas moleculares dos possíveis compostos gerados na pirólise do óleo vegetal, perfis termodinâmicos e os mecanismos de eliminação de hidrogênio beta e transferência de hidrogênio gama foram feitas em nível de DFT. As possíveis rotas das reações de decomposição térmica do ácido láurico, principal constituinte do óleo de babaçu, foram investigadas através dos parâmetros geométricos, comprimentos de ligações, energias envolvidas nas quebras de ligações e formação de radicais livres. Através dos radicais livres e energia livre de Gibbs investigou-se a formação dos possíveis compostos obtidos na pirólise do ácido láurico. O mecanismo de eliminação do hidrogênio beta mostrou-se mais favorável energeticamente na quebra das ligações do triacilglicerol. Diante das possíveis rotas de quebras de ligações, rearranjo dos possíveis radicais formados e produtos obtidos foi possível determinar alguns dos compostos orgânicos mais estáveis gerados na pirólise do ácido láurico.

Palavras-chave: Biocombustível, óleo de babaçu, ácido láurico, bauxita, pirólise, craqueamento térmico e craqueamento termocatalítico.

Abstract

In the present work, the thermal cracking and thermo-catalytic reactions of babassu oil were used for the production of alternative fuels. The characterization of the organic liquids (LO) was made by infrared spectroscopy (FTIR) and the acidity measurement by direct estimation of the amount of free acids. The pyrolysis products obtained without the use of catalysts had very high acidity, and the light fraction presented higher acidity than the heavy fraction. To obtain less acidic biofuels a heterogeneous catalyst, bauxite, was used. The selection of this catalyst was due to the Lewis acid sites it presents. Its characterization was performed by means of X-ray diffraction (XRD), Infrared spectroscopy (FTIR) and nitrogen adsorption-desorption. The catalyst used was very promising in the deoxygenation reactions of babassu oil resulting in organic liquids (LO) of relatively low acidity, showing the deoxygenating action of the catalyst used. Gas chromatography of the organic liquids obtained in thermal cracking and thermocatalytic showed peaks of C₆ to C₂₃ indicating the existence of high amounts of substances in the samples. The molecular structures of the possible compounds generated in the pyrolysis of vegetable oil, thermodynamic profiles and mechanisms of beta hydrogen elimination and gamma hydrogen transfer were evaluated at DFT level. The possible routes of the thermal decomposition reactions of lauric acid, the main constituent of babassu oil, were investigated through the geometric parameters, bond lengths, energies involved in bond breaks and formation of free radicals. The formation of the possible compounds obtained in the pyrolysis of lauric acid was investigated by the free radicals and free energy of Gibbs. The mechanism of elimination of the hydrogen beta is shown more favorable energetically in the breakdown of triglycerol bonds. In view of the possible routes of breaking of bonds, rearrangement of possible formed radicals and products obtained, it was possible to determine some of the most stable organic compounds generated in the pyrolysis of lauric acid.

Keywords: Biofuel, babassu oil, lauric acid, bauxite, pyrolysis, thermal cracking and thermo-catalytic cracking.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	19
1.1	Justificativa.....	19
1.2	Objetivos.....	23
1.2.1	Objetivo geral.....	23
1.2.2	Objetivos específicos.....	23
1.3	Organização do Texto.....	24
1.4	Referências bibliográficas.....	26
1	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	29
1.1	Biocombustíveis.....	29
1.2	Craqueamento térmico ou pirólise.....	30
1.3	Craqueamento termocatalítico.....	32
1.4	Bauxita.....	34
1.5	Óleos vegetais.....	38
1.6	Óleo de coco Babaçu.....	36
1.7	Cálculos computacionais.....	40
2	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	43
	CAPÍTULO I: Estudo Teórico e Experimental da pirólise de óleo de babaçu	48
	(<i>Orbignya phalerata</i>)	
	Abstract.....	49
	Resumo.....	50
1	Introdução.....	51

2	Parte experimental.....	53
2.1	Pirólise do óleo de babaçu.....	53
2.2	Caracterização do biocombustível.....	54
2.3	Detalhes computacionais.....	55
3	Resultados e discussão.....	55
3.2	Caracterização do líquido orgânico (LO).....	55
3.2.1	Análise por espectroscopia na região do infravermelho.....	55
3.2.2	Medida da acidez dos líquidos orgânicos.....	57
3.2.3	Análise cromatográfica.....	58
3.3	Dados computacionais.....	60
3.3.1	Mecanismos reacionais de quebra das ligações dos triacilglicerol.....	60
3.3.2	Parâmetros geométricos e comprimentos de ligações da molécula do ácido láurico	66
3.3.3	Energias envolvidas nas quebras das ligações do ácido láurico.....	68
3.3.4	Compostos leves formados na pirólise do óleo de babaçu.....	70
3.3.5	Principais compostos pesados formados na pirólise do óleo de babaçu.....	73
4	Conclusão.....	79
5	Referências.....	80
	CAPÍTULO II: Produção de biocombustíveis por Craqueamento termocatalítico de óleo de babaçu sobre bauxita protonada como catalisador	84
	Resumo.....	85

Abstract.....	86
1 Introdução	87
2 Parte Experimental.....	89
2.1 Preparação do catalisador.....	89
2.2 Caracterização do catalisador.....	89
2.3 Craqueamento do óleo vegetal.....	90
2.4 Caracterização do biocombustível.....	91
3 Resultados e discussão.....	92
3.1 Caracterização do catalisador.....	92
3.1.1 Análise estrutural por difração de Raios-X.....	92
3.1.2 Análise por espectroscopia na região do infravermelho.....	94
3.1.3 Isotermas de Adsorção/Dessorção de Nitrogênio.....	95
3.2 Caracterização do biocombustível.....	97
3.2.1 Índice de acidez.....	97
3.2.2 Aspectos quantitativos.....	98
3.2.3 Análise por espectroscopia na região do infravermelho.....	100
3.2.4 Análise cromatográfica.....	102
3.2.5 Propriedades Físico-químicas.....	104
4 Conclusão.....	106
5 Referências.....	107

ANEXOS.....	109
Anexo I: Estudo da porcentagem de bauxita protonada.....	111
Anexo II: Frações de biocombustíveis.....	111
Anexo III: Coordenadas cartesianas da molécula de ácido láurico a 298 K.....	112
Anexo IV: Coordenadas cartesianas da molécula de ácido láurico a 748 K.....	113
Anexo V: Possíveis radicais do ácido láurico.....	114
Anexo VI: Compostos gerados na pirólise do ácido láurico a 448 K.....	115
Anexo VII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₆.....	132
Anexo VIII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₇.....	136
Anexo IX: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₈.....	140
Anexo X: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₉.....	144
Anexo XI: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₀.....	148
Anexo XII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₁.....	152
Anexo XIII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₂.....	156
Anexo XIV: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₃.....	159
Anexo XV :Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₄.....	163
Anexo XVI: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₅.....	167
Anexo XVII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₆...	171
Anexo XVIII :Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₇	175

Anexo XIX: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₈.....	179
Anexo XX: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₉.....	183
Anexo XXI: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₀.....	187
Anexo XXII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₁...	190
Anexo XXIII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₂	192
Anexo XXIV: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₃	195
Anexo XXV: Carta de submissão do artigo “Theoretical and Experimental Study of Babassu Oil Pyrolysis (<i>Orbignya phalerata</i>)”	196
Anexo XXVI: E-mail de submissão do artigo “Thermo-catalytic cracking of babassu oil on bauxite protonated ”	197
Anexo XXVII: Publicação do livro “Avanços Científicos e Biotecnológicos”	198
Anexo XXVIII: Publicação do artigo “Catalytic deoxygenation of fatty acids over HA1MCM-41 molecular sieve	199
Anexo XXIX: Publicação do artigo “Determination of SBA-15 acidity through <i>n</i>-butil amine TPD: a theoretical and experimental study	200

INTRODUÇÃO

1. INTRODUÇÃO

1.1. Justificativa

No ano de 1960 os países produtores de petróleo se uniram com o objetivo de criar uma entidade que regulamentasse todas as ações que envolvessem extração, comercialização e exportação de petróleo (CAMPOS, 2014). Esta organização recebeu o nome de OPEP, organização dos países produtores de petróleo, dos quais faziam parte Argélia, Gabão, Indonésia, Irã, Iraque, Kuwait, Líbia, Nigéria, Catar, Arábia Saudita, Emirados Árabes Unidos, e Venezuela. Ela foi criada para combater a diminuição da procura dos derivados do petróleo já que a produção mundial, desde os anos 50, começava a exceder a procura resultando em drástica diminuição das receitas econômicas dos países produtores. Desta forma, durante os anos 60, após a criação da OPEP, os países produtores de petróleo nacionalizaram a produção petrolífera conseguindo lucros exorbitantes (MCT, 2015).

No início dos anos 70, a OPEP subiu consideravelmente o preço do petróleo e no final dos anos 70 os membros da organização voltaram a uma nova alta do preço do petróleo. Com essas medidas os países produtores de petróleo controlavam a produção, comercialização e exportação do produto resultando em enormes problemas de inflação nos países industrializados. Esses países industrializados procuraram reduzir e conter o consumo do petróleo enfraquecendo a procura do produto. A queda no preço do barril de petróleo intensificou-se após a descoberta de novos poços e devido à incapacidade dos membros da OPEP em sustentar as cotas de produções estabelecidas pela organização para manter os preços (EPE, 2016).

Após a crise do petróleo na década de 70, onde a matriz energética mundial era controlada somente por alguns países, a sociedade mundial buscou alternativas energéticas para substituição dos combustíveis fósseis. No Brasil, a primeira medida tomada para diminuir esses efeitos da crise do petróleo foi à criação do Proálcool, programa bem-sucedido de substituição em larga escala dos derivados de petróleo (LOPES, 1996).

O Programa Nacional do Álcool foi criado em 14 de novembro de 1975 pelo decreto lei nº 76.593, com o objetivo de estimular a produção do álcool, visando ao atendimento das necessidades do mercado interno e externo e da política de combustíveis automotivos. De acordo com esse decreto, a produção do álcool

proveniente da cana-de-açúcar, da mandioca ou de qualquer outra matéria prima deveria ser incentivada por meio da expansão e da oferta de matérias-primas, com especial ênfase no aumento da produção agrícola, da modernização da ampliação das destilarias existentes e da instalação de novas unidades produtoras (MELO & FONSECA, 1981).

A partir de 1975, o governo brasileiro decidiu utilizar somente a cana de açúcar na produção do etanol e subsidiou a produção do álcool em substituição à gasolina pura, com o objetivo de reduzir as importações de petróleo, então com um grande peso na balança comercial externa. Nessa época, o preço do açúcar no mercado internacional vinha decaindo rapidamente, o que tornou conveniente a mudança de produção de açúcar para álcool (MAGALHÃES et al., 1991.)

Atualmente, o Brasil vive uma nova expansão dos canaviais com o objetivo de oferecer, em grande escala, o combustível alternativo. Essa nova retomada de produção não é um movimento comandado pelo governo, como a ocorrida no final da década de 70, quando o Brasil encontrou no álcool a solução para enfrentar o aumento abrupto dos preços do petróleo que importava. Desta vez, os investimentos para ampliar novas usinas e unidades produtora de álcool são movidos por decisões da iniciativa privada, convicta de que o álcool terá, a partir de agora, um papel cada vez mais importante como combustível, no Brasil e no mundo.

A tecnologia *flex Fuel* veio dar novo fôlego ao consumo interno de álcool. Os carros que podem ser movidos à gasolina, álcool ou uma mistura dos dois combustíveis foi introduzido no País em março de 2003 (PETROBRÁS, 2005) e conquistou rapidamente o consumidor. Hoje a opção já é oferecida para quase todos os modelos das indústrias e, os automóveis bicombustíveis já substituíram toda frota de carros novos. Diante do nível elevado das cotações de petróleo no mercado internacional, a expectativa da indústria é que essa participação se amplie ainda mais. A relação atual de preços faz com que o usuário dos modelos bicombustíveis dê preferência ao álcool.

Assim como a implantação do álcool como uma alternativa aos combustíveis fósseis outro modelo de energia sustentável vem ganhando cada vez mais espaços devido à necessidade de substituição do diesel mineral em motores de combustão por compressão tais como caminhões, tratores, camionetas, automóveis, dentre outros. Desta forma, a necessidade de maiores investimentos neste tipo de matriz energética

vem incentivar a produção de biocombustíveis a partir de diversas oleaginosas que pode promover a inclusão social e diminuir a agressão ao meio ambiente (MARCIEL, 2016).

Os Biocombustíveis podem ser utilizados como uma alternativa aos combustíveis fósseis. Eles têm como características serem biodegradáveis derivados de fontes renováveis, que podem ser obtidos por diferentes processos tais como o craqueamento (JUNG et al., 2017), a esterificação (ZHANG et al., 2017) ou pela transesterificação (SMITH et. al., 2013). Esse bioproduto pode substituir total ou parcialmente o óleo diesel de petróleo em motores do ciclo diesel, podendo ser usado puro ou misturado ao diesel em diversas proporções. A mistura de 2% de biodiesel ao diesel de petróleo é chamada de B2, 3% de B3 e assim sucessivamente, até o biodiesel puro, denominado B100 (PETROBRÁS, 2005).

Um dos marcos histórico para o desenvolvimento de tecnologias de combustíveis alternativos foi o desenvolvimento do motor do ciclo diesel, pelo Dr. Rudolf Diesel, o qual apresentou sua invenção à amostra mundial em Paris, em 1900, usando óleo de amendoim como combustível. Em 1911, teria afirmado que “o motor diesel pode ser alimentado com óleos vegetais e ajudaria consideravelmente o desenvolvimento da agricultura dos países consumidores” (KNOTHE et al., 2006). No Brasil, o que vem sendo feito é muito semelhante às ideias de Rudolf, com ênfase na inclusão da agricultura familiar na cadeia produtiva do biodiesel por meio do Selo “Combustível Social”.

As indústrias de biodiesel existentes no Brasil já estão bastante consolidadas e aptas a produzir e comercializar o produto, com uma capacidade instalada de 3,9 milhões de metros cúbicos (ANP, 2015). Esse biocombustível renovável permite a economia com a importação de petróleo e diesel mineral e também reduz a poluição ambiental, além de gerar alternativas de empregos em áreas geográficas menos atraentes para outras atividades econômicas e, assim, promover a inclusão social.

O biodiesel é produzido utilizando-se como matéria prima os óleos vegetais, gordura animal e gorduras residuais os quais são constituídos de compostos de triacilglicerol, ésteres de glicerol e ácidos graxos. No entanto, os óleos vegetais apresentam-se com maior potencial para serem utilizado na produção de biodiesel. Dentre eles podem ser utilizados o óleo de mamona (NARWAL et al., 2015), o óleo de dendê (CHOEDKIATSAKUL et al., 2014), o de coco babaçu (DA SILVA et al., 2008),

o óleo de girassol (UMDU & SEKER, 2012), o óleo de algodão (PANAGIOTOPOULOS et al. 2013), o óleo de amendoim (GIUFFRE et al., 2016), dentre outros. Entre as gorduras animais destacam os óleos de peixes, o óleo de mocotó, a banha de porco (AKSOY et al., 2012). Os óleos e gorduras residuais, resultantes de processamento doméstico, comercial e industrial (EL-GENDY et al., 2014) também podem ser utilizados como matéria-prima.

Das diversas culturas permanentes que podem ser utilizadas para obtenção de matérias primas na produção de biocombustíveis, pode-se destacar a espécie nativa do babaçu (*Orbignya phalerata*) uma palmeira de múltiplos usos cujos frutos possuem grande importância econômica, sendo usados para a produção de óleo, carvão, farináceos, ácidos graxos, glicerina e compostos com potencial farmacológico. A espécie encontra-se amplamente distribuída nas regiões Norte, Nordeste e Centro Oeste do Brasil, em uma área estimada entre 13 e 18 milhões de hectares nos estados da Bahia, Minas Gerais, Ceará, Piauí, Maranhão, Tocantins, Goiás, Pará, Mato Grosso, Amazonas, Rondônia e Acre (MARCIEL, 2016).

O óleo de babaçu é formado predominantemente pela condensação entre glicerol e ácidos graxos formando ésteres, os quais são denominados triacilglicerol, e cujas cadeias carbônicas variam de 8 a 18 átomos de carbonos. Quando desoxigenados, os ácidos graxos presentes podem possibilitar a obtenção de hidrocarbonetos na faixa do diesel mineral (C_9 e C_{22}) (LIMA, 2007). O óleo de babaçu é constituído por 85% de ésteres de ácidos graxos saturados, característica excelente para a produção de biocombustível por apresentar alta saturação, resistência à oxidação além das reações de produção dos biocombustíveis serem simplificadas devido ao fato dos óleos constituintes, em maior proporção, terem cadeias curtas (MOREIRA, 2013).

Como uma alternativa viável e que pode diminuir a utilização do diesel fóssil seria a realização do craqueamento térmico e termocatalítico do óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) sobre catalisador sólido, bauxita, capaz de facilitar as reações de descarboxilação e desoxigenação dos ácidos graxos existentes no óleo de babaçu obtendo um biocombustível com propriedades bastante semelhantes com as dos combustíveis de origens fósseis e que possam ser utilizados em misturas com o diesel fóssil para utilização em motores do ciclo diesel.

Como alternativa no entendimento das reações de formação dos produtos do craqueamento do óleo de babaçu, cálculos teóricos em nível de teoria do funcional da densidade (DFT) podem ser usados para avaliar as estruturas moleculares das espécies envolvidas nas reações dos ácidos graxos insaturados e saturados, comumente encontrados no óleo de babaçu, além de obtenção de perfis de energias termodinâmicas, dos possíveis compostos gerados na pirólise, número de insaturações e a presença ou não de outras funções nas moléculas.

1.2. Objetivos

1.2.1 Objetivo geral

Obter biocombustíveis renováveis a partir do craqueamento térmico e termocatalítico do óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) utilizando o catalisador sólido de bauxita em um sistema de destilação simples e prever os possíveis produtos através de cálculos DFT.

1.2.2 Objetivos específicos

- ❖ Caracterizar o catalisador sólido de bauxita por difração de raios-X (DRX), espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), adsorção/dessorção de nitrogênio.
- ❖ Realizar craqueamento térmico do óleo de babaçu em sistema de destilação simples.
- ❖ Realizar craqueamento termocatalítico de óleo de babaçu em sistema de destilação simples utilizando bauxita como catalisador.
- ❖ Caracterizar as amostras de biocombustíveis oriundas do craqueamento térmico e termo-catalítico do óleo de babaçu por espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier, aspectos quantitativos, e por medidas do índice de acidez.
- ❖ Identificar, por cromatografia gasosa, os compostos orgânicos presentes nas amostras dos biocombustíveis e determinar suas seletividades nos craqueamentos térmico e termocatalíticos.

- ❖ Caracterizar o biocombustível pelo índice de acidez, pela Viscosidade cinemática 40 °C, Massa específica a 20 °C, Índice de cetano, Corrosividade ao cobre, Teor de enxofre, Índice de iodo, Índice de peróxido e Estabilidade oxidativa.
- ❖ Investigar, por meio de cálculos computacionais, o rompimento das ligações do ácido de maior quantidade no óleo de babaçu, ácido láurico, e propor a formação dos radicais existentes no sistema de craqueamento.
- ❖ Investigar, por meio de cálculos computacionais, a formação dos hidrocarbonetos gerados no craqueamento do óleo de babaçu.
- ❖ Elucidar as possíveis rotas de formação de produtos do craqueamento do ácido laurico usando cálculos DFT.

1.3. Organização do Texto

Este trabalho é composto por cinco capítulos, sumarizados a seguir:

- ❖ O Capítulo 1 mostra os objetivos que conduziram ao desenvolvimento deste trabalho, dada à necessidade de se estudar os combustíveis alternativos como uma possibilidade de substituição aos combustíveis fósseis, como os biocombustíveis, e obtê-los de uma oleaginosa regional de fácil colheita e bom rendimento de óleo. Além disso, apresenta a justificativa e os objetivos gerais e específicos do trabalho.
- ❖ O Capítulo 2 apresenta os fundamentos teóricos necessários para a realização deste trabalho, tais como os biocombustíveis, craqueamento térmico ou pirólise, craqueamento termocatalítico, bauxita, óleos vegetais e óleo de coco. Além desses pontos são apresentadas as simulações computacionais na geração de produtos nos combustíveis alternativos e as matérias-primas frequentemente utilizadas e os subprodutos obtidos no processo. As tecnologias utilizadas para a obtenção de biodiesel também estão descritas neste capítulo, enfatizando nos processos de craqueamento termocatalítico, objetivo da tese.
- ❖ O Capítulo 3 apresenta o artigo “Craqueamento térmico do óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*): um estudo teórico e experimental”. Neste artigo são apresentados os dados experimentais e teóricos do processo de craqueamento

térmico do óleo de babaçu assim como a previsão das possíveis rotas de geração dos compostos orgânicos obtidos.

- ❖ O Capítulo 4 apresenta o artigo “produção de biocombustíveis por craqueamento termocatalítico de óleo de babaçu utilizando bauxita protonada com catalisador”. No presente trabalho, a reação de craqueamento térmico do óleo de babaçu, na presença de Catalisadores heterogêneos (bauxita calcinada e bauxita protonada), foi utilizada para produção de biocombustíveis alternativos que mostra que o biocombustível sintetizado pode ser usado misturado ao diesel mineral e proporcionar uma diminuição do teor de enxofre, que atua com precursor de óxidos poluentes.
- ❖ Os anexos mostram os resultados suplementares para um maior entendimento de todas as medidas experimentais e teóricas que foram realizadas e não foram utilizadas na confecção dos artigos apresentados na tese.

1.4. REFERÊNCIAS

- ANP. **Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Combustível**. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br>>. Acesso em: 18 set. 2017.
- AKSOY, L.; TUTUNCU, H.; ALPER, Y. & BUYUKBEN, A. Bioelement status with oral administration of fish oil methyl ester and diesel fuel in male rats. **Biological Trace Element Research**, v. 149, n. 1, p. 78-85, 2012.
- CAMPOS, A. F. **Indústria do petróleo: desdobramentos e novos rumos da reestruturação sul-americana dos anos 90**. 2. ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2014, 428 p.
- CHOEDKIATSAKUL, I.; NGAOSUWAN K.; CRAVOTTO, G.; ASSABUMRUNGRAT, S. Biodiesel production from palm oil using combined mechanical stirred and ultrasonic reactor. **Ultrason Sonochem**, v. 21, n. 4, p. 1585-1591, 2014.
- EL-GENDY, N.; HAMDY, A.; ABU AMR, S. S. An investigation of biodiesel production from wastes of seafood restaurants. **International Journal of Biomaterials**, v. 2014, p. 609-624, 2014.
- EPE. **Balanco Energético Nacional**. Disponível em: <<http://www.mme.gov.br>>. Acesso em 20 de abril. 2016.
- GIUFFRE, A. M.; TELLAH, S.; CAPOCASALE, M.; ZAPPIA, C.; LATATI, M.; BADIANI, M. & OUNANE, S. M. Seed Oil from Ten Algerian Peanut Landraces for Edible Use and Biodiesel Production. **Journal of Oleo Science**, v. 65, n. 1, p. 9-20, 2016.
- JUNG, J. M.; SANG. S. R. L.; TAEWOO. L.; DANIEL. C. W.; TSANG. E.; EILHANN. E. K. Biodiesel synthesis using chicken manure biochar and waste cooking oil. **Bioresource Technology**, v. 244, p. 810-815, 2017.
- KNOTHE, G.; GERPEN, J. V.; KRAHL, J.; RAMOS, L. P. **Manual do Biodiesel**. São Paulo: Blücher, P. 352, 2006.
- LIMA, J. R. O.; SILVA, R. B.; SILVA, C. M. Biodiesel de babaçu (*Orbignya phalerata*) obtido por via etanólica. **Química Nova**, v. 30, n. 03, p. 600-603, 2007.
- LOPES, L. A. Vinte anos de Proálcool: avaliações e perspectivas. **Rev. Economia & Empresa**, v. 3, n.2, p. 49-57, 1996.
- MAGALHÃES, J. P. de A.; KUPERMAN, N. & MACHADO, R. C. **Proálcool: uma avaliação global**. Rio de Janeiro: Astel, 1991.
- MARCIEL, A. P. **Biocombustíveis de babaçu: ensaios técnicos sobre oportunidades de produção de biocombustíveis a parti do coco babaçu**. São Luís: Copyright, 2016, 434 P.
- MELO, F. H. & FONSECA, E. G. **Proálcool energia e transportes**. São Paulo: Pioneira: FIPE, 1981.

MCT. **O Programa nacional de produção e uso de biodiesel**. Brasília. Disponível em: <<http://www.biodiesel.gov.br>>. Acesso em: 20 de dezembro 2015.

MOREIRA, E. Óleos vegetais e o estresse térmico. **Revista Analytica**. v. 134, n. 48, p. 40-48, 2013.

NARWAL, S. K.; SAUN, N.K; DOGRA, P.; CHAUHAN, G.; GUPTA, R. Production and characterization of biodiesel using nonedible castor oil by immobilized lipase from *Bacillus aerius*. **BioMed Research International**, v. 2015, p. 2819-2834, 2015.

PANAGIOTOPOULOS I. A; PASIAS S; BAKKER RR; DE VRIJE T; PAPAYANNAKOS N.; CLAASSEN P. A.; KOUKIOS E. G. Biodiesel and biohydrogen production from cotton-seed cake in a biorefinery concept. **Bioresource Technology**, v. 136, p. 78-86, 2013.

PETROBRÁS. **Livro de Especificações e Funcionamento de Combustíveis**. Curso de Formação de Analista de Comércio e Suprimento, 2005.

RONDINELLY B. S; ALCIDES F. L. N.; LUCAS S. S. S.; JOSÉ R. O. L.; MARIANA H. C.; JOSÉ R. DOS S. J.; GERALDO M. L.; EDMILSON M. .M.; CARLA V. R. M. Catalysts of Cu(II) and Co(II) ions adsorbed in chitosan used in transesterification of soy bean and babassu oils - a new route for biodiesel syntheses. **Bioresource Technology**, v. 99, n. 15, p. 6793-8, 2008.

SMITH, S M.; CHUTIMA O.; VARARUT W.; CHRISTOPHERB.; SMITH S., PRADUDNET K.; SUPAKORN B. Transesterification of soybean oil using bovine bone waste as new catalyst. **Bioresource Technology**, v. 143, p. 686-90, 2013.

UMDU, E. S.; SEKER, E. Transesterification of sunflower oil on single step sol-gel made Al₂O₃ supported CaO catalysts: effect of basic strength and basicity on turnover frequency. **Bioresource Technology**, v. 106, p. 178-181, 2012.

ZHANG, Q.; Fangfang W.; Yutao Z.; Fuhua W.; Peihua M.; Wei Z. Y.; Zhao H. C.;. Biodiesel Production by Catalytic Esterification of Oleic Acid over Copper (II)-Alginate Complexes. **Journal of Oleo Science**, v. 66, n. 5, p. 491-497, 2017.

REFERENCIAL TEÓRICO

1. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

1.1. Biocombustíveis

O biodiesel é um biocombustível alternativo que pode ser utilizado em veículos pesados como caminhões, ônibus, veículos de tração 4×4, barcos e qualquer outro veículo com motor do ciclo diesel. Obtido a partir de fontes renováveis como óleos vegetais e gorduras animais, é um combustível que emite menos poluentes que o diesel mineral, (ZHU et al., 2010; TSAI et al., 2014). Surgiu em meados do século XX como uma proposta de combustível que veio substituir os combustíveis fósseis (MME, 2017). A queima de combustíveis fóssil emite gases poluentes na atmosfera como monóxidos de carbono, óxidos nítricos, dióxidos de nitrogênio, óxidos sulfurosos e diversos hidrocarbonetos voláteis além de compostos que podem interagir entre si ou sofrer fotólise, formando os poluentes chamados secundários, como ozônio, nitrato de peroxiacetila, entre outros que provocam a degradação do meio ambiente, prejudicando a vida no planeta (SANTOS et al., 2009).

O biocombustível é renovável, biodegradável e considerada uma fonte de energia não agressiva ao meio ambiente. Sua obtenção pode ser realizada pelos processos de craqueamento térmico ou pirólise, que consiste na quebra das moléculas do óleo (triacilglicerol) formando hidrocarbonetos e compostos oxigenados, a altas temperaturas, de composição semelhante ao do diesel mineral (LLAMAS, et al. 2012).

O biodiesel foi misturado à gasolina com a finalidade de substituir a tetraetila de chumbo que era utilizada como aditivos da gasolina na reação de combustão, porém causava sérios prejuízos ao meio ambiente e a saúde da população.

No Brasil, a mistura do biocombustível teve início em 2004, em caráter experimental, entre 2005 e 2007 a comercialização passou a ser voluntária no teor de 2%. Obrigatoriamente veio no artigo 2º da lei 11.097/2005, que introduziu o biodiesel na matriz energética brasileira. Em janeiro de 2008, entrou em vigor a mistura legalmente obrigatória de 2% (B2), em todo o território nacional. Com o amadurecimento do mercado brasileiro, esse percentual foi sucessivamente ampliado pelo CNPE até o atual percentual de 9,0%. Com a lei 13.263/2016 que alterou a lei nº 13.033/2014 determinando um cronograma de aumento do teor de biocombustível conforme apresentado na Tabela 1 (ANP, 2016).

Tabela 01. Evolução do percentual do teor de biocombustível presente no diesel fóssil no Brasil.

Anos	Percentual (%)
2003	Facultativo
Janeiro de 2008	2
Julho de 2008	3
Julho de 2009	4
Janeiro de 2010	5
Agosto de 2014	6
Novembro de 2014	7
Até março de 2017	8
Até março de 2018	9
Até março de 2019	10

Os benefícios desta energia alternativa são muitos, pois além de ser uma tecnologia limpa e não poluente, traz vantagens econômicas, sociais e apresenta melhores características físico-químicas do que os combustíveis convencionais.

1.2. Craqueamento térmico ou pirólise

O processo de craqueamento térmico de óleos vegetais ou gordura animal consiste no rompimento das ligações dos triacilglicerol que são moléculas grandes, em compostos de cadeias carbônicas menores. Nesse processo, o rompimento das ligações envolve um grande número de reações, devido às variedades de estruturas dos triacilglicerol e das várias possibilidades de reações sucessivas que dependem das condições reacionais (ALENCAR et al.,1983).

Estudos detalhados do processo de craqueamento térmico mostram duas etapas diferentes e sucessivas (IDEM, et al.,1996). Na primeira etapa as ligações dos triacilglicerol são rompidas para formação dos ácidos carboxílicos e do glicerol em um processo denominado de craqueamento primário. Esse processo depende da composição do óleo ou gordura e, é um processo governado por reações radicalares, predominantemente térmico e que ocorre quase instantaneamente quando o óleo atinge uma temperatura específica de 300 °C (LANDIS et al.,1992).

A segunda etapa, denominada de craqueamento secundário, caracteriza-se pelo rompimento das ligações dos ácidos carboxílicos formando diversos tipos de compostos orgânicos, dentre eles os hidrocarbonetos e os compostos oxigenados. Os compostos formados podem ser separados nas fases gasosas, aquosa e substâncias sólidas denominadas de coque (WILLIAMS & HORNE, 1995; IDEM et al., 1996). A fase gasosa pode ser constituída por diversos compostos de cadeias curtas dentre eles os hidrocarbonetos, compostos oxigenados além do CO e CO₂ (WILLIAMS & HORNE, 1995; ADEBANJO et al., 2005). Essa fase pode ser decantada e separada em uma fase orgânica que pode apresentar compostos bastante semelhantes aos compostos do diesel mineral, gasolina e querosene (LIMA et al., 2004; OOI et al., 2004a; TWAIQ et al., 2004).

Os processos de craqueamentos térmicos vêm sendo investigados por diversos pesquisadores, usando diferentes tipos de óleos e gorduras, como óleo de girassol (ZHAO et al., 2015), óleo de soja (XU, et al, 2010), óleo de canola e colza (, SHI, et al., 2016), óleo de macaúba (FORTES et al., 2004), óleo de palma (TAMUNAIDU et al., 2007), óleo de babaçu (ALENCAR et. al., 1983), banha de porco (ADEBANJO et. al., 2005), óleo de Buriti (LUZ JR et al., 2011) e óleo de fritura (JUNG et al., 2017), dentre outros.

O processo de craqueamento térmico mostra-se mais simples que os outros processos: fermentação, esterificação e transesterificação. O craqueamento térmico pode ser simplesmente térmico, ou associado ao processo catalítico (craqueamento termocatalítico) e proporciona a obtenção de três frações líquidas similares à gasolina, querosene e ao diesel, e de uma fração gasosa, ambas praticamente isentas de metais pesados, nitrogênio e enxofre. Entretanto, alterações na temperatura, presença e natureza do catalisador e co-alimentação com vapor ou hidrogênio, provocam mudanças significativas na distribuição dos produtos (WILLIAMS, et al. 1995; IDEM et al, 1996).

1.3. Craqueamento termocatalítico

O craqueamento termocatalítico de óleos vegetais e gorduras animais é feito na presença de catalisadores, a fim de favorecer determinadas reações e alterar a composição final dos produtos, resultando em seletividades e mudanças significativas na distribuição dos produtos do craqueamento. Diversos catalisadores têm sido estudados para a obtenção de produtos que se assemelhem a composição do diesel mineral utilizando como matéria prima óleo vegetal e gordura animal (MAHER & BRESSLER, 2007; LIU et al., 2014; LUZ JR et al., 2011; OOI & BHATIA, 2007).

O uso de catalisadores em processo de obtenção de biocombustíveis a partir de óleos e gorduras, pode resultar na otimização do tempo de reação química e também induzir os reagentes para formação de maiores alíquotas dos produtos mais desejados, pela formação de novos intermediários e pela seletividade química inerente a cada tipo de catalisador. O grau de acidez, a porosidade do material e outros fatores físico-químicos ligados aos materiais usados como catalisadores ou precursores catalíticos contribuem para a seletividade verificada após análises químicas dos produtos de craqueamento (MA et al., 1999; MAHER. et al.; 2007; LHAMAS. et al., 2013).

Durante o processo de craqueamento térmico o aquecimento do sistema é responsável pelas quebras das primeiras ligações das moléculas dos óleos vegetais e gorduras animais. Os catalisadores agem somente em reações posteriores, craqueamento secundário, e nas reações de desoxigenação e aromatização (IDEM et al., 1997; MAHER & BRESSLER, 2007).

Catalisadores com estruturas de poros bem definidas, com sítios ácidos e elevada estabilidade térmica e hidrotérmica são mais seletivos para frações líquidas semelhantes à gasolina e ao diesel mineral (OOI et al., 2007; MAHER & BRESSLER, 2007). Catalisadores sólidos com elevados números de sítios ácidos de *Bronsted*, no interior dos poros, são capazes de impulsionar a desoxigenação dos ácidos graxos dos óleos vegetais e tendem a favorecer a formação, preferencialmente de hidrocarbonetos aromáticos, alifáticos cíclicos e lineares, com tamanho de cadeia próxima a faixa da gasolina (KIM et al., 2011; KIMURA, et al., 2012; OOI et al., 2007; MAHER & BRESSLER, 2007).

Estudos têm sido feitos e mostram que metais como terras raras ou alumínio podem ser incorporados na estrutura dos catalisadores proporcionando aumento da estabilidade térmica e hidrotérmica, além de favorecer as propriedades catalíticas do

material, promovendo a formação de sítios ácidos (ARAUJO & JARONIEC, 1999; SHAO et al., 2005). No entanto, a incorporação excessiva dos metais na estrutura dos catalisadores pode provocar a distorção da estrutura cristalina do mesmo, diminuindo sua eficiência catalítica. (OOI et al., 2007).

Estudos de inúmeros catalisadores sólidos que facilitam as reações de desoxigenação dos ácidos graxos, via sítios ácidos, têm sido feitos, dentre eles zeólitas (IDEM et al., 1997; LAZDOVICA et al., 2016) materiais mesoporosos (LUZ et al., 2011; OOI et al., 2004), sílicas e aluminas, amorfos (LEE et al., 2014; RIBEIRO, 2006).

Em catalisadores amorfos os processos secundários são intensificados devido ao tamanho das moléculas de hidrocarbonetos que dificultam a difusão dessas moléculas pelos poros do catalisador além de serem adsorvidas nos sítios ácidos do catalisador resultando no aumento do processo de desoxigenação e diminuição da fase líquida orgânica (WILLIAMS & HORNE, 1995; IDEM et al., 1997).

No craqueamento termocatalítico de um sólido cristalino o craqueamento secundário é parcialmente inibido provocando aumento na quantidade da fração referente ao líquido orgânico e favorecendo as reações de desoxigenação. Isso se deve a facilidade de difusão das moléculas oriundas do craqueamento primário dos triacilglicerol pelos canais de poros bem estruturados dos referidos sólidos que provoca a diminuição da intensidade do craqueamento secundário e conseqüente aumento do tamanho médio das cadeias carbônicas dos hidrocarbonetos, o qual também é favorecido pelo aumento do diâmetro médio dos poros. Além disso, a formação de aromáticos e alifáticos cíclicos é favorecida nos sítios ácidos do interior dos poros ((WILLIAMS & HORNE, 1995; IDEM et al., 1997).

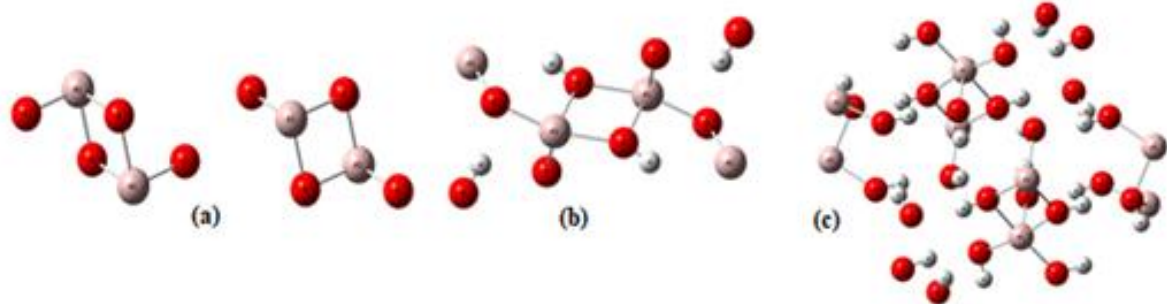
Através dos estudos do craqueamento de óleos vegetais e gordura animal percebe-se que os produtos obtidos são totalmente influenciados pelas condições do processo de craqueamento, tais como tipo de sistema, matéria prima utilizada, gradiente de temperatura do processo, tempo de reação e características do catalisador utilizado. Desta forma, a seletividade para o tipo de produtos obtidos dependem do controle e otimização de todas as variáveis do processo de craqueamento utilizado.

1.4. Bauxita

A bauxita é uma rocha de coloração avermelhada e rica em alumínio. Foi descoberta por Berthier em 1821, no sul da França. Esta rocha é constituída por óxidos de alumínio tais como gibbsita $\text{Al}(\text{OH})_3$, boehmite $\gamma\text{-AlO}(\text{OH})$ e o diásporo $\alpha\text{-AlO}(\text{OH})$, misturados com os dois óxidos de ferro (goethita e a hematita), além de caulinita, argila mineral e pequenas quantidades de TiO_2 , anatase (MME, 20015). É a principal fonte natural do alumínio, o terceiro elemento em abundância na crosta terrestre, depois do oxigênio e do silício. A maior ocorrência da bauxita apresenta-se na forma combinada com outros elementos principalmente com o oxigênio o qual forma a alumina, Al_2O_3 , que representa aproximadamente 40% da bauxita (JOÃO et al., 2008; Santos, 1975).

Os minerais mais importantes existentes na bauxita são a gibbsita, a boehmita e o diásporo que apresentam como principais impurezas a caulinita, o quartzo, a hematita, a goethita, o rutilo e o anatásio. A gibbsita existe na forma cristalina e a boehmita e o diásporo na forma de monohidratado, Figura 1, (CORBATÓ et al. 1985; SCHMETZER et al., 1979; CATTI et al., 1991). A bauxita também pode ser classificada como bauxita metálica com 12% de óxido de ferro, Fe_2O_3 , na sua constituição e bauxita não metálica com 2,5% de óxido de ferro, Fe_2O_3 , na sua constituição (JOÃO et al.,2008).

Figura 01. Estrutura em 3D dos principais constituintes da bauxita: (a) bohemita, (b) diásporo e (c) gibbsita. Átomos lilás representam os átomos de alumínio, vermelho os átomos de oxigênio e em branco os hidrogênio.



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

A bauxita tem uma importância fundamental na vida do ser humano haja vista que o alumínio é o principal produto obtido com esta rocha. Constitui uma contribuição chave à eficiência de veículos automotores, bem como nos trens de alta velocidade e, finalmente, na indústria naval, dentre outras. Há, também, a produção de ligas metálicas e/ou equipamentos resistentes à corrosão. O alumínio encontra aplicação, com sucesso,

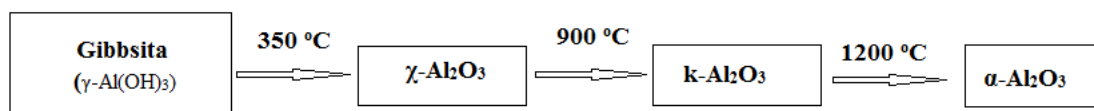
na produção de embalagens para gêneros alimentícios de qualidade, eliminando desperdícios, reduzindo peso e economizando combustível no transporte, além de minimizar a emissão de efluentes. Em todo o mundo, a transmissão aérea de energia elétrica a grandes distâncias é feita por meio de cabos de alumínio (GRJOTHEIM, et al., 1988).

A produção mundial de bauxita em 2016 foi de 370 milhões de toneladas, onde o Brasil é o terceiro maior produtor com 37 milhões de toneladas com um percentual de 14% da produção mundial. A Austrália é o maior produtor, com uma produção de 110 milhões de toneladas, que corresponde aproximadamente 30% da produção mundial, seguido da china com uma produção de 77 milhões de toneladas, correspondendo a aproximadamente 21% da produção mundial (AMB, 2016).

Para aplicação industrial a bauxita “in natura” não tem utilidade sendo necessária uma etapa de calcinação a 1200 °C. Na calcinação ocorre uma completa eliminação de impurezas e águas presentes no mineral, além de formar as fases alfa-alumina e mulita as quais dão a refratariedade necessária nas aplicações industriais, densidade e consistência do material. (AQUINI, 2007). Nesse processo de calcinação da bauxita, elas sofrem várias modificações químicas e físicas. A fase principal, gibbsita, é desidratada a 350 °C, originando óxidos de alumínio metaestáveis, Figura 02.

Em temperaturas abaixo de 350 °C uma pequena quantidade de gibbsita (γ -Al(OH)₃) é transformada em boehmita (γ -AlO(OH)), que contribuirá na formação de alumínio metaestáveis em temperatura acima de 530 °C. Entre 900 °C e 1000 °C, inicia-se a transformação destes óxidos em alfa-alumina através de reações de estado sólido que se completam em temperaturas superiores a 1100 °C Figura 02 (PASCOAL, et al., 2000).

Figura 02. Reação em estado sólido para formação da alfa-alumina a partir da gibbsita.



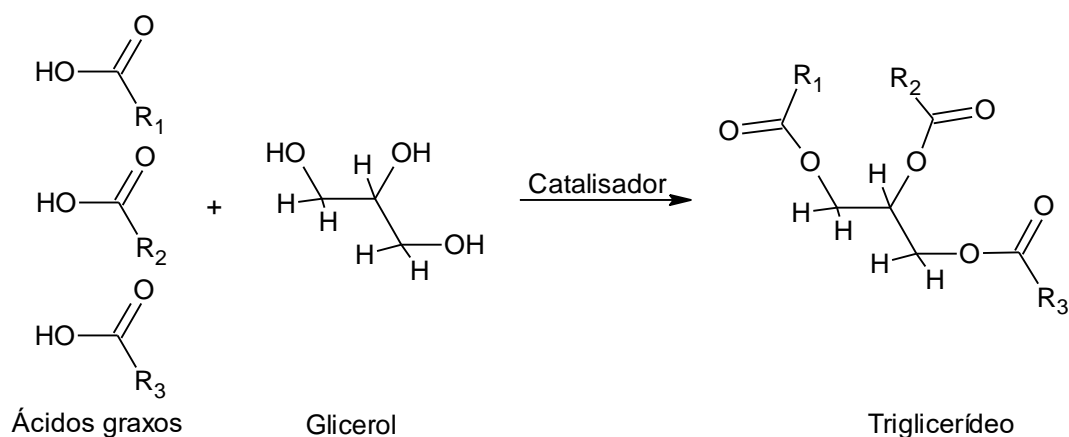
Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Os ácidos inorgânicos podem ser utilizados em tratamentos químicos de catalisadores heterogêneos a fim de melhorar as propriedades químicas, físicas e texturais. Desta forma, os catalisadores tratados com ácidos inorgânicos podem ser utilizados como catalisadores ácidos e apresentam uma melhor atividade catalítica podendo ser utilizados em processos de craqueamentos termocatalíticos com uma melhora considerável da acidez dos produtos obtidos e frações orgânicas bastante semelhantes às do diesel mineral. Os ácidos clorídricos e os ácidos sulfúricos são os mais utilizados na ativação ácida de catalisadores heterogêneos. Essa ativação proporciona aumento da área específica provocada pela distorção da estrutura original do sólido bem como pela criação de mesoporos e eliminação de diversas impurezas contidas no material. Desta forma, a ativação ácida provoca a substituição de cátions alcalinos e alcalinos terrosos, que podem está presente na estrutura do sólido. Portanto, a aplicação dos tratamentos ácidos de catalisadores heterogêneos tem sido utilizada com o objetivo de se obter catalisadores com maior porosidade e acidez, propriedades estas que melhoram consideravelmente a atividade catalítica de catalisadores sólidos ácidos (FERNANDES et al. 2007; SANTOS, 1975).

1.5. Óleos vegetais

Os óleos vegetais representam um dos principais produtos extraídos de plantas, são compostos principalmente por ácidos graxos e seus derivados, são formados pela reação do glicerol com três moléculas de ácidos graxos, Figura 03 (COSTA NETO, 2000).

Figura 03. Reação de formação dos triacilglicerol



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Os ácidos graxos são ácidos carboxílicos de cadeia longa, livres ou esterificados e podem ser saturados ou insaturados. Os ácidos graxos saturados possuem apenas ligações simples entre os carbonos e possuem pouca reatividade química. Já os ácidos graxos insaturados contêm uma ou mais ligações duplas na cadeia carbônica; são mais reativos e mais suscetíveis a termo-oxidação (MOREIRA, 2013). Diferem entre si no número de carbonos e de insaturações que constituem sua cadeia. Existem diversos ácidos graxos conhecidos na natureza; alguns são citados na Tabela 02, com seus correspondentes números de carbonos e insaturações (SANTOS, 2007).

Tabela 02 - Número de átomos de carbono e insaturações de alguns ácidos graxos conhecidos na natureza.

Ácido Graxo	Nº de carbonos (nº de insaturações)
Ácido Cáprico	10 (0)
Ácido Láurico	12 (0)
Ácido Palmitoleico	14 (0)
Ácido Oléico	18 (1)
Ácido Linoléico	18 (2)
Ácido Linolênico	18 (3)

O tamanho da cadeia e o número de ligações duplas entre os carbonos que formam os ácidos graxos estão diretamente relacionados com as propriedades físicas e químicas desses compostos. Quanto maior o número de insaturações e menor cadeia carbônica, menor é o ponto de fusão de um ácido graxo (MOREIRA et al., 2013).

Os triacilglicerol que se apresentam no estado líquido a temperatura ambiente são denominados de óleos, apresentando alta quantidade de ácidos graxos insaturados. Os triacilglicerol que se apresentam no estado sólido a temperatura ambiente são denominados de gorduras havendo uma elevada quantidade de ácidos graxos saturados. Os óleos vegetais ainda apresentam em sua composição ácidos graxos livres, fosfolípidos, esteróis e tocoferóis compondo de 0,5 a 3,0% da maioria dos óleos vegetais “*in natura*” (MARCIEL et al., 2016).

1.6. Óleo de coco Babaçu

O babaçu (*Orbignya phalerata*) é uma palmeira de grande porte (até 20m), como mostra a Figura 04, de tronco cilíndrico e extremidade em formato de copa. O óleo de babaçu é formado predominantemente da condensação entre glicerol e ácidos graxos formando ésteres, os quais são denominados triacilglicerol, e cujas cadeias carbônicas variam de 8 a 18 átomos de carbonos. Quando desoxigenados, os ácidos graxos presentes podem possibilitar a obtenção de hidrocarbonetos na faixa do diesel mineral, C₉ e C₂₂, (LIMA et al., 2007).

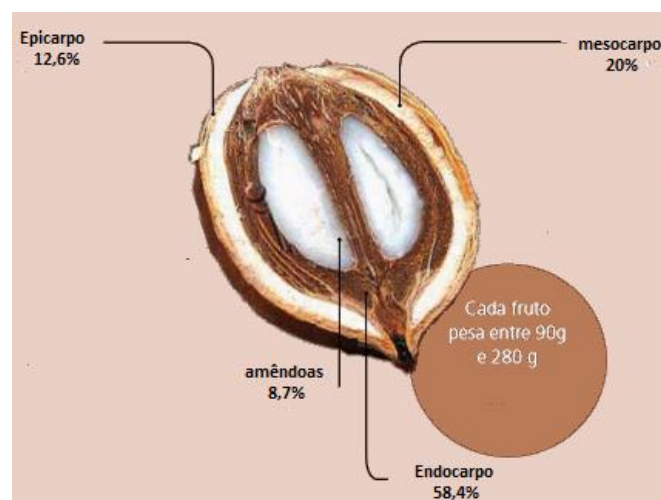
Figura 04- Palmeiras de coco babaçu (*Orbignya phalerata*).



Fonte: <http://aemcrural.blogspot.com.br> , 2015

Os frutos do coco babaçu se apresentam em formato elipsoidal, mais ou menos cilíndrico e são constituídos de epicarpo, que representa aproximadamente 12% da massa do coco (camada mais externa e bastante rija), mesocarpo, representam 20% (rico em amido), endocarpo, representa 54% (rijo) e amêndoas que representam 9% (de 3 a 4 por fruto), Figura 05, o tamanho e a composição média de fruto do coco babaçu tem aproximadamente 8 a 15 cm de comprimento.

Figura 05. Tamanho e Composição média do Fruto do Babaçu.



Fonte: TEIXEIRA, 2002

O óleo de babaçu é constituído por 85% de ésteres de ácidos graxos saturados, característica excelente para a produção de biodiesel, cuja composição química estar ilustrada na Tabela 03 (LIMA et al., 2007).

Tabela 03. Composição química do óleo de babaçu.

Ácido Graxos	Contribuição percentual (%)
Ácido Caprílico (C8:0)	5,0
Ácido Cáprico (C10:0)	6,0
Ácido Láurico (C12:0)	44,0
Ácido Mirístico (C14:0)	17,0
Ácido Palmítico (C16:0)	8,0
Ácido Esteárico (C18:0)	4,5
Ácido Oléico (C18:1)	14,0
Ácido Linoléico (C18:2)	2,0

Pelos valores de composição apresentados na Tabela 03 percebe-se que o óleo de coco babaçu é constituído basicamente por ácidos graxos de cadeias saturadas onde o ácido láurico aparece em maior quantidade. Esse ácido é uma substância que apresenta alguns benefícios à saúde do ser humano, tais como equilibrar a flora intestinal, combater os fungos, diminuir a inflamação intestinal, melhorar o funcionamento da tireoide, prevenir o envelhecimento precoce e estimular a medula óssea a formar mais linfócitos, aumentando a imunidade do corpo (MARCIEL et al., 2016).

1.7. Cálculos computacionais

Em 1925, o físico austríaco Erwin Schrödinger marcou o início da Mecânica Quântica moderna ao propor a famosa equação que hoje tem o seu nome. Esta equação determina a função de onda quântica de um sistema de átomos, moléculas e sólidos que contém todas as informações necessárias para determinar o estado do sistema equação 01. Nesta equação, m é a massa da partícula, \hbar^2 é a constante de Planck reduzida ao quadrado, ∇^2 é o laplaciano da função de onda, Ψ é a função de onda da partícula, i é um número imaginário, dado pela raiz quadrada de -1 , V é o potencial que age sobre a partícula e ∂t é a variação da função de onda com o tempo (MORGON et al., 2007).

$$[(-\hbar^2/2m)\nabla^2\Psi+V\Psi=i\hbar(\partial\Psi/\partial t)] \quad (\text{eq.01})$$

A resolução exata da equação de Schrödinger só é possível para sistemas com um elétron, como o átomo hidrogênio. Desta forma, os físicos passaram vários anos tentando descobrir formas de aproximação para resolver a equação de Schrödinger para sistemas multieletrônicos.

O norte-americano de origem austríaca Walter Kohn juntamente com o seu aluno francês Pierre Hohenberg publicou, em 1964, um artigo reformulando a mecânica quântica (HOHENBERG et al., 1964). Nessa reformulação as equações de onda baseavam-se na densidade eletrônica, e não simplesmente em funções de onda. Esta densidade, normalmente representada por $\rho(r)$, mede a probabilidade de encontrarmos um elétron no ponto de coordenada. Assim para determinar na prática $\rho(r)$ Kohn, mas agora com Lu Sham publicaram alguns artigos que determinaram a base da denominada Teoria do Funcional da Densidade (DFT, de *Density Functional Theory*) (KOHN et al., 1965). Esta teoria aliava uma extrema simplicidade a uma precisão notável. Além disso, o desenvolvimento dos computadores permitiu que as equações-chave desta teoria, as equações de Kohn-Sham, pudessem ser facilmente resolvidas para sistemas cada vez mais complexos.

A teoria do funcional da densidade foi de grande utilidade na determinação de propriedades do estado sólido como as propriedades de metais e semicondutores. Para os cálculos de átomos, moléculas e transições eletrônicas o químico inglês John Pople foi fundamental, ao incluir a DFT no seu programa de computador GAUSSIAN, o programa de Química Quântica mais usado em todo o mundo. A teoria do funcional da

densidade, DFT, permitiu que os computadores fossem usados para nos ajudar a compreender e a prever as propriedades dos átomos, moléculas e sólidos. É também uma ferramenta fundamental em áreas tão diversas como a nanotecnologia, a biotecnologia, o desenvolvimento de novos materiais (ANDZELM, et al., 1984).

A modelagem molecular utiliza técnicas e programas de computadores para investigar estrutura da matéria de nanotecnologias, que utiliza a estrutura eletrônica de átomos, moléculas e interações moleculares. Vários trabalhos têm sido publicados envolvendo cálculos de geometrias moleculares (ELSHAKRE, 2015; GIRI *et al.*, 2015), reatividades químicas (Karamzadeh *et al.*, 2014) e propriedades físicas de substâncias (MUGRIDGE, et al. 2012; RAHM & BRINCK, 2010).

A química computacional utiliza-se diferentes métodos teóricos que são classificados como semi-empíricos (SE), *Ab Initio* e o método da teoria do funcional da densidade, DFT (FRISCH, et al., 2016).

Nos métodos *Ab Initio* os resultados podem ser bem precisos quando se utiliza moléculas com poucos átomos e elétrons, sendo inviável para moléculas grandes e sistemas multieletrônicos. Por outro lado, os métodos semi-empíricos e DFT podem realizar cálculos com estruturas eletrônicas de moléculas grandes. Desta forma, o método a ser utilizado em um determinado sistema deve levar em consideração custo do cálculo, velocidade e memória computacional (FRISCH, et al., 2016).

Nos métodos *Ab Initio* são aplicadas aproximações as quais podem melhorar o resultado convergente do cálculo. Nestes métodos somente os dados experimentais utilizados são os das constantes física. O método mais simples, e mais utilizado de cálculos *Ab Initio* é o método de Hartree-Fock, HF. Neste método, há a divisão dos orbitais moleculares, OM, em dois grupos, os quais foram definidos como alfa e beta, os quais são ocupados separadamente por elétrons com apenas um determinado spin. (LEWARS, 2016)

Nos métodos (SE) os cálculos são resolvidos utilizando dados experimentais. Assim como nos métodos *Ab Initio*, ambos começam com a resolução da Equação de onda de Schrödinger e então introduzem algumas hipóteses visando aumentar a velocidade dos cálculos negligenciando termos menos importantes das equações (ATKINS et al., 2009).

A teoria do funcional da densidade, DFT (*Density Functional Theory*), tem causado um impacto sem precedentes na aplicação da mecânica quântica sendo que ao longo dos últimos 20 anos, foi uma das ferramentas mais utilizadas na investigação e solução de problemas nas áreas de atuação da química (BURKE, 2012). O sucesso desta teoria está na troca e correlação eletrônica, que utiliza a densidade eletrônica para descrever intrinsecamente o efeito de muitos corpos com o formalismo de uma única partícula. Em outras palavras, a densidade, uma observável 3D, é utilizada para descrever a física e as interações entre os elétrons, e, portanto, determinar exatamente tudo sobre o sistema (LEWARS et al., 2016).

2. REFERÊNCIAS

ADEBANJO, A. O.; DALAI, A. K.; BAKHSHI, N. N. Production of diesel-like fuel and other value-added chemicals from pyrolysis of animal fat. **Energy and Fuels**, v.19, p. 1735-1741, 2005.

ALENCAR, J. W.; ALVES, P. B.; CRAVEIRO, A. A. pyrolysis of tropical vegetal oil. **Journal of agricultural food chemistry**, n. 31, p. 1268-1270, 1983.

ANDZELM, J.; KLOUKOWSKI.; RDZIO-ANDZELM, E.; SASKI, Y.; TATEWAKI, H. **Gaussian basis set for molecular calculations**, 1. ed. Amsterdam, Elsevier, 1984.

ANP. **Agência nacional de petróleo, gás natural e combustível**: Disponível em: <<http://www.anp.gov.br>>. Acesso em: 20 agosto, 2016.

AMB. **Anuário mineral brasileiro**. Material disponível em: <<http://www.dnpm.gov.br>>. Acesso em 25 de setembro, 2016.

AQUINI, T. F. **Beneficiamento químico da bauxita de Santa Catarina**. 2007. Dissertação (mestrado). Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis.

ARAUJO, A. S.; JARONIEC, M. Synthesis and properties of lanthanide incorporated mesoporous molecular sieves. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 218, p. 462-467, 1999.

ATKINS, P.; DE PAULA, J.; FRIEDMAN, R. **Quanta, matter, and change: a molecular approach to physical chemistry**. 1. ed. New York: Cengage Learning, 2009.

ATKINS, P.; DE PAULA, J. **Physical chemistry**: 8. ed. Great Britain: University Press, 2006.

CATTI, M.; FERRARIS, G. AND HULL, S. Powder neutron-diffraction study of brucite and gibbsite and pressure dependence of the structure of Mg(OD)₂. **Zeitschrift für Kristallographie Supplements**, v. 4, p. 316, 1991.

COSTA NETO, P. R.; ROSI, L. F. S.; ZAGONEL, G. F.; RAMOS, L. P. Produção de biocombustível alternativo ao diesel através da transesterificação de óleo de soja usado em frituras. **Química nova**, v.23. n 4. p. 531-537, 2000.

CORBATÓ, C.E.; TETTENHORST, R.T. AND CHRISTOPH, G.G. Structure refinement of deuterated boehmite. **Clays and Clay Minerals**, v. 33, p. 71-75, 1985.

DOMINGOS, C. A.; PEREIRA, D. D.; CARDOSO, L. DE S.; TEODORO, R. A.; CASTRO, V. A. Biodiesel- uma proposta de um combustível alternativo. **Revista brasileira de Gestão e Engenharia**, v. 9, p. 134-178, 2012.

ELSHAKRE, M. A DFT study of the ionization and electron attachment of 2-azido pyridine. **Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc**, v. 138, p. 146-57, 2015.

ETERIGHO, E. J.; LEE, J. G.; HARVEY, A. P. Triglyceride cracking for biofuel production using a directly synthesised sulphated zirconia catalyst. **Bioresource Technology**, v. 102, n. 10, p. 6313-6, 2011.

FERNANDES, C.; CATRINESCUS, C.; CASTILHO, P.; RUSSO, P.A.; CARROTT, M. R.; BREEN, C. Catalytic conversion of limonene over acid activated Serra de Dentro bentonite. **Applied catalysis A: general**, n 318, p. 108-120, 2007.

FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; BURANT, J. C.; IYENGAR, S. S.; TOMASI, J.; COSSI, M.; MILLAM, J. M.; KLENE, M.; ADAMO, C.; FARKAS, O.; FORESMAN, J. B. AND FOX D. J. **Gaussian 09**, Revision A.02. gaussian, inc., 2016.

FORTES, I. C. P.; BAUGH, P. J. Pyrolysis–GC/MS studies of vegetable oils from Macauba fruit. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 72, n. 1, p. 103-111, 2004.

GIRI, B. R.; LO, J. M.; ROSCOE, J. M.; ALQUAITY, A. B., & FAROOQ. Theoretical study of the reaction kinetics of atomic bromine with tetrahydropyran. **J Phys Chem**, v. 119, n. 6, p. 933-42, 2015.

GOSELINK, R. W.; HOLLAK, S. A.; CHANG, S. W.; VAN HAVEREN, J.; DE JONG, K. P.; BITTER, J. H., & VAN ES, D. S. Reaction pathways for the deoxygenation of vegetable oils and related model compounds. **ChemSusChem**, v. 6, n. 9, p. 1576-1594, 2013

GRJOTHEIM, K.; WELCH, B. J. **Aluminium smelter technology: a pure and applied approach**. 2^a ed. Estados Unidos: Düsseldorf, Aluminium-Verlag, 1988.

HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous Electron Gas. **Phys. Rev**, V. 136, p. 864, 1964.

IDEM, R.O., KATIKANENI, S. P. R. e BAKHSHI, N.N. Thermal Cracking of Canola Oil: Reaction Products in the Presence and Absence of Steam. **Energy & Fuels**, v. 10, p. 1150-1162, 1996.

IDEM, R. O.; KATIKANENI, S. P. R.; BAKHSHI, N. Catalytic conversion of canola oil to fuels and chemicals: roles of catalyst acidity, basicity and shape selectivity on product distribution. **Fuel Processing Technology**, v. 51, p. 101-125, 1997.

JOÃO, A. S; MÔNICA, C. A.; ACHILLES, J. B. D. **Rochas e Minerais Industriais: Uso e Especificações**. 2. ed. Rio de Janeiro: Copyright CETEM/MCT, 2008.

KARAMZADEH, B.; SINGH, D.; NAM, W.; KUMAR, D., & DE VISSER, S. P. Properties and reactivities of nonheme iron(IV)-oxo versus iron(V)-oxo: long-range electron transfer versus hydrogen atom abstraction. **Phys Chem Chem Phys**, v. 16, n. 41, p. 611-622, 2014.

KIM, S.-S.; HEO, H. S.; KIM, S. G.; RYOO, R.; KIM, J.; JEON, J.-K.; PARK, Y. K. Catalytic Pyrolysis of Oil Fractions Separated from Food Waste Leachate Over Nanoporous Acid Catalysts. **Journal of Nanoscience and Nanotechnology**, v. 11, n. 7, p. 6167-6171, 2011.

KIMURA, T.; LIU, C.; LI, X.; MAEKAWA, T. & ASAOKA, S. Conversion of isoprenoid oil by catalytic cracking and hydrocracking over nanoporous hybrid catalysts. **J Biomed Biotechnol**, v. 20, p. 637-645, 2012.

KOHN, W. AND L. J. SHAM. Self consistente equation including Exchange and correlation effects. **Phys. Ver**, V. 140, p. 11-33, 1965.

- LAZDOVICA, K.; LIEPINA, L.; KAMPARS, V. Catalytic pyrolysis of wheat bran for hydrocarbons production in the presence of zeolites and noble-metals by using TGA-FTIR method. **Bioresource Technology**, v. 207, p. 126-133, 2016.
- LANDIS, P. S.; CRAVER, R. H.; BARTON, D. E. pyrolysis studies whit jojoba oil. J. **Agric. Food Chem.** v. 40, p. 456, 1992.
- LEE, H. W.; CHOI, S. J.; JEON, J.-K.; PARK, S. H. & PARK, Y.-K. Catalytic Co-Pyrolysis of Waste Particle Board and Polypropylene Over Nanoporous Al-MCM-41 Catalysts. **Journal of Nanoscience and Nanotechnology**, v. 14, n. 11, p. 8489-8494, 2014.
- LEWARS, E. G., **Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics**: 3. Ed. Canadá: springes, 2016.
- LIMA, J. R. O.; SILVA, R. B.; SILVA, C. M. Biodiesel de babaçu (*Orbignya phalerata*) obtido por via etanólica. **Química Nova**, v. 30, 2007.
- LIMA, D. G.; SOARES, V. C .D.; RIBEIRO, E. B.; CARVALHO, D. A.; CARDOSO, E. C. V.; RASSI, F. C.; MUNDIM, K. C.; RUBIM, J. C.; SUAREZ, P. A. Z. Diesel-like fuel obtained by pyrolysis of vegetable oils. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 71, p. 987-996, 2004.
- LIU, H.; MA, X.; LI, L.; HU, Z.; GUO, P. & JIANG, Y. The catalytic pyrolysis of food waste by microwave heating. **Bioresource Technology**, v. 166, p. 45-50, 2014.
- LHAMAS, D. E. L. **Estudo do processo de craqueamento termocatalítico do óleo de palma (*Elaeis guineensis*) e do óleo de buriti (*Mauritia flexuosa*) para produção de biocombustíveis**. 2013. Tese (Doutorado em engenharia de recursos naturais) Universidade Federal do Pará. Belém.
- LLAMAS, A.; AL-LAL, A.M.; HERNANDEZ, M.; LAPUERTA, M. & CANOIRA, L. Biokerosene from Babassu and Camelina Oils: Production and Properties of Their Blends with Fossil Kerosene. **Energy & Fuels**, v. 26, n. 9, p. 5968-5976, 2012.
- LUZ JR, G. E.; SANTOS, A. G. D.; MELO, A. C. R.; OLIVEIRA, R. M.; ARAUJO, A. S. & FERNANDES, V. J.. Thermal catalytic cracking of buriti oil (*Mauritia flexuosa L.*) over LaSBA-15 mesoporous materials. **Fuel Processing Technology**, v. 92, n. 10, p. 2099-2104, 2011.
- MA, F.; HANNA, M. A. Biodiesel production. A review, **Bioresource Tecnology**, v. 70, p. 1-15, 1999.
- MARCIEL, A. P. **Biocombustíveis de babaçu: ensaios técnicos sobre oportunidades de produção de biocombustíveis a parti do coco babaçu**. São Luís: Copyright, 2016.
- MAHER, K. D.; BRESSLER, D. C. Pirolysis of triglyceride materials for the production of renewable fuels and chemicals, **Bioresource tecnology**, v. 98, p. 2351-2368. 2007.
- MAHER, K. D.; BRESSLER, D. C. Pyrolysis of triglyceride materials for the production of renewable fuels and chemicals. **Bioresource Technology**, v. 98, n. 12, p. 2351-68, 2007.

MAHER, K. D.; BRESSLER, D. C. Pyrolysis of triglyceride materials for the production of renewable fuels and chemicals. **Bioresource Technology**, v. 98, n. 12, p. 2351-68, 2007

MME. **ministério de minas e energia**. Material disponível em: <<http://www.mme.gov.br/programas/biodiesel>>: Acesso em 20 de Setembro. 2017.

MME. **Ministério de minas e energia**. Secretaria de Geologia Mineração e Transformação Mineral. Sumário mineral. MME, Brasília: MME/SGM 20015.

MORGON, N. H.; COUTINHO, K. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2007.

MOREIRA, E. Óleos vegetais e o estresse térmico. **Revista Analytica**, v. 134, p. 40-48, 2013.

MUGRIDGE, J. S.; BERGMAN, R. G. & RAYMOND, K. N. Equilibrium isotope effects on noncovalent interactions in a supramolecular host-guest system. **J Am Chem Soc**, v. 134, p. 2057-2066, 2012.

NG, S. H.; SHI, Y.; HESHKA, N. E.; ZHANG, Y. & LITTLE, E. Laboratory Production of Biofuels and Biochemicals from a Rapeseed Oil through Catalytic Cracking Conversion. **J Vis Exp**, n. 115, 2016.

OOI, Y.; BHATIA, S. Aluminum-containing SBA-15 as cracking catalyst for the production of biofuel from wastes used palm oil. **Microporous and Mesoporous Materials**, v. 102, p. 310-317, 2007.

OOI, Y.; ZAKARIA, R.; MOHAMED, A.R.; BHATIA, S. Synthesis of composite material MCM-41/Beta and its catalytic performance in waste used palm oil cracking. **Applied Catalysis**: v. 274, p. 15-23, 2004a.

PASCOAL, C.; PANDOLFELLI, V. C. Bauxitas refratárias: composição química, fases e propriedades- parte I. **Cerâmica**, v. 46, n. 298, p. 76- 82, 2000.

RAHM, M., & BRINCK, T.. Kinetic stability and propellant performance of green energetic materials. **Chemistry**, v. 16 n.22, p. 6590-6600, 2010.

SANTOS, A. P. B.; PINTO, A.C. Biodiesel: uma alternativa de combustível limpo. **Química Nova na Escola**, v. 31, n. 1, 2009.

SANTOS, P.S: **Tecnologia de argilas**. 1^a ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1975.

SANTOS, A. L. F. **Produção de bio-óleo a partir do craqueamento térmico de gorduras residuais derivadas de biomassa animal e vegetal**. 2007. Dissertação (Mestrado em Química) Universidade de Brasília. Brasília. 2007.

SCHMETZER, K; BARTELKE, W. Schleifwürdiger Diaspor aus der Türkei. **Zeits. Deutsch Gem. Gess**, v. 28, n. 69, 1979.

SHAO, Y.; WANG, L.; ZHANG, J.; ANPO, M. Synthesis of hydrothermally stable and long-range ordered Ce-MCM-48 and Fe-MCM-48 materials. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 109, p. 20835-20841, 2005.

TAMUNAIDU, P.; BHATIA, S. Catalytic cracking of palm oil for the production of biofuels: optimization studies. **Bioresource Technology**, v. 98, n. 18, p. 3593-601, 2007.

TEIXEIRA, M. A. **Biomassa de babaçu no Brasil**. In proceedings of the Encontro de Energia no meio Rural, Campinas (SP),2002.

TSAI, J. H.; CHEN, S. J.; HUANG, K. L.; LIN, W. Y.; LEE, W. J.; CHAO, H. R.; HSIEH, L. T. Emission reduction of NO_x, PM, PM-carbon, and PAHs from a generator fuelled by biodieselhol. **J Hazard Mater**, v. 274, p. 349-59, 2014.

TWAIQ, F. A.; MOHAMED, A. R.; BHATIA, S. Performance of composite catalysts in palm oil cracking for the production of liquid fuels and chemicals. **Fuel Processing Technology**, v. 85, p. 1283-1300, 2004.

WILLIAMS, P.; HORNE, P. A. The influence of catalytic type on the composition of upgraded biomass pyrolysis oils. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 31, p. 39-61, 1995.

XU, J.; JIANG, J.; SUN, Y. & CHEN, J.. Production of hydrocarbon fuels from pyrolysis of soybean oils using a basic catalyst. **Bioresource Technology**, v. 101, n. 24, p. 9803-6, 2010.

ZHAO, X.; WEI, L.; JULSON, J.; QIAO, Q.; DUBEY, A. & ANDERSON, G. Catalytic cracking of non-edible sunflower oil over ZSM-5 for hydrocarbon bio-jet fuel. **Biotechnology**, v. 32, n. 2, p. 300-312, 2015.

ZHU, L.; CHEUNG, C. S.; ZHANG, W. G. & HUANG, Z. Emissions characteristics of a diesel engine operating on biodiesel and biodiesel blended with ethanol and methanol. **Sci Total Environ**, v. 408, n. 4, p. 914-21, 2010.

CAPÍTULO I

Estudo Teórico e Experimental da pirólise do óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*)

Abstract

In the present work, the pyrolysis of babassu oil was used to obtain alternative biofuels. The characterization of the organic liquid (LO) was made by infrared spectroscopy (FTIR) and the acidity by direct estimation of the amount of free acids. The light fraction showed higher acidity than the heavy fraction. Gas chromatography of the organic liquids showed C 6 to C 23 peaks indicating the presence of high amounts of substances in the samples. The molecular structures of the possible compounds generated in the pyrolysis of vegetable oil, the species involved in the lauric acid reactions, electronic properties, thermodynamic profiles and the mechanisms of beta hydrogenation and gamma hydrogen transfer were evaluated at the DFT level. The possible routes of the thermal decomposition reactions of lauric acid were investigated through the geometric parameters, lengths of bonds, energies involved in the breaks of bonds and formation of free radicals. The free radicals and free energy of Gibbs were investigated the formation of the possible compounds obtained in the pyrolysis of lauric acid. The mechanism of elimination of the hydrogen beta is shown more favorable energetically in the breakdown of triglycerol bonds.

Key words: Biofuel, babassu oil, lauric acid, pyrolysis, DFT calculations.

Resumo

No presente trabalho, a pirólise do óleo de babaçu foi utilizada para obtenção de biocombustíveis alternativos. A caracterização do líquido orgânico (LO) foi feita por espectroscopia na região do Infravermelho (FTIR) e a acidez por estimativa direta da quantidade de ácidos livres. A fração leve apresentou acidez maior do que a fração pesada. A cromatografia gasosa dos líquidos orgânicos mostrou picos de C_6 a C_{23} indicando a existência de elevadas quantidades de substâncias nas amostras. As estruturas moleculares dos possíveis compostos gerados na pirólise do óleo vegetal, das espécies envolvidas nas reações do ácido láurico, propriedades eletrônicas, perfis termodinâmicos e os mecanismos de eliminação de hidrogênio beta e transferência de hidrogênio gama foram avaliadas em nível de DFT. As possíveis rotas das reações de decomposição térmica do ácido láurico foram investigadas através dos parâmetros geométricos, comprimentos de ligações, energias envolvidas nas quebras de ligações e formação de radicais livres. Através dos radicais livres e energia livre de Gibbs investigou-se a formação dos possíveis compostos obtidos na pirólise do ácido láurico. O mecanismo de eliminação do hidrogênio beta se mostrou mais favorável energeticamente na quebra das ligações do triacilglicerol.

Palavras chaves: Biocombustível, óleo de babaçu, ácido láurico, pirólise, cálculos DFT.

1. Introdução

A energia é o principal recurso necessário ao desenvolvimento da humanidade e o setor de transporte é baseado em combustíveis derivados de petróleo. Supõe-se que o petróleo bruto e seus derivados não sejam suficientes para manter essa demanda de energia por muito tempo. Além disso, o aumento do consumo desse tipo de energia provoca liberação crescente e descontrolada de gases de efeitos tóxicos na atmosfera (CO_x , NO_x , SO_x e compostos aromáticos) causando efeito estufa, aumento da temperatura do planeta e chuva ácida, prejudicando a sociedade e todas as formas de vida da terra (HUANG, et al., 2015; WENTZELL, et al., 2013). Desta forma, percebe-se que é necessária a modificação da matriz energética global para o desenvolvimento sustentável da economia do nosso planeta.

A necessidade da redução de gases de efeitos tóxicos e a redução na utilização de combustíveis não convencionais levaram a estudos intensos sobre o uso de combustíveis alternativos, especialmente de óleos vegetais (RAMACHANDRAN et al., 2011; KAI, et al., 2014). A fim de melhorar a economia de combustíveis alternativos de motores, várias pesquisas e estudos estão sendo realizados, devido ao enorme aumento do número de veículos, estagnação da demanda e disponibilidade de gasolina e diesel (PUHAN, et al., 2009; HE, et al., 2016; FUESS, et al., 2015).

Os triacilglicerol são os principais constituintes de óleos vegetais e gorduras animais produzidos por inúmeras culturas, microorganismos, bactérias e algas. A diversidade de fontes para esses compostos sugere que eles possam servir como uma alternativa para a substituição dos combustíveis convencionais, isto é, como matéria-prima para a produção de produtos químicos utilizados em formulações de combustíveis e transportes (VIJAYAKUMAR, et al., 2016; MANDER, et al., 2014).

Os óleos vegetais são substâncias que apresentam elevado potencial quando utilizados na obtenção de biocombustíveis, pois são triacilglicerol formados pela reação de glicerol com moléculas de ácidos graxos. Dentre os diversos tipos de óleos vegetais utilizados na pirólise, o óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) é uma excelente opção para a produção de biocombustível uma vez que sua composição é basicamente saturada, com cadeia carbônica que varia entre 8 a 18 átomos de carbono (DA SILVA, et al., 2008; LLAMAS, et al., 2012).

A pirólise se mostra um dos processos mais simples na obtenção de combustíveis alternativos (LI, et al., 2009a). Entretanto, a partir de 1990, pesquisas foram desenvolvidas em diversos países em virtude do crescente clamor pela preservação ambiental e da possível escassez do petróleo (LIMA, et al., 2004; LI, et al., 2007). No processo de pirólise os triacilglicerol dos óleos e gorduras são convertidos, a elevadas temperaturas (250 a 650 °C), em compostos orgânicos. As substâncias obtidas no processo são distribuídas em quatro fases distintas: gasosa, líquida orgânica, aquosa e o coque. A fase gasosa apresenta composição bastante variável e normalmente é constituída por CO, CO₂, H₂ e compostos orgânicos leves; enquanto o líquido orgânico é constituído por compostos orgânicos alifáticos, compostos orgânicos aromáticos e compostos oxigenados, como ácidos graxos, álcoois, aldeídos e cetonas (WILLIAMS & HORNE, 1995; IDEM, et al., 1996). O líquido orgânico contém frações combustíveis com propriedades físicas e químicas semelhantes às derivadas do petróleo, gasolina, querosene e diesel (WILLIAMS & HORNE, 1995; LUZ JR, et al., 2011; IDEM, et al., 1997).

Na busca para encontrar biocombustíveis similares ao diesel mineral vários trabalhos têm sido desenvolvidos utilizando os processos de transesterificação esterificação e pirólise dos triacilglicerol (MAHER & BRESSLER, 2007; RAMACHANDRAN, et al., 2011; ILHAM & SAKA, 2016). Acredita-se que o entendimento básico sobre as reações que participam desses processos, a nível molecular, é essencial para o desenvolvimento de processos de produção de biocombustíveis semelhantes aos combustíveis minerais. Por outro lado, poucos estudos teóricos sobre os mecanismos de reações de triacilglicerol para produção de biocombustíveis têm sido relatados na literatura (WANG, et al., 2016; ZHANG, et al., 2015).

Na pirólise, trabalha-se com temperaturas até 650 °C levando a inúmeros processos de reações que não são bem entendidos, desta forma, pode-se utilizar a teoria do funcional da densidade (DFT) para avaliar estruturas moleculares e quebras de ligações de espécies envolvidas nas reações primárias e secundárias. Os perfis de energias e estados de transição podem ser analisados e correlacionados com a cinética e estabilidade termodinâmica para obter-se um entendimento dos mecanismos envolvidos nas reações e dos produtos formados.

O objetivo desse trabalho foi investigar em nível de teoria do funcional de densidade (DFT) os mecanismos envolvidos na pirólise do ácido láurico, presente no óleo de babaçu, e propor os possíveis produtos que são envolvidos nas reações.

2. Parte experimental

2.1. pirólise do óleo de babaçu

O óleo de babaçu é constituído por aproximadamente 84% de ésteres de ácidos graxos saturados e 16% de ésteres de ácidos graxos insaturados, característica excelente para a produção de biocombustíveis, cuja composição química é apresentada na Tabela 1 (LIMA, et al., 2007). O óleo vegetal foi obtido a partir de fontes comerciais, armazenado e guardado para posterior utilização.

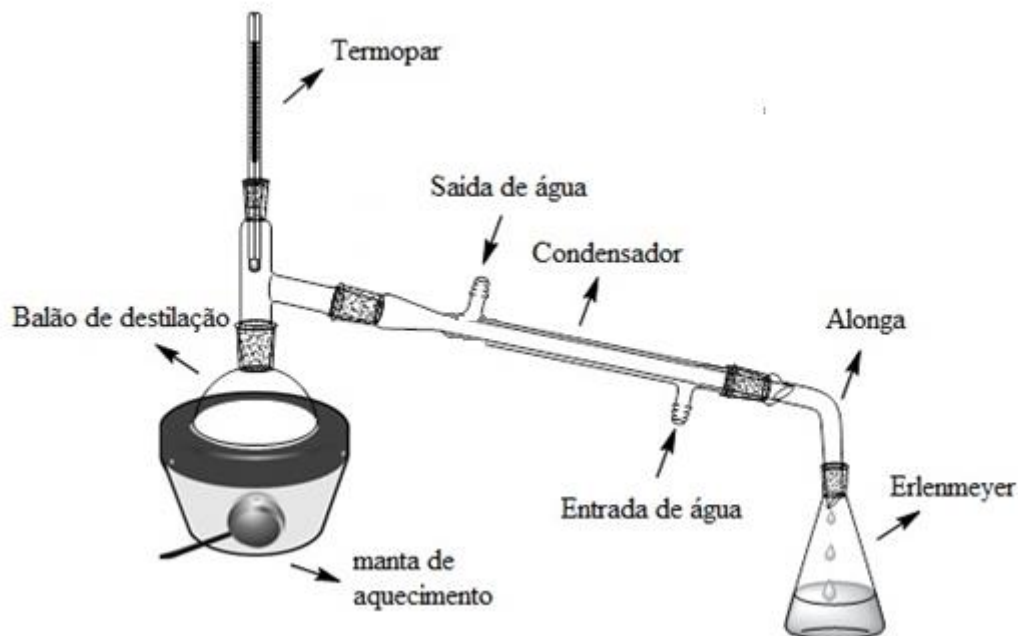
Tabela 1. Composição química do óleo de babaçu.

Ácidos Graxos		Massa molar (g mol ⁻¹)	Composição percentual (%)
Nome	Simbologia		
Ácido Caprílico	C08:0	144,21	5,0
Ácido Cáprico	C10:0	172,26	6,0
Ácido Láurico	C12:0	200,32	44,0
Ácido Mirístico	C14:0	228,37	17,0
Ácido Palmítico	C16:0	256,42	8,0
Ácido Esteárico	C18:0	284,45	4,0
Ácido Oléico	C18:1	282,46	14,0
Ácido Linoléico	C18:2	280,44	2,0

A pirólise do óleo vegetal foi feita em um sistema de destilação simples. Para isso, foi utilizado um balão de destilação de 250 mL, um termopar, usado para medir a temperatura do sistema, um condensador e uma manta de aquecimento Figura 1. Em cada processo, 100 g do óleo foram aquecidos da temperatura ambiente até 550 °C a uma taxa de aquecimento de 10 °C min⁻¹. Duas frações aquosas foram separadas pelo processo de decantação: uma fração constituída pelos compostos mais leves, obtida em temperaturas abaixo de 270 °C, e outra constituída pelos compostos mais pesados,

obtida em temperaturas a partir de 270 °C. Cada uma dessas frações foi separada da fase aquosa e denominada de líquido orgânico, (LUZ JR, et al., 2011).

Figura 1. Sistema utilizado no processo de pirólise do óleo de babaçu.



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018.

2.2. Caracterização do biocombustível

Os espectros de absorção na região do infravermelho com transformada de Fourier foram feitos na região de 4000 a 400 cm^{-1} com resolução de 4 cm^{-1} em um espectrômetro de infravermelho da Bomem, modelo MB102. As amostras dos líquidos orgânicos foram diluídas gotejando-se 1% m/m em pastilha de KBr sólido para posteriores análises.

As análises de GC-MS foram realizadas em um cromatógrafo Shimadzu QP2010-SE equipado com uma coluna Rtx®-5MS de 30 m contendo 5% fenil, 95% dimetilpolissiloxano e gás Hélio usado como arraste. A temperatura do injetor foi de 270 °C e a do detector 350 °C. A coluna foi inicialmente aquecida a 100 °C com taxa de aquecimento de 10 até 180 °C por 1 minuto, em seguida com taxa de aquecimento de 4 °C min^{-1} por 10 minutos até 270 °C. A análise com o detector de massa foi realizada, com o tempo de aquisição de 41.50 min e corte do solvente feito em 3,5 minutos. O banco de dados do programa de soluções GCMS foi usado para detecção dos compostos.

A seletividade dos compostos orgânicos encontrados nos cromatogramas foi obtida através da integração dos picos utilizando-se o programa *Origin* 2016.

O índice de acidez dos biocombustíveis foi determinado utilizando-se o método da OACS – Cd 3d-63. Nesse método uma solução alcoólica de KOH 1,00 mol L⁻¹ foi usada como titulante e fenolftaleína como indicador. As amostras tituladas, em triplicata, foram diluídas em uma mistura 1:1 de isopropanol e tolueno.

2.3. Detalhes computacionais

Todos os cálculos foram realizados no programa Gaussian 09 (FRISCH, et al., 2009) e as estruturas das moléculas foram obtidas no programa GaussView (DENNINGTON, et al., 2008). As geometrias eletrônicas e termodinâmicas dos reagentes e produtos foram obtidas por método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) utilizando com o funcional híbrido (B3LYP) 36-42 e o conjunto de base 6-311++G(d,p) (MCLEAN & CHANDLER, 1980; RAGHAVACHARI, et al., 1980). Cálculos de frequências foram realizados para certificar se as estruturas dos reagentes ou produtos estavam em um mínimo de energia, bem como para obter os parâmetros termodinâmicos de energia de Gibbs (ΔG), entalpia (ΔH) e entropia (ΔS) de formação dos sistemas estudados. Com esses parâmetros geométricos é possível determinar qual mecanismo foi mais favorável na pirólise.

Todas as propriedades termodinâmicas foram calculadas nas temperaturas de 298, 448 e 798 K e as quantidades de energias de reagentes e produtos foram feitas por suas respectivas correções térmicas. Esses cálculos foram realizados para simular a pirólise dos sistemas e correlacionar com os dados de cromatografia obtidos experimentalmente. Todos os cálculos foram desenvolvidos no vácuo.

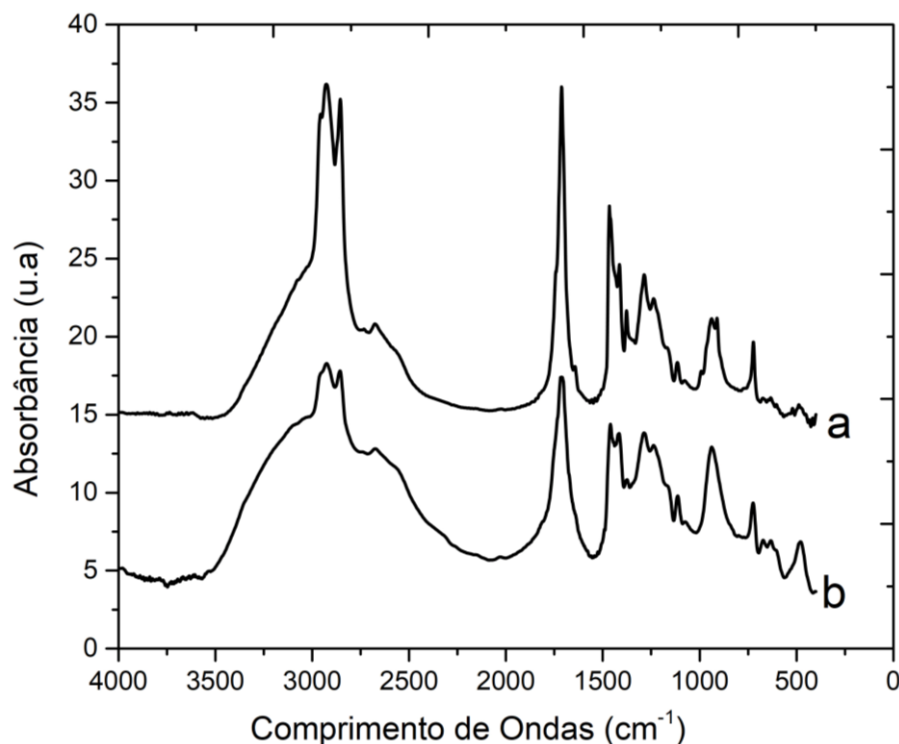
3. Resultados e discussão

3.2. Caracterização do líquido orgânico (LO)

3.2.1. Análise por espectroscopia na região do infravermelho

A Figura 2 mostra os espectros de infravermelho das frações orgânicas constituídas pelos compostos leves e pesados do líquido orgânico obtido pela pirólise do óleo de babaçu.

Figura 2. Espectro de absorção FT-IR do biocombustível obtido a partir da pirólise do óleo de babaçu: fração referente aos compostos leves (a) e fração referente aos compostos pesados (b).



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Os espectros obtidos a partir da pirólise do óleo de babaçu mostram uma banda em 940 cm^{-1} que tem sido atribuída ao estiramento C-C ou deformação angular fora do plano C=C-H. Na região de 1150 a 1300 cm^{-1} são observados os modos vibracionais de deformação *wagging* e *twisting* do grupo CH_2 . O pico em 1460 cm^{-1} é atribuído ao estiramento C-O, enquanto que em 1712 cm^{-1} é observado um pico do estiramento simétrico (C=O) da carbonila de ácido carboxílico (ALBUQUERQUE, et al., 2003). Quando comparadas as intensidades das bandas em 1712 cm^{-1} , os compostos leves apresentam uma maior intensidade em relação aos compostos pesado devido a maior quantidade de ácidos de cadeias curtas presentes nessa amostra. Nossos resultados mostram que a maior quantidade de compostos de massas moleculares maiores diminui a acidez dessa fração como mostrado na Tabela 2. Além disso, os modos vibracionais de estiramento simétrico CH_2 e CH_3 característicos de alcanos e alcenos são observados na região de 2860 cm^{-1} e 2920 cm^{-1} , respectivamente (LUZ JR., et al.,2011; PUNA, et al.,2010).

3.2.2. Medida da acidez dos líquidos orgânicos

O índice de acidez é uma estimativa direta da quantidade de ácidos livres nos produtos obtidos, que é expresso numericamente pela massa em miligrama de base necessária para neutralizar a mistura (LÔBO, et al., 2009). Na Tabela 2 são mostrados os resultados de índices de acidez para as duas frações obtidas através da pirólise do óleo de babaçu, assim como seus respectivos desvios padrões.

Tabela 2. Índice de acidez das frações orgânicas obtidas na pirólise do óleo de babaçu.

Amostras	Índice de acidez (mg de KOH/g de amostra)	Desvio padrão (DS)
Fração leve	247	1,05
Fração pesada	112	1,20

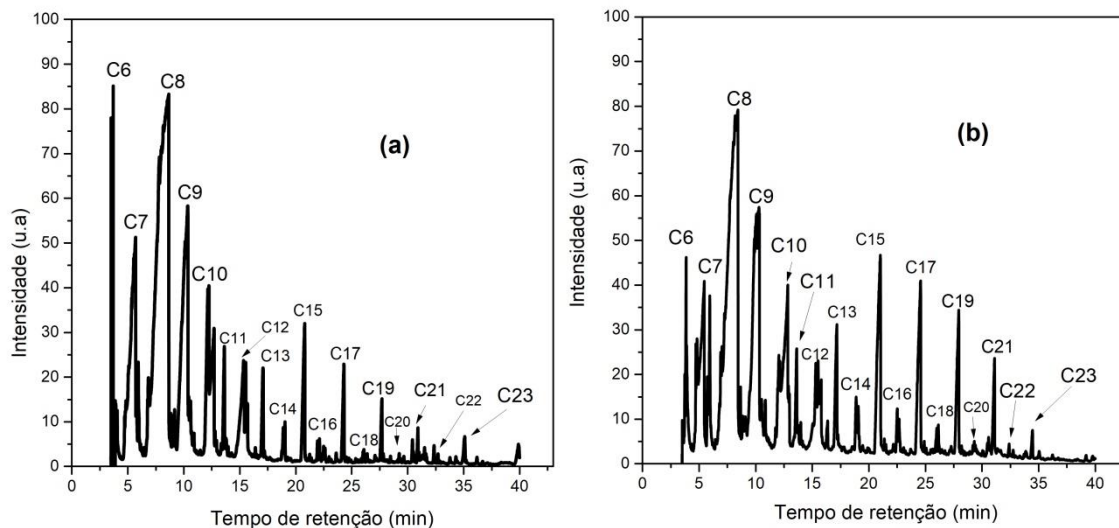
Método da OACS – Cd 3d-63

O alto índice de acidez das amostras obtidas na pirólise do óleo de babaçu evidencia uma alta concentração de compostos oxigenados, dentre eles os ácidos carboxílicos. Os dados indicam que a acidez da fração leve apresenta um valor maior quando comparado com a fração pesada. Essa característica pode ser associada a menor temperatura de destilação da fração leve, temperatura abaixo de 270 °C, quando comparada com a fração pesada, temperaturas a partir de 270 °C. Em temperaturas menores foram coletados composto de cadeias menores, como ácidos carboxílicos que apresentam dissociação considerável resultando em acidez maior. Em temperaturas mais elevadas são coletados compostos de cadeia carbônica maiores, desta forma, os ácidos gerados nesta fração apresentam dissociação moderada resultando em acidez menor do que a fração leve (LUZ JR, 2010).

3.2.3. Análise cromatográfica

A Figura 3 mostra os cromatogramas dos produtos dos líquidos orgânicos obtidos através da pirólise do óleo de babaçu.

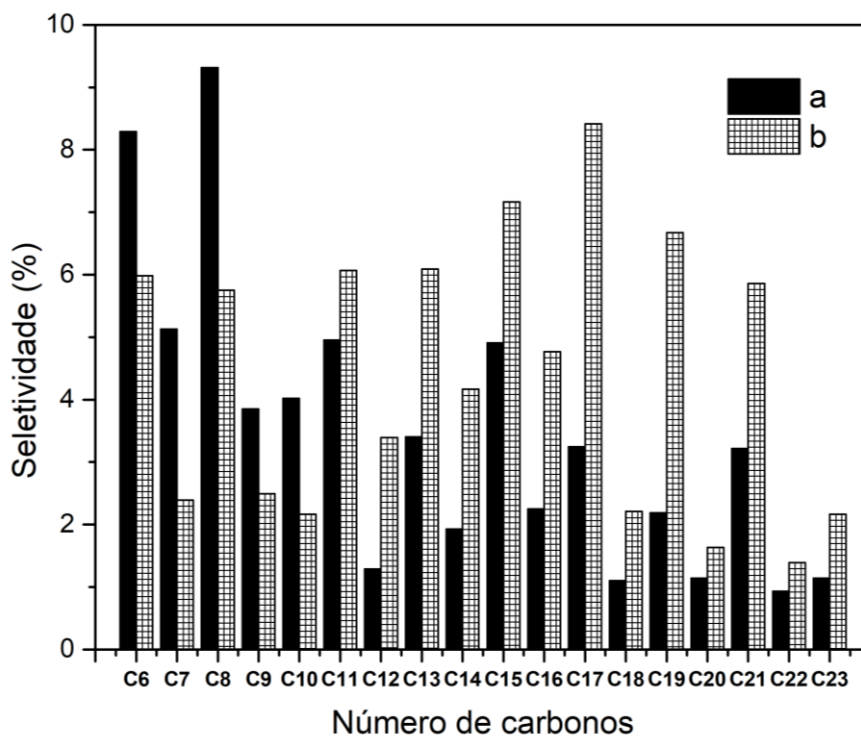
Figura 3. Cromatogramas dos LO oriundos da pirólise do óleo de babaçu: fração leve (a) e fração pesada (b).



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Nos cromatogramas da Figura 3 são observados vários picos indicando a existência de elevadas quantidades de substâncias presentes nessas amostras. Percebe-se que, a similaridade dos compostos, em cada tempo de retenção, para os produtos obtidos, evidencia que as duas frações obtidas não provocam alterações significativas nos produtos da reação. O que pode ser observado é a mudança na intensidade dos picos para cada cromatograma (WILLIAMS & HORNE, 1995; LUZ, et al., 2011; IDEM, et al., 1997). Esse comportamento pode ser discutido através das áreas referentes a cada pico e seus respectivos tempos de retenção como são apresentados na Figura 4.

Figura 4. Seletividade dos compostos orgânicos, na faixa de C₆ a C₂₃, presentes nos LO oriundos da pirólise do óleo de babaçu (a) fração leve e (b) fração pesada.



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

A Figura 4 mostra a seletividade dos compostos orgânicos leves e pesados, C₆ a C₂₃. A fração leve obtida em temperaturas de destilação abaixo de 270 °C apresenta maior seletividade para compostos orgânicos de C₆ a C₁₀, e menor seletividade para compostos orgânicos mais pesados, C₁₁ a C₂₃. Em temperaturas de destilação menores são obtidos maiores quantidades de compostos leves e menores quantidades de compostos pesados e em temperatura maiores são obtidos menores quantidades de compostos leves e maiores quantidades de composto pesado. Desta forma, pode-se fazer uma correlação entre a porcentagem de compostos pesado e leves levando-se em consideração a seletividade da Figura 4. Para os compostos de C₆ a C₁₀ tem-se 61,50% para os compostos leves e 38,50% e para os compostos pesados de C₁₁ a C₂₃ tem-se 34,54% para os compostos leves e 65,46% para os compostos pesados.

3.3. Dados computacionais

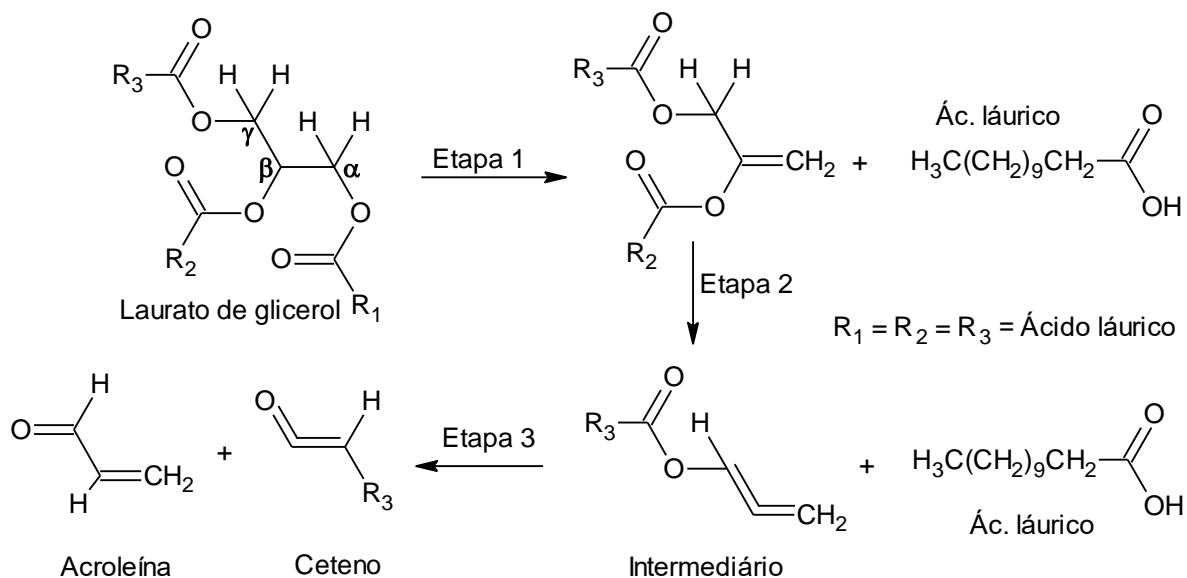
3.3.1. Mecanismos reacionais de quebra das ligações dos triacilglicerol

Durante a pirólise de óleos vegetais e gordura animal as classes de compostos dos alcanos, alcenos, alcadienos, compostos aromáticos, cetonas, aldeídos, ácidos carboxílicos são produzidas. Entretanto, a descrição correta de quais produtos ou qual o mecanismo presente na pirólise não é totalmente descrita. Chang e Wan propuseram o primeiro mecanismo reacional para a decomposição térmica dos triacilglicerol. Nesse mecanismo ocorre a eliminação do hidrogênio beta e transferência do hidrogênio gama pela quebra das ligações dos triacilglicerol, liberação dos ácidos carboxílicos, que constitui os óleos e gorduras, e posterior liberação de cetenos, acroleínas, alquilação, aromatização, e isomerização de parafinas (CHANG & WAN, 1947; WILLIAMS & HORNE, 1995).

A pirólise de óleos vegetais e gordura animal ocorrem em duas etapas diferentes, sendo que a primeira ocorre a decomposição das moléculas dos triacilglicerol e liberação de moléculas ácidas conhecida como craqueamento primário. Enquanto que na segunda etapa, ocorre a degradação das moléculas dos ácidos levando a formação de misturas de hidrocarbonetos e compostos oxigenados, sendo conhecida como craqueamento secundário (IDEM, et al., 1997; CHANG & WAN, 1947; ALENCAR, et al., 1983).

Com base no mecanismo proposto por Chang e Wan o craqueamento primário ocorre com eliminação de hidrogênio beta (β), Figura 5 e transferência de hidrogênio gama (γ) Figura 6. No mecanismo de eliminação de hidrogênio (β), ocorre a formação dos ácidos carboxílicos, que constitui os triacilglicerol, e posterior formação de cetenos e acroleínas. Neste processo, ocorre a transferência de um hidrogênio (β) em relação a carbonila das cadeias do triacilglicerol levando a formação de um intermediário instável, posterior eliminações (β) e rearranjo para formação dos produtos.

Figura 5. Mecanismo proposto para eliminação do hidrogênio (β), liberação dos ácidos graxos, ceteno e acroleína.



Fonte: Adaptado de CHANG & WAN, 1947

Os cálculos termodinâmicos foram feitos com o ácido láurico e as três etapas do mecanismo de eliminação do hidrogênio beta foram obtidos nos intervalos de temperaturas de 298 a 798 K. Na Tabela 3 são apresentados os valores de funções de estado termodinâmico para cada passo do mecanismo de reação investigado.

Tabela 3. Energias termodinâmicas do mecanismo de eliminação do hidrogênio β .

Energias (Kcal mol⁻¹)	Etapa 1	Etapa 2	Etapa 3
Temperatura=298 K			
ΔH	12,119	21,108	-49298,987
ΔG	-2,313	7,705	-49316,208
ΔS	48,479	45,103	57,717
Temperatura=398 K			
ΔH	12,087	21,296	-49297,987
ΔG	-7,173	3,121	-49322,100
ΔS	48,391	45,663	60,587
Temperatura=498 K			
ΔH	12,004	21,386	-49296,747
ΔG	-12,003	-1,457	-49328,298
ΔS	48,208	45,870	63,356
Temperatura=598 K			
ΔH	11,864	21,409	-49295,288
ΔG	-16,813	-6,047	-49334,768
ΔS	47,954	45,913	66,020
Temperatura=698 K			
ΔH	11,670	21,376	-49293,631
ΔG	-21,593	-10,638	-49341,498
ΔS	47,655	45,864	68,576
Temperatura=798 K			
ΔH	11,429	21,301	-49291,803
ΔG	-26,342	-15,219	-49348,480
ΔS	47,331	45,764	71,023

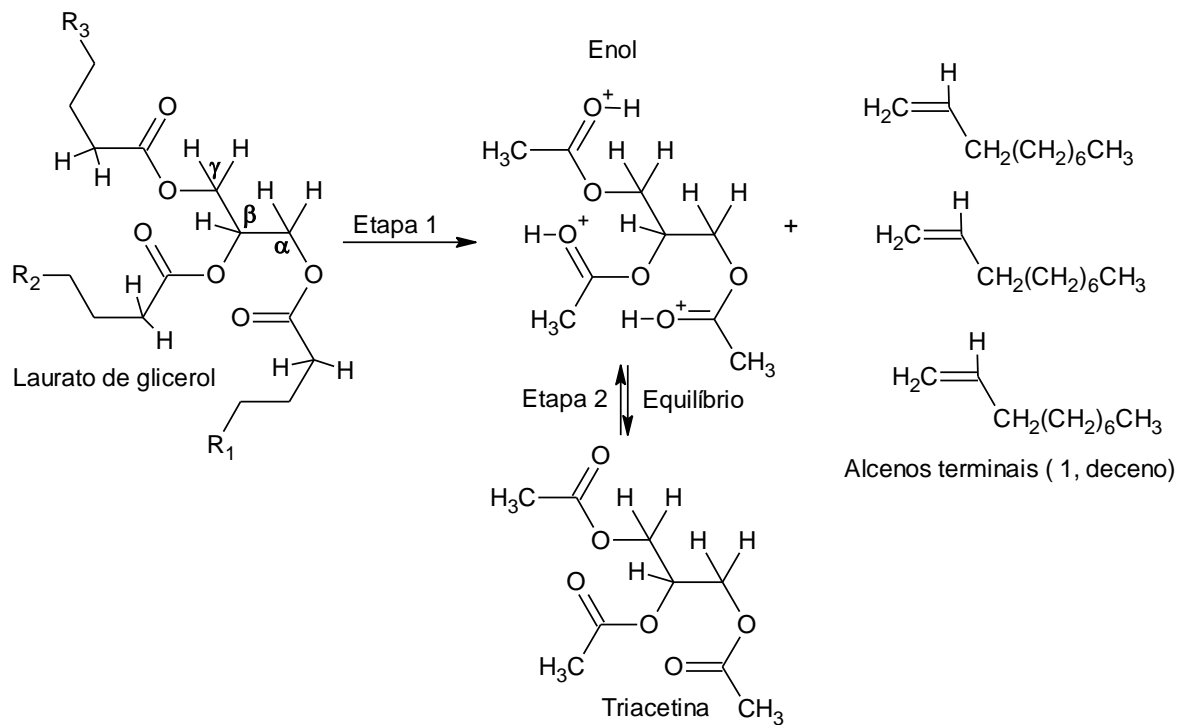
Os valores de entalpias obtidos na etapa 1, em todas as temperaturas estudadas, mostra que o processo ocorre com absorção de calor. Nesta etapa da pirólise, a transferência do hidrogênio beta (β) e eliminação do primeiro ácido láurico ocorrem com espontaneidade bastante favorável, pois todas as energias de Gibbs são negativas. Desta forma, a quebra da ligação entre glicerol e o primeiro ácido láurico ocorre espontaneamente através da absorção de calor.

Na etapa 2, todo o processo ocorre com absorção de calor, entretanto só se torna espontâneo a partir de 498 K. Nessa temperatura é observada a formação do intermediário instável e a saída do segundo ácido láurico e mostra que só pode ser favorável em temperaturas elevadas já que as energias envolvidas nos rearranjos só são suficientes para gerar um intermediário instável em altas temperaturas. Em 498 K, surge a primeira energia espontânea para a geração do intermediário instável, $-1,457 \text{ Kcal mol}^{-1}$, a partir desta temperatura a espontaneidade da etapa 2 vai se tornando mais favorável. Sendo assim, a saída do segundo ácido láurico só foi possível observar em temperaturas a partir de 498 K, uma vez que ocorre a formação de um intermediário instável de alta energia.

De acordo com os valores de energias da etapa 3, a formação do ceteno e acroleína, é altamente exotérmica e bastante favorável, em todas as temperaturas. À medida que se forma o intermediário instável, o qual envolve uma grande quantidade de energia para o seu aparecimento, a tendência é que a etapa seguinte, etapa 3, seja bastante favorável energeticamente. Estudos mostram que o aparecimento de acroleína e ceteno é observado nos processos de pirólise de óleos vegetais e gorduras animais (KUBÁTOVÁ, et al., 2011; VOGHIA, et al., 1995; MAHER, et al., 2007).

A Figura 6 mostra o mecanismo de transferência do hidrogênio gama (γ) no qual as cadeias dos triacilglicerol produzem diretamente alcenos terminais.

Figura 6. Mecanismo proposto para a transferência do hidrogênio gama (γ) e formação de alcenos terminais.



Fonte: Adaptado de CHANG & WAN, 1947

Nesse processo ocorre a formação de alcenos pela transferência de hidrogênios na posição gama (γ) da carbonila gerando como subproduto uma molécula de triacetina sendo decomposta terminalmente em reações posteriores. Os perfis de energias para as duas etapas do mecanismo de transferência do hidrogênio gama (γ) são mostrados na Tabela 4.

Tabela 4. Energias termodinâmicas para o mecanismo de transferência do hidrogênio gama (γ).

Energias (Kcal mol⁻¹)	Etapa 1	Etapa 2
Temperatura=298 K		
ΔH	-331,131	381,930
ΔG	-373,463	358,707
ΔS	142,154	77,967
Temperatura=398 K		
ΔH	-330,254	382,804
ΔG	-387,847	350,759
ΔS	144,707	80,512
Temperatura=498 K		
ΔH	-329,464	383,500
ΔG	-402,410	342,625
ΔS	146,477	82,076
Temperatura=598 K		
ΔH	-328,771	384,071
ΔG	-417,125	334,361
ΔS	147,751	83,127
Temperatura=698 K		
ΔH	-328,168	384,557
ΔG	-431,950	326,010
ΔS	148,684	83,879
Temperatura=798 K		
ΔH	-327,633	384,975
ΔG	-446,854	317,592
ΔS	149,401	84,438

Neste mecanismo, a geração dos alcenos terminais apresenta-se bastante favorável devido as energias de Gibbs elevadas e negativas. Esta etapa ocorrer com liberação de energia, processo exotérmico, apesar do sistema está sob aquecimento. Quando observamos os perfis de energia para a etapa 2, equilíbrio ceto-enóide, percebe-se que, nas temperaturas estudadas, essa etapa só ocorreria se fosse fornecida grandes

quantidades de energias ao sistema. Esta etapa apresenta energias de Gibbs bastante desfavoráveis e energias entálpicas elevadas e positivas. Desta forma, pode-se prever que a formação de alcenos terminais e equilíbrio ceto-enóide são partes de um mecanismo de reação altamente desfavorável.

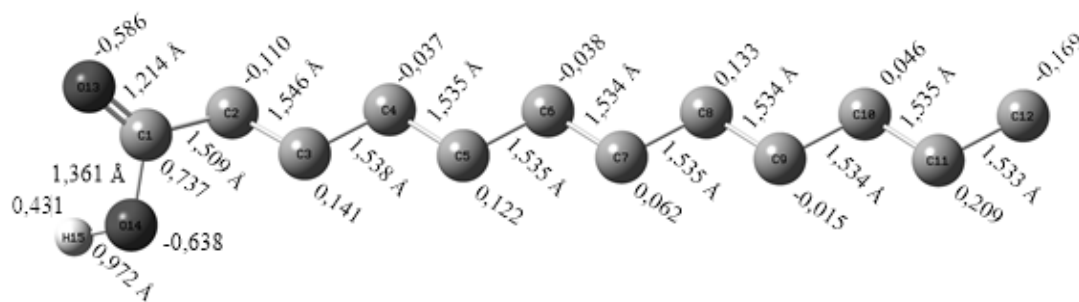
Analisando os perfis de energia para as duas etapas do mecanismo proposto na pirólise de um triglicerídeo, a etapa de transferência do hidrogênio gama (γ) é totalmente desfavorável energeticamente ao passo que a etapa de eliminação do hidrogênio β é mais favorável energeticamente. Além disso, durante a pirólise de óleos e gorduras ocorre o aparecimento de cetenos e acroleínas. Desta forma pode-se esperar, durante a pirólise de óleos e gorduras, a liberação dos ácidos graxos constituintes principalmente pela etapa de eliminação de hidrogênio beta (β).

3.3.2. Parâmetros geométricos e comprimentos de ligações da molécula do ácido láurico

A conformação molecular mais estável do ácido láurico foi estudada em nível de DFT. Os parâmetros eletrônicos, cargas Chelpg, e comprimentos de ligações foram calculados, em temperaturas de 298 K a 798 K, com o objetivo de buscar o entendimento de possíveis quebra de ligações e prever quais ligações são mais susceptíveis a rompimento assim como prever possíveis formações de radicas, nas possíveis quebras homolíticas e formação de espécies carregadas em possíveis quebras heterolíticas. Os estudos DFT foram realizados com a molécula de ácido láurico tendo em vista que o óleo de babaçu é constituído de aproximadamente 84% de ácidos graxos saturados sendo que o ácido láurico representa cerca de 44% dos constituintes do óleo de babaçu Tabela 1.

Os parâmetros geométricos e cargas Chelpg são mostrados na Figura 7. É importante salientar que os cálculos em diferentes temperaturas não apresentaram mudanças significativas nos comprimentos e ângulos de ligações como pode ser visto nas coordenadas cartesianas do ácido láurico no material suplementar.

Figura 7. Cargas e comprimentos de ligações da molécula de ácido láurico a 298 K.



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

O comprimento da ligação da carbonila (C-H), do grupo carboxílico, é de 0,972 Å, enquanto que a ligação C-OH é observada com 1,361 Å. Essa diferença no comprimento dessas ligações é atribuída a maior densidade de cargas observada na carbonila.

As ligações C₁-C₂, C₂-C₃ apresenta comprimento de ligação de 1,509 Å e 1,546 Å, respectivamente. Todas as outras ligações, C₃-C₄ a C₁₁-C₁₂, apresentam poucas variações nos seus comprimentos. Como a densidade eletrônica na cadeia carbônica do ácido láurico não apresenta grandes variações observa-se que os comprimentos de suas ligações são próximos.

Considerando os parâmetros geométricos e as cargas da molécula do ácido láurico, podemos sugerir que as ligações mais difíceis de serem rompidas são a ligação C₁-C₂ e a ligação C₁₁-C₁₂, devido aos valores de suas cargas e comprimento das ligações. Todas as outras ligações, na cadeia, apresentam praticamente as mesmas barreiras de energias em uma possível quebra de ligação. Desta forma, como não ocorrem grandes variações de cargas e comprimento de ligações espera-se que o rompimento das ligações seja por vias homolíticas e não heterolíticas. A possibilidade de uma quebra heterolítica e geração de espécies carregadas são através do rompimento da ligação CO-H, devido a maior diferença de cargas e comprimento de ligação. Essa confirmação é verificada quando se analisa as energias de quebra de ligação do ácido láurico Tabela 5.

3.3.3. Energias envolvidas nas quebras das ligações do ácido láurico

A decomposição térmica ou pirólise de óleos vegetais é um método utilizado para a produção de biocombustíveis que consiste na transformando das moléculas dos triacilglicerol em moléculas mais simples e leves. Durante o processo, as ligações das moléculas que constitui o óleo vegetal são rompidas devido ao aquecimento que é submetido e são obtidos compostos de praticamente todos os grupos orgânicos. Os ácidos graxos saturados e os insaturados seguem diferentes rotas de geração de produtos. A literatura relata que nos ácidos graxos saturados as reações de descarbonilação e descaboxilação ocorrem depois da quebra das ligações carbono-carbono (VOGHIA, et al., 1995; MAHER, et al., 2007). Cálculos DFT simulando o rompimento de todas as possíveis quebras de ligações na cadeia do ácido láurico podem verificar as possíveis rotas de reações e dos grupos de compostos que são formados, levando-se em consideração as energias envolvidas durante o aquecimento. Na Tabela 5 são mostradas as entalpias de ligações, na cadeia carbônica, do ácido láurico.

Tabela 5. Energias termodinâmicas das quebras das ligações do ácido láurico.

Quebras na cadeia carbônica	Ligações	Entalpias de ligação (Kcal mol ⁻¹)					
		Temperaturas (Kelvin)					
CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH/Radicais		298 K	398 K	498 K	598 K	698 K	798 K
•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ + •COOH	C ₁ -C ₂	85,886	86,068	86,134	86,104	86,000	85,839
•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ + •CH ₂ COOH	C ₂ -C ₃	74,684	74,974	75,165	75,254	75,251	75,174
•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ + •CH ₂ CH ₂ COOH	C ₃ -C ₄	79,66	80,016	80,257	80,381	80,404	80,345
•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	C ₄ -C ₅	79,120	79,488	79,739	79,873	79,904	79,853
•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	C ₅ -C ₆	78,891	79,26	79,511	79,644	79,677	79,625
•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	C ₆ -C ₇	78,766	79,134	79,387	79,522	79,554	79,505
•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	C ₇ -C ₈	78,726	79,093	79,342	79,475	79,506	79,455
•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	C ₈ -C ₉	78,660	79,030	79,283	79,419	79,453	79,403
•CH ₂ CH ₂ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	C ₉ -C ₁₀	79,142	79,507	79,754	79,883	79,910	79,853
•CH ₂ CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	C ₁₀ -C ₁₁	78,579	78,960	79,215	79,350	79,382	79,330
•CH ₃ + •CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	C ₁₁ -C ₁₂	81,313	81,796	82,135	82,337	82,423	82,414

Para o rompimento de qualquer uma dessas ligações o sistema tem que absorver energia, pois todas as entalpias são positivas, além disso, pode ser observado que durante o aquecimento, 298 K a 798 K, as energias de ligações têm uma mesma tendência e praticamente não sofrem alterações significativas. Como mencionado anteriormente, as ligações mais difíceis de serem rompidas são C₁-C₂ e C₁₁-C₁₂, com energia de aproximadamente 86,00 e 82,00 Kcal mol⁻¹, respectivamente. A ligação mais fácil de ser rompida é a ligação C₂-C₃ com aproximadamente 75,00 Kcal mol⁻¹, isso pode ser constatado pelos valores de densidades de cargas e comprimentos das ligações apresentados na Figura 7. Por outro lado, todas as outras ligações apresentam a mesma tendência de rompimento ou barreira de energia, aproximadamente 79,00 Kcal mol⁻¹.

Na Tabela 6 são apresentados os valores das entalpias de ligações na carboxila da molécula do ácido láurico. Neste caso, foi considerada a possibilidade de quebra de ligações homolíticas e heterolíticas.

Tabela 6. Energias termodinâmicas de quebra das ligações na carboxila do ácido láurico.

Reações na carboxila	Ligações	Entalpias de ligação (Kcal mol ⁻¹)					
		Temperaturas (Kelvin)					
CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH/Radicaís		298 K	398 K	498 K	598 K	698 K	798 K
Homolítica							
[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]• + •OH	C-OH	416,521	416,923	417,269	417,570	417,834	418,067
[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COH]• + •O	C=O	194,771	195,090	195,336	195,524	195,665	195,771
[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]• + •H	CO-H	-47,078	-47,077	-47,076	-47,076	-47,075	-47,075
Heterolítica							
[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO] ⁺ + [OH] ⁻	C-OH	217,070	217,346	217,499	217,549	217,518	217,427
[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ C(OH)] ⁺² + [O] ⁻²	C=O	751,186	751,829	752,434	752,955	753,377	753,710
[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO] ⁻ + [H] ⁺	CO-H	342,509	342,887	343,216	343,505	343,763	343,993

De acordo com a Tabela 6 pode ser observado que uma possível quebra homolítica das ligações C-OH e C=O ocorrem via processo endotérmico e com uma elevada barreira de energia de aproximadamente 417,00 e 195,00 Kcal mol⁻¹ respectivamente. Por outro lado, a quebra da ligação CO-H, ocorre via processo exotérmico e apresenta barreira de energia bastante favorável, aproximadamente -47,00 Kcal mol⁻¹. Desta forma é de se esperar que durante o aquecimento do óleo de babaçu a primeira ligação da carboxila a ser rompida é a ligação CO-H e as outras duas ligações C-OH e C=O não apresentam tendências de ruptura o que pode ser constatado pela alta acidez dos líquidos orgânicos obtidos na pirólise do óleo de babaçu, Tabela 2. Neste caso, as quebras homolíticas, necessitam de catalisadores, apropriados para promover a desoxigenação na carboxila (RAMACHANDRAN, et al., 2011; LUZ JR, et al., 2011).

Outro aspecto a ser considerado é a quebra heterolítica das ligações na carboxila. Observa-se na Tabela 6 que todas as energias de ligação C-OH, C=O e CO-H apresentam valores muito altos e positivos, desta forma uma possível quebra heterolítica nas ligações da carboxila seriam inviáveis.

Os valores encontrados nas Tabelas 5 e 6 mostram que a quebra das ligações dos ácidos graxos, na pirólise, ocorrem preferencialmente na cadeia carbônica. Se observarmos os valores de energias das quebras na carboxila percebemos que suas ligações são muito mais difíceis de serem rompidas do que as ligações na cadeia carbônica e os processos de desoxigenação são inviáveis via processo simples de aquecimento.

3.3.4. Compostos leves formados na pirólise do óleo de babaçu

As Tabelas 7 e 8 apresentam os valores de energias livres de radicais e produtos gerados na formação de diferentes classes de compostos leves no processo de pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu em temperatura de 448 K.

Tabela 7. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₆, C₇ e C₈, a 448 K.

N ^o C/ Δ G	Radical 1	Radical 2	Compostos	Δ G _{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
C ₆	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	
Δ G	-39,848	-197,030	-236,978	-62,398
C ₆	•H	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	
Δ G	-236,324	-0,517	-236,978	-86,299
Ácido carboxílico				
C ₆	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ COOH	
Δ G	-189,125	-197,030	-386,262	-66,696
Álcool				
C ₆	•OH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₂ OH	
Δ G	-75,758	-236,324	-312,193	-69,673
Ácido dicarboxílico				
C ₆	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	HOOC(CH ₂) ₄ COOH	
Δ G	-189,125	-346,313	-535,544	66,343
Hidrocarboneto				
C ₇	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	
Δ G	-39,848	-236,324	-276,271	-62,249
C ₇	•H	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	
Δ G	-0,5167	-275,617	-276,271	-86,364
Ácido Carboxílico				
C ₇	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	
Δ G	-189,125	-236,324	-425,555	-66,477
Álcool				
C ₇	•OH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ H ₂ COH	
Δ G	-75,758	-275,617	-351,486	-69,790
Ácido dicarboxílico				
C ₇	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	HOOC(CH ₂) ₅ COOH	
Δ G	-189,125	-385,607	-574,839	-67,049
Hidrocarboneto				
C ₈	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
Δ G	-39,848	-275,617	-315,564	-62,422
C ₈	•H	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
Δ G	-0,517	-314,910	-315,564	-86,434
Ácido carboxílico				
C ₈	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	
Δ G	-189,125	-275,617	-464,848	-66,603
Álcool				
C ₈	•OH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ H ₂ COH	
Δ G	-75,758	-314,910	-390,779	-69,743
Ácido dicarboxílico				
C ₈	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	HOOC(CH ₂) ₆ COOH	
Δ G	-189,125	-424,900	-614,132	-67,246

Todos os valores de Δ G estão em unidades de Hartree.

Tabela 8. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₉, C₁₀ e C₁₁, a 448 K

N ^o C/ Δ G	Radical 1	Radical 2	Compostos	Δ G _{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
C ₉	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
Δ G	-39,848	-314,910	-354,856	-61,685
C ₉	•H	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
Δ G	-0,5173	-354,20	-354,856	-85,803
Ácido carboxílico				
C ₉	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	
Δ G	-189,125	-314,910	-504,141	-66,449
Álcool				
C ₉	•OH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ H ₂ COH	
Δ G	-75,758	-354,203	-430,072	-69,426
Ácido dicarboxílico				
C ₉	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	
Δ G	-189,125	-464,193	-653,424	-66,594
Hidrocarboneto				
C ₁₀	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
Δ G	-39,848	-354,203	-394,151	-62,415
C ₁₀	•H	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
Δ G	-0,5176	-393,49	-394,151	-86,451
Ácido Carboxílico				
C ₁₀	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH	
Δ G	-189,125	-354,203	-543,434	-66,598
Álcool				
C ₁₀	•OH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ H ₂ COH	
Δ G	-75,758	-393,496	-469,365	-69,780
Ácido dicarboxílico				
C ₁₀	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₈ COOH	
Δ G	-189,125	-503,486	-692,718	-67,368
Hidrocarboneto				
C ₁₁	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
Δ G	-39,848	-393,496	-433,444	-62,316
C ₁₁	•H	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
Δ G	-0,517	-432,78	-433,444	-86,475
Ácido Carboxílico				
C ₁₁	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ COOH	
Δ G	-189,125	-393,496	-582,727	-66,498
Álcool				
C ₁₁	•OH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ H ₂ COH	
Δ G	-75,758	-432,789	-508,659	-69,879
Ácido dicarboxílico				
C ₁₁	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	HOOC(CH ₂) ₉ COOH	
Δ G	-189,125	-542,780	-732,011	-66,852

Todos os valores de Δ G estão em unidades de Hartree.

De acordo com os valores apresentados nas Tabelas 7 e 8 podemos observar que na pirólise do ácido láurico são formados apenas quatro classes de compostos orgânicos com C₆, C₇, C₈, C₉, C₁₀ e C₁₁: hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, álcoois e diácidos, levando-se em consideração apenas a combinação de dois radicais livres que podem gerar uma grande quantidade de compostos. Desta forma, somente as reações mais favoráveis termodinamicamente estão apresentadas nas Tabelas 7, 8, 9, 10 e 11. Todas as outras reações podem ser vistas no material suplementar.

Analisando os valores de energia livre de Gibbs para o C₆ podemos observar que a formação do hidrocarboneto CH₃(CH₂)₄CH₃ é mais favorável energeticamente pela combinação do hidrogênio radicalar, -86,299 Kcal mol⁻¹ e que os álcoois, -69,673 Kcal mol⁻¹ são mais favoráveis energeticamente do que as outras classes de compostos. Essa tendência é observada para todas as classes de compostos leves, C₆, C₇, C₈, C₉, C₁₀ e C₁₁. Observa-se que a variação de energia para uma mesma classe de compostos com diferente número de carbonos é muito pequena. Para a formação do hidrocarboneto radicalar as energias livre de Gibbs foram -86,299, -86,363, -86,434, -85,802, -86,451 e -86,475 Kcal mol⁻¹, C₆, C₇, C₈, C₉, C₁₀ e C₁₁ respectivamente.

Ainda pode ser observados que todas as reações de formação dos possíveis compostos gerados na pirólise do ácido láurico são favoráveis energeticamente em todas as temperaturas estudadas, 298, 348 e 798 K, ver material suplementar. Desta forma, durante o processo de aquecimento do óleo de babaçu podemos prever que ocorre a formação de hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, álcoois e diácidos com seis a onze átomos de carbonos, C₆ a C₁₁.

3.3.5. Principais compostos pesados formados na pirólise do óleo de babaçu

As Tabelas 9, 10 e 11 apresentam os valores de energias livres de radicais e produtos gerados na formação de diferentes classes de compostos pesados no processo de pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu em temperatura de 448 K.

Tabela 9. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₂, C₁₃ e C₁₄, a 448 K.

N ^o C/ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG _{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
C ₁₂	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	
ΔG	-39,848	-432,789	-472,737	-62,390
Ácido carboxílico				
C ₁₂	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-39,848	-582,073	-622,020	-62,348
Ácido dicarboxílico				
C ₁₂	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COH	HOOC(CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-189,125	-582,073	-771,304	-66,852
Hidrocarboneto				
C ₁₃	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃	
ΔG	-79,151	-432,789	-512,030	-56,515
Ácido Carboxílico				
C ₁₃	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ COOH	
ΔG	-267,724	-393,496	-661,313	-58,199
Cetona				
C ₁₃	•CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COCH ₃	
ΔG	-39,848	-546,123	-586,069	-61,466
Éster				
C ₁₃	•CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOCH ₃	
ΔG	-39,848	-621,360	-661,301	-58,296
Ácido dicarboxílico				
C ₁₃	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₁ COOH	
ΔG	-267,724	-542,780	-810,597	-58,534
Hidrocarboneto				
C ₁₄	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃	
ΔG	-197,030	-354,203	-551,323	-56,086
Ácido Carboxílico				
C ₁₄	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ COOH	
ΔG	-267,724	-432,789	-700,606	-58,302
Cetona				
C ₁₄	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ COCH ₃	
ΔG	-546,123	-79,151	-625,362	-55,590
Éster				
C ₁₄	•CH ₂ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOCH ₂ CH ₃	
ΔG	-79,151	-621,360	-700,600	-56,036
Álcool				
C ₁₄	2(•[CH ₃])	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COH]:	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ (CH ₃) ₂ COH	
ΔG	-79,696	-546,642	-626,543	-128,508
Ácido dicarboxílico				
C ₁₄	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₂ COOH	
ΔG	-267,724	-582,073	-849,890	-58,613

Todos os valores de ΔG estão em unidades de Hartre.

Tabela 10. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅, C₁₆ e C₁₇, a 448 K.

N ^o C/ Δ G	Radical 1	Radical 2	Compostos	Δ G _{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
C ₁₅	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃	
Δ G	-157,737	-432,789	-590,616	-56,069
Ácido Carboxílico				
C ₁₅	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ COOH	
Δ G	-307,02	-432,789	-739,899	-57,022
Cetona				
C ₁₅	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₂ CH ₃	
Δ G	-118,444	-546,123	-664,653	-53,596
Éster				
C ₁₅	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₂ CH ₃	
Δ G	-118,444	-621,360	-739,892	-55,141
Ácido dicarboxílico				
C ₁₅	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₃ COOH	
Δ G	-307,02	-582,07	-889,18	-57,413
Hidrocarboneto				
C ₁₆	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃	
Δ G	-197,030	-432,789	-629,909	-56,094
Ácido Carboxílico				
C ₁₆	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ COOH	
Δ G	-346,313	-432,789	-779,192	-56,433
Cetona				
C ₁₆	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₃ CH ₃	
Δ G	-157,737	-546,123	-703,948	-55,008
Éster				
C ₁₆	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₃ CH ₃	
Δ G	-157,737	-621,360	-779,186	-55,635
Ácido dicarboxílico				
C ₁₆	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₄ COOH	
Δ G	-424,900	-503,486	-928,476	-57,137
Hidrocarboneto				
C ₁₇	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃	
Δ G	-236,324	-432,789	-669,202	-55,798
Ácido Carboxílico				
C ₁₇	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ COOH	
Δ G	-385,607	-432,789	-818,485	-56,146
Cetona				
C ₁₇	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₄ CH ₃	
Δ G	-197,030	-546,123	-743,240	-53,894
Éster				
C ₁₇	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₄ CH ₃	
Δ G	-197,030	-621,360	-818,480	-56,076
Ácido dicarboxílico				
C ₁₇	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₅ COOH	
Δ G	-385,607	-582,07	-967,769	-56,515

Tabela 11. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈, C₁₉ e C₂₀, a 448 K.

N ^o C/ΔG	Radical 1	Radical 2	Composto	ΔG _{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
C ₁₈	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₆ CH ₃	
ΔG	-275,617	-432,789	-708,495	-55,779
Ácido Carboxílico				
C ₁₈	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₆ COOH	
ΔG	-424,900	-432,789	-857,778	-56,156
Cetona				
C ₁₈	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₅ CH ₃	
ΔG	-546,123	-236,324	-782,533	-54,156
Éster				
C ₁₈	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₅ CH ₃	
ΔG	-621,360	-236,324	-857,770	-54,273
Ácido dicarboxílico				
C ₁₈	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₆ COOH	
ΔG	-503,486	-503,486	-1007,062	-56,986
Hidrocarboneto				
C ₁₉	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃	
ΔG	-314,910	-432,789	-747,788	-55,577
Ácido Carboxílico				
C ₁₉	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ COOH	
ΔG	-464,193	-432,789	-897,071	-55,832
Cetona				
C ₁₉	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-546,123	-275,617	-821,827	-54,332
Éster				
C ₁₉	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-621,360	-275,617	-897,065	-55,558
Ácido dicarboxílico				
C ₁₉	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₇ COOH	
ΔG	-503,486	-542,780	-1046,355	-56,298
Hidrocarboneto				
C ₂₀	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃	
ΔG	-432,789	-354,203	-787,081	-55,526
Ácido Carboxílico				
C ₂₀	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ COOH	
ΔG	-542,780	-542,780	-1085,648	-55,572
Cetona				
C ₂₀	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-546,123	-314,910	-861,119	-53,843
Éster				
C ₂₀	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-621,360	-314,910	-936,358	-55,651
Ácido dicarboxílico				
C ₂₀	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₈ COOH	
ΔG	-503,486	-582,07	-1085,648	-56,269

De acordo com os valores apresentados nas Tabelas 9, 10 e 11 podemos observar as reações mais favoráveis energeticamente para os compostos pesados gerados durante o processo de pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₂ a C₂₀, pela combinação de apenas dois radicais livres.

Analisando os valores de energia livre de Gibbs para o C₁₂ observamos a formação de três classes de compostos: hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos e ácidos diácidos. Neste caso, não há possibilidade de formação de hidrocarbonetos via hidrogênio radicalar. Assim temos a formação dos ácidos dicarboxílicos como a classe de compostos mais favorável energeticamente -66,852 Kcal mol⁻¹.

Para as classes de compostos com treze carbonos, C₁₃, temos a possibilidade de formação dos hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, cetonas, ésteres e ácidos dicarboxílicos. Neste caso, temos uma pequena variação de energia de formação para as classes de compostos apresentadas e a formação das cetonas é mais favorável energeticamente -61,466 Kcal mol⁻¹.

Na formação dos compostos C₁₄ observa-se a existência dos hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, cetona, ésteres, álcoois e ácidos dicarboxílicos e a formação dos álcoois apresenta-se muito mais favorável energeticamente -128,508 Kcal mol⁻¹. Assim como a classe de composto C₁₄, a C₁₅ apresenta a mesma possibilidade de formação com exceção dos álcoois que não são formados e todas as outras classes de compostos formadas são bastante favoráveis energeticamente.

Para os compostos C₁₆, C₁₇, C₁₈, C₁₉ e C₂₀, temos a possibilidade de formação das mesmas classes de compostos, hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, cetonas, ésteres e ácidos dicarboxílicos. Para as cinco classes de compostos formadas observa-se que elas são bastante favorável energeticamente e a variação de energia de Gibbs de formação dos compostos é muito pequena. Desta forma, podemos prever que do C₁₆ ao C₂₀ a formação de hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, cetonas, ésteres e ácidos dicarboxílicos apresentam as mesmas possibilidades de formação.

Fazendo uma comparação entre a formação das classes de compostos com diferentes números de carbonos observa-se uma pequena variação da energia de Gibbs. Para os hidrocarbonetos tem-se: -62,390, -56,515, -56,086, -56,069, -56,094, -55,798, -55,779, -55,577 e -55,526 Kcal mol⁻¹ para C₁₂, C₁₃, C₁₄, C₁₅, C₁₆, C₁₇, C₁₈, C₁₉ e C₂₀

respectivamente. Desta forma, pode-se esperar que todas as mesmas classes, para diferentes números de carbonos, apresentam tendências de formação parecidas.

4. Conclusão

Através da pirólise do óleo de babaçu, que tem como principal constituinte o ácido láurico, foi possível obter um biocombustível que apresenta altos índices de acidez, evidenciando a presença de ácidos de cadeias curtas e longas.

Durante a pirólise do óleo de babaçu várias classes de compostos são produzidas e neste processo o óleo de babaçu passa por reações primárias e liberação dos ácidos que são quebrados e convertidos em diversos compostos diferentes. Os cálculos DFT mostraram que o mecanismo mais provável de quebra das reações primárias é o de eliminação de hidrogênio beta (β). Com os parâmetros geométricos de comprimentos das ligações, cargas Chelpg da molécula do ácido láurico e determinação das energias termodinâmicas das espécies envolvidas foram possíveis identificar que as ligações C_1-C_2 e $C_{11}-C_{12}$ são as mais difíceis de serem rompidas e a ligação mais receptível a quebra é a C_2-C_3 . Na carboxila a reação mais favorável energeticamente a ser rompida é a $CO-H$ e a quebra heterolítica e formação de cátions e ânion é desfavorável termodinamicamente.

Cálculos DFT de parâmetros termodinâmicos corroboram na interpretação dos resultados de cromatografia dos compostos leves e pesados formados. Com a combinação de dois radicais gerados durante a pirólise e determinação de suas energias livres de Gibbs pode-se dizer que os compostos formados podem apresentar de seis a vinte três átomos de carbonos. Desta forma, uma variedade muito grande de compostos tais como hidrocarbonetos, ácidos carboxílicos, ácidos dicarboxílicos, cetonas álcoois, ésteres são formados e a combinação de três ou mais radicais e conversão dos compostos formados em outras classes também parece possível.

5. REFERÊNCIAS

ALBUQUERQUE, M. L. S.; GUEDES, I.; ALCANTARA, P.; & MOREIRA, S. G. C. Infrared absorption spectra of Buriti (*Mauritia flexuosa* L.) oil. **Vibrational Spectroscopy**, v. 33 p. 127-131, 2003.

ALENCAR, J. W.; ALVES, P. B.; CRAVEIRO A. A. Pyrolysis of tropical vegetable oils. **J. Agric. Food chem.** V. 31, p. 1268-1270, 1983.

ALVES, P. B.; ALENCAR, J. W. E.; CRAVEIRO A. A. Comparação entre os produtos de pirólise do ácido oleico e esteárico. **Química Nova**, v. 11, n. 2, p. 199-203, 1988.

CHANG, C.C.; WAN, S.W. China's motor fuels from oil. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 39, n. 12, p. 1543-1548, 1947.

DA SILVA, R. B.; LIMA NETO, A. F.; SOARES DOS SANTOS, L. S.; DE OLIVEIRA LIMA, J. R.; CHAVES, M. H.; DOS SANTOS, J. R. Catalysts of Cu(II) and Co(II) ions adsorbed in chitosan used in transesterification of soy bean and babassu oils - a new route for biodiesel syntheses. **Bioresource Technology**, v. 99, p. 6793-6798, 2008.

DENNINGTON, R. D.; KEITH, T. A.; MILLAN, J. M. **GaussView**, v. 5.0.8, Semicchem, Inc.: Shawnee KS, 2008.

FRISCH, M. J.; G. W.; TRUCKS, H. B.; SCHLEGEL, G. E.; SCUSERIA, M. A.; ROBB, J. R.; CHEESEMAN, G.; SCALMANI, V.; BARONE, B.; MENNUCCI, G. A.; PETERSSON, H.; NAKATSUJI, M.; CARICATO, X.; LI, H. P.; HRATCHIAN, A. F.; IZMAYLOV, J.; BLOINO, G. ZHENG, J. L.; SONNENBERG, M.; HADA, M.; EHARA, K.; TOYOTA, R.; FUKUDA, J. Y.; HASEGAWA, M.; ISHIDA, T.; NAKAJIMA, Y.; HONDA, O.; KITAO, H.; NAKAI, T.; VREVEN, J. A.; MONTGOMERY, JR., J. E., PERALTA, F.; OGLIARO, M.; BEARPARK, J. J.; HEYD, E.; BROTHERS, K. N.; KUDIN, V. N.; STAROVEROV, R.; KOBAYASHI, J.; NORMAND, K.; RAGHAVACHARI, A.; RENDELL, J. C.; BURANT, S. S.; IYENGAR, J.; TOMASI, M.; COSSI, N.; REGA, J. M.; MILLAM, M.; KLENE, J. E.; KNOX, J. B.; CROSS, V.; BAKKEN, C.; ADAMO, J.; JARAMILLO, R.; GOMPERS, R. E.; STRATMANN, O.; YAZYEV, A. J.; AUSTIN, R.; CAMMI, C.; POMELLI, J. W.; OCHTERSKI, R. L.; MARTIN, K.; MOROKUMA, V. G.; ZAKRZEWSKI, G.A.; VOTH, P.; SALVADOR, J. J.; DANNENBERG, S.; DAPPRICH, A. D.; DANIELS, O.; FARKAS, J. B.; FORESMAN, J.; VINCENT ORTIZ, J.; CIOSLOWSKI, D. J. FOX, **GAUSSIAN 09 REVISION D.01**, GAUSSIAN INC., WALLINGFORD, CT 2009.

FUESS, L. T.; GARCIA, M. L. Bioenergy from stillage anaerobic digestion to enhance the energy balance ratio of ethanol production. **J Environ Manage**, v. 162, p. 102-114, 2015.

HE, Q.; XIA, Q.; WANG, Y.; LI, X.; ZHANG, Y.; HU, B.; WANG, F. Biodiesel Production: Utilization of Loofah Sponge to Immobilize *Rhizopus chinensis* CGMCC #3.0232 Cells as a Whole-Cell Biocatalyst. **J Microbiol Biotechnol**, v. 26, n. 7, p. 1278-1284, 2016.

HUANG, T. J.; CHIANG, D. Y.; SHIH, C.; LEE, C. C.; MAO, C. W.; WANG, B. C. Promoted decomposition of NO_x in automotive diesel-like exhausts by electro-catalytic honeycombs. **Environmental Science Technology**, v. 49, p. 3711-3717, 2015.

IDEM, R. O.; KATIKANENI, S. P. R.; BAKHSHI, N. Thermal cracking of canola oil: reaction products in the presence and absence of steam. **Energy and Fuels**, v. 10, p. 1150-1162, 1996.

IDEM, R. O.; KATIKANENI, S. P. K; NARENDRA, N. B. Catalytic conversion of canola oil to fuels and chemicals: roles of catalyst acidity, basicity and shape selectivity on product distribution. **Fuel Processing Technology**, v. 51, p. 101-125 1997.

ILHAM, Z.; SAKA, S. Esterification of glycerol from biodiesel production to glycerol carbonate in non-catalytic supercritical dimethyl carbonate. **Springerplus**, v. 5, n. 1, p. 923, 2016.

KAI, T.; MAK, G. L.; WADA, S.; NAKAZATO, T.; TAKANASHI, H., & UEMURA, Y. Production of biodiesel fuel from canola oil with dimethyl carbonate using an active sodium methoxide catalyst prepared by crystallization. **Bioresource Technology**, v. 163, p. 360-3, 2014.

KLOPROGGE, J. T.; DUONG, L. V.; FROST, R. L. A review of the synthesis and characterisation of pillared clays and related porous materials for cracking of vegetable oils to produce biofuel. **Environmental**, v. 47, n. 7, p. 967-981, 2005.

KUBÁTOVÁ, A., LUO, Y., ŠŤÁVOVÁ, J., SADRAMELI, S. M., AULICH, T., KOZLIAK, E., & SEAMES, W. New path in the thermal cracking of triacylglycerols (canola and soybean oil). **Fuel**, v. 90 p. 2598-2608, 2011.

LLAMAS, A.; AL-LAL, A.M.; HERNANDEZ, M.; LAPUERTA, M.; & CANOIRA, L. Biokerosene from Babassu and Camelina Oils: Production and Properties of Their Blends with Fossil Kerosene. **Energy & Fuels**, v. 26, p. 5968-5976, 2012.

LI, H.; YU, P.; SHEN, B. Biofuel potential production from cottonseed oil: a comparison of non-catalytic and catalytic pyrolysis on fluidized bed reactor. **Fuel Processing Technology**, v. 90, p. 1087-1092, 2009a.

LIMA, D. G.; SOARES, V. C .D.; RIBEIRO, E. B.; CARVALHO, D. A.; CARDOSO, E. C. V.; RASSI, F. C.; MUNDIM, K. C.; RUBIM, J. C.; SUAREZ, P. A. Z. Diesel-like fuel obtained by pyrolysis of vegetable oils. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 71, p. 987-996, 2004.

LI, J.; YAN, R.; XIAO, B.; WANG, X.; YANG, H.; Influence of temperature on the formation of oil pyrolyzing palm oil wastes in a fixed bed reactor. **Energy and Fuels**, v. 21, p. 2398-2407, 2007.

LÔBO, I.P.; FERREIRA, S. L. C. Biodiesel: quality parameters and analytical methods. **Química nova**, v. 32 n.06, p. 1596-1609, 2009.

LUZ JR, G. E.; SANTOS, A. G. D.; MELO, A. C. R.; OLIVEIRA, R. M.; ARAUJO, A. S.; & FERNANDES, V. J. Thermal catalytic cracking of buriti oil (*Mauritia flexuosa* L.) over LaSBA-15 mesoporous materials. **Fuel Processing Technology**, v. 92, p. 2099-2104, 2011.

LIMA, J. R. O.; SILVA, R. B.; SILVA, C. M. Biodiesel de babaçu (*Orbignya phalerata*) obtido por via etanólica. **Química Nova** v. 30 p. 600-603, 2007.

LUZ JR, G.E. **Obtenção de diesel verde por craqueamento termocatalítico de óleo de buriti (*mauritia flexuosa l.*) sobre materiais nanoestruturados do tipo Lasba-15.** 2010. Tese (Doutorado em química) – Departamento de química. Universidade Federal do Rio Grande do Norte.

MANDER, P.; YOO, H. Y.; KIM, S. W.; CHOI, Y. H.; CHO, S. S.; & YOO; J. C. Transesterification of waste cooking oil by an organic solvent-tolerant alkaline lipase from *Streptomyces* sp. CS273. **Appl Biochem Biotechnol**, v. 172, n. 3, p. 1377-89, 2014.

MAHER, K. D.; BRESSLER, D. C. Pyrolysis of triglyceride materials for the production of renewable fuels and chemicals. **Bioresource Technology**, v. 98, n. 12, p. 2351-68, 2007.

MCLEAN, A. D.; CHANDLER, G. S., “Contracted Gaussian-basis sets for molecular calculations. 1. 2nd row atoms, Z=11-18”. **J. Chem. Phys**, v. 72, p. 5639-5648, 1980.

PUHAN, S.; JEGAN, R.; BALASUBBRAMANIAN, K.; NAGARAJAN, G. Effect of injection pressure on performance, emission and combustion characteristics of high linolenic linseed oil methyl ester in a DI diesel engine. **Renew Energy**, v. 34, p. 1227–1233, 2009.

PUNA, J. F.; GOMES, J. F.; CORREIA, M. J. N.; SOARES DIAS, A. P.; & BORDADO, J. C. Advances on the development of novel heterogeneous catalysts for transesterification of triglycerides in biodiesel. **Fuel**, v. 89 p. 3602-3606, 2010.

RAMACHANDRAN, K.; SIVAKUMAR, P.; SUGANYA, T.; & RENGANATHAN, S. Production of biodiesel from mixed waste vegetable oil using an aluminium hydrogen sulphate as a heterogeneous acid catalyst. **Bioresource Technology**, v. 102, p. 7289-7293 2011.

RAGHAVACHARI, K.; BINKLEY, J. S.; SEEGER, R.; POPLE, J. A. “Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 20. Basis set for correlated wave-functions,” **J. Chem. Phys.**, v. 72 p. 650-654, 1980.

VIJAYAKUMAR, C.; RAMESH, M.; MURUGESAN, A.; PANNEERSELVAM, N.; SUBRAMANIAM, D.; & BHARATHIRAJA, M., Biodiesel from plant seed oils as an alternate fuel for compression ignition engines-a review. **Environmental Science Pollution Researche-Int**, v. 23, p. 24711-24730, 2016.

VOGHIA, E. BOOCOOCK, D. G. B.; KONAR, A. Pathways for the deoxygenation of triglycerides to aliphatic hydrocarbons over activated alumina. **Energy & Fuels**, v. 9, n. 6, p. 1090-1096, 1995.

WANGA, K.; ZHANGA, X.; ZHANG, B. J.; ZHANG, Z. B.; FANA, C.; HAN, P. Theoretical Study on Free Fatty Acid Elimination Mechanism for Waste Cooking Oils to Biodiesel over Acid Catalyst. **J Mol Graph Model**, v. 66, p. 41-46, 2016.

WENTZELL; J. J.; LIGGIO; J.; LI; S. M.; VLASENKO; A.; STAEBLER; R.; LU; G.; BROOK; J. R.. Measurements of gas phase acids in diesel exhaust: a relevant source of H₂CO?. **Environ Sci Technol**, v. 47, n. 14, p. 7663-71, 16 2013.

WILLIAMS, P.; HORNE, P. A. The influence of catalytic type on the composition of upgraded biomass pyrolysis oils. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 31, p. 39-61, 1995.

ZHANG, L.; ZHANG, P. Towards high-level theoretical studies of large biodiesel molecules: an ONIOM [QCISD(T)/CBS:DFT] study of hydrogen abstraction reactions of $C(n)H(2n+1)COOC(m)H(2m+1) + H$. **Phys Chem Chem Phys**, v. 17, n. 1, p. 200-208, 2015.

CAPÍTULO II

Produção de biocombustíveis por Craqueamento termocatalítico de óleo de babaçu sobre bauxita protonada como catalisador

Resumo

No presente trabalho, a reação de craqueamento térmico do óleo de babaçu, na presença de Catalisadores heterogêneos (bauxita calcinada e bauxita protonada), foi utilizada para produção de biocombustíveis alternativos. A seleção de catalisadores heterogêneos foi devido aos sítios ácidos de Lewis que eles apresentam. Sua caracterização foi realizada por meio de Difração de Raios-X (DRX), espectroscopia na região do Infravermelho (FTIR) e adsorção-dessorção de nitrogênio. O material se mostrou bastante promissor nas reações de desoxigenação do óleo de babaçu resultando em líquidos orgânicos (LO) de acidez relativamente baixa, mostrando a ação do catalisador utilizado. O líquido orgânico obtido em temperaturas acima de 270 °C apresentou uma mistura de hidrocarbonetos semelhantes ao diesel mineral. Essas características demonstram que o biocombustível sintetizado pode ser usado misturado ao diesel mineral e proporcionar uma diminuição do teor de enxofre, que atua com precursor de óxidos poluentes.

Palavras-chave: Biocombustível, óleo de babaçu, bauxita, craqueamento termocatalítico.

Abstract

In the present work, the thermal cracking reaction of babassu oil, in the presence of heterogeneous catalysts (calcined bauxite and protonated bauxite), was used for the production of alternative biofuels. The selection of heterogeneous catalysts was due to the Lewis acid sites they present. Its characterization was performed by means of X-ray diffraction (XRD), Infrared spectroscopy (FTIR) and nitrogen adsorption-desorption. The material showed to be very promising in the deoxygenation reactions of babassu oil resulting in organic liquids (LO) of relatively low acidity, showing the action of the catalyst used. The organic liquid obtained at temperatures above 270 °C showed a mixture of hydrocarbons similar to mineral diesel. These characteristics demonstrate that the synthesized biofuel can be used mixed with mineral diesel and provide a reduction in the sulfur content, which acts with a precursor of polluting oxides.

Keywords: Biofuel, babassu oil, bauxite, thermo-catalytic cracking.

1. Introdução

Atualmente a maior parte de toda demanda de energia consumida no mundo é oriunda dos combustíveis fósseis, petróleo, carvão mineral e gás natural. Esses recursos são formados na natureza pela decomposição de matéria orgânica, animais e vegetais, através de milhares de anos e por isso não são considerados combustíveis renováveis (SUSLICK & MACHADO, 1989). Esses combustíveis apresentam como principais desvantagens o fato da maior parte das reservas mundiais estarem situadas em regiões de conflitos políticos, juntamente com a possibilidade de esgotamento de suas reservas, além de ser o principal responsável pela liberação de gases poluentes como os compostos aromáticos, CO_x , NO_x e SO_x (ZIELINSKA; 2005; HUANG et al., 2015; GRAVER et al., 2016).

Devido a pressões internacionais, vários esforços têm sido feitos para minimizar a utilização dos combustíveis fósseis, despertando a busca incessante por novas fontes de suprimentos de energias, assim como a busca por tecnologias mais eficientes que possam promover a substituição desses combustíveis. Os biocombustíveis apresentam-se como uma das principais fontes de combustíveis renováveis e limpos, os quais são combustíveis derivados de biomassa renovável para uso em motores a combustão interna que possa substituir parcial ou totalmente os combustíveis fósseis (VIJAYAKUMAR et al., 2016; SEMWAL et al., 2011).

O biodiesel é um exemplo de biocombustível biodegradável derivado de fontes renováveis constituído de misturas de ésteres de ácidos graxos com monoálcoois de cadeia curta, como metanol e etanol, e para sua obtenção é comumente utilizado o processo de transesterificação (GEORGOGIANNI et al., 2009; RASHTIZADEH et al., 2010). Este é um procedimento de elevado custo, em decorrência das matérias-primas utilizadas, além de gerar como subprodutos a glicerina, que possui baixo valor comercial, quando não pura, e é capaz de provocar entupimentos dos dutos nas usinas de biodiesel. Visto as essas dificuldades, o processo de craqueamento de biomassa, em especial de óleos vegetais, é uma rota alternativa para a obtenção de biocombustíveis.

O craqueamento ou pirólise de óleos vegetais consiste na quebra de suas moléculas, em decorrência da elevada temperatura em que são submetidos, resultando na obtenção de frações líquidas de biocombustível, semelhantes ao combustível de origem mineral.

Durante este processo, as cadeias carbônicas do óleo vegetal são quebradas passando a ter estruturas compostas por hidrocarbonetos mais leves e simples, com propriedades físico-químicas próximas às dos combustíveis fósseis, sendo possível seu uso em motores do ciclo diesel. O craqueamento pode ser somente térmico, quando o óleo vegetal é submetido a elevadas temperaturas e termocatalítico, quando um catalisador é utilizado junto ao óleo no processo de rompimento molecular (KUBÁTOVÁ et al., 2011; YANG et al., 2011).

Os óleos vegetais são substâncias que apresentam elevado potencial quando utilizados na obtenção de biocombustíveis (RAMACHANDRAN et al., 2011; KAI et al., 2014), pois são triacilglicerol formados pela reação de glicerol com moléculas de ácidos graxos. Dentre os diversos tipos de óleos vegetais utilizados no craqueamento, o óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) é uma excelente opção para a produção de biocombustível uma vez que sua composição é basicamente saturada, com cadeia carbônica que varia entre 12 a 18 átomos de carbono (PAIVA et al., 2013; DA SILVA et al., 2008; LLAMAS et al., 2012).

Como a pirólise meramente térmica resulta em biocombustível com acidez elevada, vários catalisadores vêm sendo desenvolvidos com o objetivo de melhorar a obtenção de biocombustíveis menos ácidos. Estudos mostram que sólidos com estruturas ordenadas de poros e com sítios ácidos são mais seletivos para frações líquidas menos ácidas, além disso, pode-se destacar também um aumento da seletividade da fração semelhante ao diesel mineral à medida que há um aumento e ativação dos sítios ácidos do catalisador sólido (PUNA et al., 2010; VIEIRA et al., 2013; ZABETI et al., 2009). Neste contexto, a bauxita que é uma rocha residual constituída por minerais de hidróxidos de alumínio; gibbsita $\gamma\text{-Al(OH)}_3$, diásporo $\alpha\text{-AlO(OH)}$, boehmita $\gamma\text{-AlO(OH)}$, óxidos e hidróxidos de ferro, sílica, argilominerais, óxido de titânio e minerais residuais (COUPERTHWAITTE et al., 2014; PRADO et al., 2012), pode ser utilizada como um catalisador com sítios ácidos e de baixo custo, para a produção de biocombustíveis com propriedades físico-químicas mais próximas dos derivados do petróleo.

Neste trabalho, utilizou-se um catalisador à base de bauxita capaz de facilitar as reações de descarboxilação e desoxigenação dos ácidos graxos existentes no óleo de babaçu (*Orbignya phalerata*) obtendo um biocombustível com propriedades bastante semelhantes com às dos combustíveis de origens fósseis.

2. Parte Experimental

2.1. Preparação do catalisador

O catalisador usado no craqueamento termocatalítico, bauxita, fornecida pela mineradora curimbaba (Poços de calda, MG), passou por um processo de calcinação para remoção de matéria orgânica, impurezas e ativação dos sítios ácidos existentes no material com posterior protonação. As amostras foram submetidas à atmosfera dinâmica de ar sintético (100 mL min^{-1}), e aquecimento de $10 \text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$, de 25 a $1000 \text{ }^\circ\text{C}$. Cada amostra foi mantida por 4 horas sob atmosfera utilizada.

O material calcinado foi ativado utilizando-se solução de cloreto de amônia (NH_4Cl) $1,00 \text{ mol L}^{-1}$ em um sistema de refluxo a $90 \text{ }^\circ\text{C}$ por um período de 2 hora. Em seguida, a mistura foi resfriada e o catalisador foi separado por filtração simples. Para remoção do excesso de cloreto de amônia o material foi submetido a sucessivas lavagens com água destilada e secagem a $150 \text{ }^\circ\text{C}$.

2.2. Caracterização do catalisador

As estruturas cristalinas da bauxita foram caracterizadas por difração de Raios-X (DRX) em um equipamento XRD-6000, Shimadzu, utilizando uma fonte de $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda=1,54056 \text{ nm}$) e filtro de níquel com uma voltagem de tubo de 30 KV e 30 Ma, respectivamente. Os dados foram coletados usando o método do pó na faixa de 2θ de 1 a 75 graus e velocidade de varredura de $2,00 \text{ graus min}^{-1}$ em intervalos de 0,02 graus.

Os espectros de absorção na região do infravermelho com transformada de Fourier foram feitos na região de $4000 \text{ a } 400 \text{ cm}^{-1}$ com resolução de 4 cm^{-1} em um espectrômetro de infravermelho da Bomem, modelo MB102. As amostras foram diluídas em KBr sólido (1 % m/m) e prensagem a 5 toneladas para obtenção das pastilhas a serem analisadas.

Através das análises de adsorção/dessorção de nitrogênio determinou-se a área superficial, volume de poros e diâmetro médio de poros das amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada. As isotermas de adsorção/dessorção foram obtidas em um equipamento ASAP2010 da Micrometrics. Para isso, utilizou-se 0,25 mg de amostra de bauxita e as isotermas de adsorção/dessorção foram obtidas em pressões parciais (p/p_0) de 0,01 a 0,95. A área superficial específica das amostras de bauxita foi determinada pelo método de BET e o método do BJH foi utilizado para determinar o volume total de poros e diâmetro médio de poros.

2.3. Craqueamento do óleo vegetal

O óleo de babaçu é constituído por aproximadamente 84% de ésteres de ácidos graxos saturados, característica excelente para a produção de biocombustíveis, cuja composição química é apresentada na Tabela 1 (LIMA et al., 2007). O óleo de babaçu foi obtido a partir de fontes comerciais, armazenado e guardado para posterior utilização.

Tabela 1. Composição química do óleo de babaçu.

Ácido Graxo		Massa molar (g mol^{-1})	Composição percentual (%)
Nome	Simbologia		
Ácido Caprílico	C08:0	144,21	5,0
Ácido Cáprico	C10:0	172,26	6,0
Ácido Láurico	C12:0	200,32	44,0
Ácido Mirístico	C14:0	228,37	17,0
Ácido Palmítico	C16:0	256,42	8,0
Ácido Esteárico	C18:0	284,45	4,0
Ácido Oléico	C18:1	282,46	14,0
Ácido Linoléico	C18:2	280,44	2,0

O craqueamento térmico do óleo vegetal foi feito em um sistema de destilação simples. Utilizado um balão de destilação de 250 mL, um termopar, usado para medir a temperatura do sistema, um condensador e uma manta de aquecimento. Em cada processo, 100 g do óleo e 5 % de bauxita foram aquecidos da temperatura ambiente até 550 °C a uma taxa de aquecimento de 10 °C min^{-1} . Duas frações aquosas foram separadas

pelo processo de decantação: uma fração constituída pelos compostos mais leves, obtida em temperaturas abaixo de 270 °C, e outra constituída pelos compostos mais pesados, obtida em temperaturas a partir de 270 °C. Cada uma dessas frações foi separada da fase aquosa e denominada de líquido orgânico (LUZ JR et al., 2011).

2.4. Caracterização do biocombustível

Os espectros de absorção na região do infravermelho com transformada de Fourier foram feitos na região de 4000 a 400 cm^{-1} com resolução de 4 cm^{-1} em um espectrômetro de infravermelho da Bomem, modelo MB102. As amostras do líquido orgânico foram diluídas gotejando-se 1% m/m em pastilha de KBr sólido para posterior análises.

As análises de GC-MS foram realizadas em um cromatógrafo Shimadzu QP2010-SE equipado com uma coluna Rtx®-5MS de 30 m contendo 5% fenil, 95% dimetilpolissiloxano e gás Hélio usado como arraste. A temperatura do injetor foi de 270 °C e a do detector 350 °C. A coluna foi inicialmente aquecida a 100 °C com taxa de aquecimento de 10 °C min^{-1} até 180 °C por 1 minuto, em seguida com taxa de aquecimento de 4 °C min^{-1} por 10 minutos até 270 °C. A análise com o detector de massa foi realizada, com o tempo de aquisição de 41,50 min e corte do solvente feito em 3,5 minutos. A aquisição dos espectros de massa foi feita na faixa de 35 a 500 Daltons pelo método de ionização por impacto de elétrons, com energia de ionização de 70 eV (voltagem 1.5 KV, analisador do tipo quadrupolo) e fonte de íons a 270 °C. O banco de dados do programa GCMS solutions foi usado para detecção dos compostos.

A seletividade dos hidrocarbonetos encontrados nos cromatogramas foi obtida fazendo-se integração dos picos como implementado no programa Origin 2016.

O índice de acidez dos biocombustíveis foi determinado utilizando-se o método da OACS - Cd3-63. Nesse método uma solução alcoólica de KOH 1,00 mol L^{-1} é usada como titulante e fenolftaleína como indicador. As amostras tituladas, em triplicata, foram diluídas em uma mistura 1:1 de isopropanol e tolueno.

As análises dos biocombustíveis obtidos através do craqueamento termocatalítico, usando bauxita calcinada 5.0% e bauxita protonada 5.0%, do óleo de babaçu foram realizadas de acordo com as normas da *American Society of Testing and*

Materials (ASTM) e (*Comité Européen de Normalisation – CEN*). As análises físico-químicas realizadas foram: Viscosidade cinemática 40 °C (ASTM D-445), Massa específica a 20°C (ASTM D-1298), Índice de cetano (ASTM D613), Corrosividade ao cobre (ASTM D130), Teor de enxofre (ASTM D5453), Índice de iodo (EM ISO 1411), Índice de peróxido (MBR-9878) e Estabilidade oxidativa (EN-14112) (LÔBO & FERREIRA, 2009; BACHA et al., 2016).

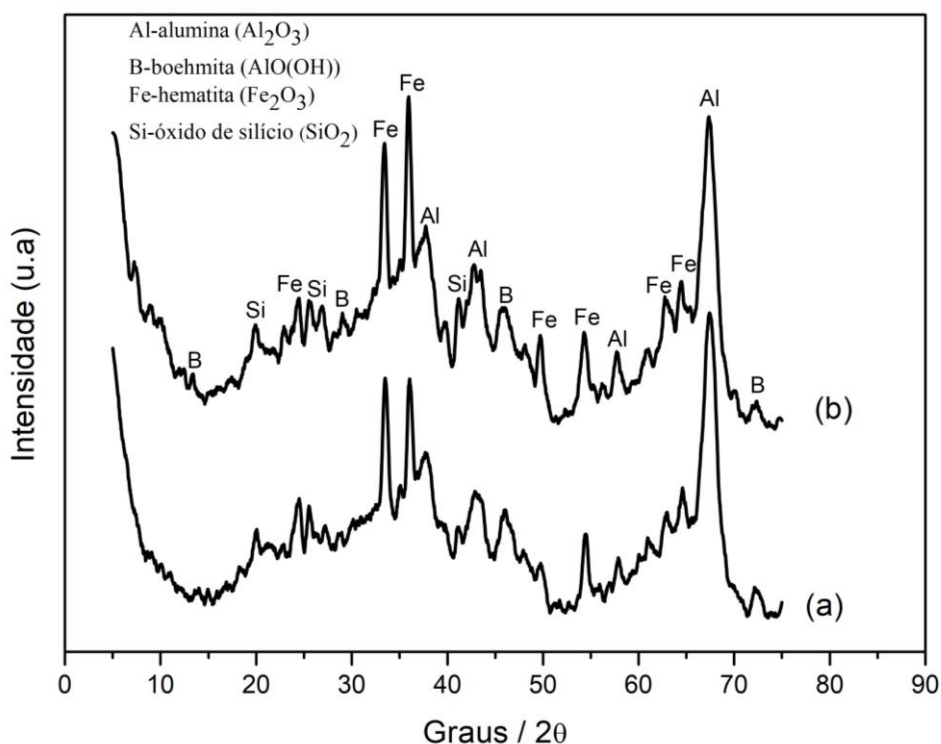
3. Resultados e discussão

3.1. Caracterização do catalisador

3.1.1. Análise estrutural por difração de Raios-X

Os difratogramas de Raios-X das amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada são apresentados na Figura 1.

Figura 1. Difratograma de Raios-X das amostras de bauxita protonada (a) e bauxita calcinada (b).



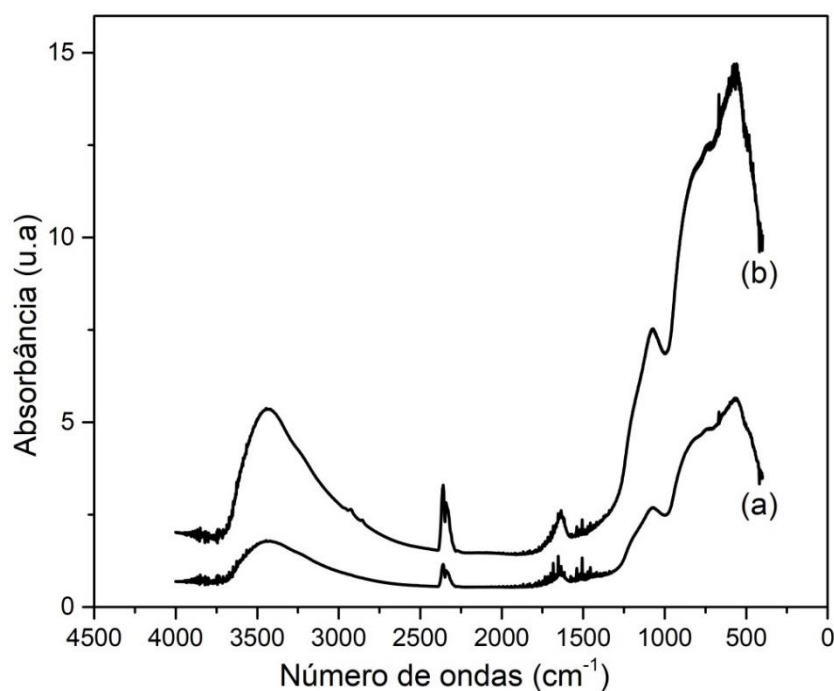
Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Os resultados de Raios-X mostram os picos referentes à alfa-alumina (α -Al₂O₃, JCPDS 42-1468) e boehmita (γ -AlO(OH), JCPDS 83-2384) presentes nas amostras de bauxita (SATHYASEELAN et al., 2013; PRADO et al., 2012). As fases de alumina e boehmita são formadas durante o processo de calcinação (1200 °C) ocorrendo perdas das hidroxilas da gibbsita (γ -Al(OH)₃) levando à formação de α -alumina e γ -boehmita, através de reações de estado sólido. Observa-se também que as intensidades dos picos referentes às duas amostras de bauxita não tiveram grandes modificações devido a baixa acidez da solução protonante, NH₄Cl 1,0 mol L⁻¹. A acidez dessa solução não provocou o processo de dissolução e diminuição dos óxidos de ferro, alumínio e silício. Observam-se também picos referentes ao óxido de ferro (Fe₂O₃, JCPDS 85-0599) proveniente da transformação da goethita (FeO(OH)) em hematita (Fe₂O₃) pela perda da hidroxila, provocada pela elevação da temperatura durante a calcinação. Além disso, verificam-se picos referentes ao óxido de silício (SiO₂ JCPDS 87-2096) que se formam em temperaturas acima de 900 °C. Esses resultados estão de acordo com os encontrados na literatura (PASCOL & PANDOLFELLI, 2000; WELLINGTON et al., 2013; CARVALHO et al., 2012).

3.1.2. Análise por espectroscopia na região do infravermelho

Os espectros de infravermelho (FTIR) da bauxita calcinada e bauxita protonada são mostrados na Figura 2.

Figura 2. Espectro de absorção FTIR das amostras de bauxita protonada (a) e bauxita calcinada (b).



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

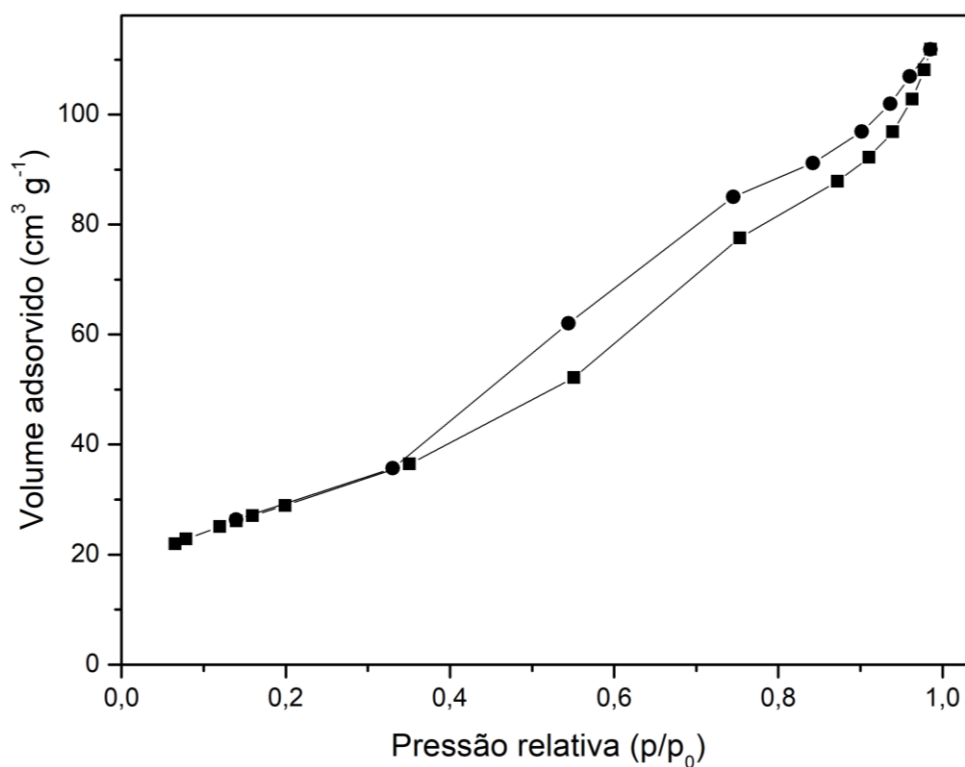
Os espectros de infravermelho das amostras de bauxita são observados bandas largas na região entre 3000 e 3700 cm^{-1} referente ao estiramento simétrico do grupo O-H da fase boehmita. Em 1637 cm^{-1} é observado a banda de deformação angular OH. A banda observada na região de 1080 cm^{-1} é referente ao estiramento assimétrico Si-O-Al. Na região de 547 cm^{-1} são observadas as bandas de deformação angular do grupo O-H da fase boehmita. Ainda observam-se frequências vibracionais em 1043 cm^{-1} do grupo O-H da fase boehmita. Os espectros de infravermelho das amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada apresentam comportamentos bastante similares, porém, a amostra de bauxita protonada apresenta menores intensidades de picos devido à interação do próton proveniente da solução de NH_4Cl com o grupo O-H da boehmita (CCOUPERTHWITE et al., 2014; PRADO et al., 2012; ADAMCZYK & DULGON, E., 2012).

A banda em 2362 cm^{-1} observado no espectro de infravermelho é atribuída à presença de grupos CO adsorvidos, resultante da combustão no preparo do material. Carvalho et al, 2012 observou picos na mesma região. No espectro da bauxina natural não é observado essa banda (KLOPROGGGE et al., 2002).

3.1.3. Isotermas de Adsorção/Dessorção de Nitrogênio

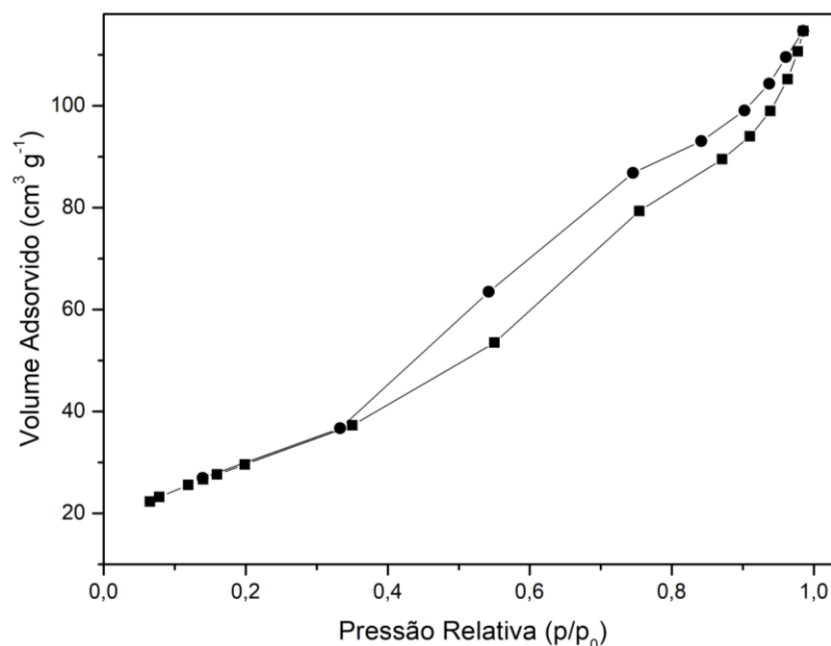
As isotermas de adsorção/dessorção de nitrogênio e a distribuição dos diâmetros de poros obtida para as amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada são apresentadas nas Figuras 3 e 4.

Figura 3. Isotermas de adsorção/dessorção de N_2 obtida na amostra de bauxita calcina.



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Figura. 4 Isotermas de adsorção/dessorção de N₂ obtida na amostra de bauxita protonada.



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

De acordo com os gráficos das Figuras 3 e 4, as isotermas de adsorção/dessorção de N₂ para bauxita calcinada e protonada apresentaram isotermas do tipo IV com histerese do tipo H3, característico de materiais mesoporosos (poros intermediários entre 2 a 50 nm). O formato loop dessas histereses está associado ao fenômeno de condensação e evaporação capilar do N₂ nos poros. As histereses do tipo H3 estão associadas à sólidos com poros em formato de cunhas, cones ou placas paralelas (ROUQUEROL et al., 2013).

As propriedades texturais das amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada obtidas a partir das isotermas de adsorção/dessorção de N₂ são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 Propriedades texturais das amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada.

Amostra	Área superficial total (m ² g ⁻¹)	Volume de poros (cm ³ g ⁻¹)	Diâmetro de poros (nm)
Bauxita calcinada	106,19	0,17	6,04
Bauxita protonada	108,85	0,18	6,52

De acordo com os resultados da Tabela 2 pode-se observar que o tratamento das amostras com solução de cloreto de amônia, provocou um pequeno aumento na área superficial das amostras. Verifica-se pequeno aumento no diâmetro médio dos poros e praticamente não houve alteração no volume dos poros.

Estas pequenas modificações nas propriedades texturais das amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada mostram que não houve desorganização considerável das estruturas das amostras já que o tratamento feito com solução de cloreto de amônio, levemente ácida, não foi capaz de provocar a dissolução de átomos de alumínio, e quebra de ligações.

3.2. Caracterização do biocombustível

3.2.1. Índice de acidez

O índice de acidez é uma estimativa direta da quantidade de ácidos livres nos produtos do craqueamento sendo expresso numericamente pela massa em miligrama de base necessária para neutralizar a mistura. O monitoramento da acidez é de grande importância, principalmente durante a estocagem do biocombustível, na qual a alteração dos valores neste período pode significar a presença de água promovendo a hidrólise do biocombustível e liberação de ácidos graxos. Além disso, a presença de água está associada à proliferação de micro-organismos e corrosão em tanques de estocagem com depósitos de sedimentos. Na Tabela 3 encontram-se os resultados de índices de acidez para os biocombustíveis obtidos através do craqueamento térmico e termocatalítico, do óleo de babaçu, utilizando-se bauxita calcinada e bauxita protonada assim como seus respectivos desvios padrões.

Tabela 3. Índice de acidez dos biocombustíveis do óleo de babaçu sobre catalisadores de bauxita e craqueamento térmico.

Amostra	Índice de acidez (mg de KOH g ⁻¹ de amostra)	Desvio padrão (DS)
Térmico	112	1,2
Bauxita calcinada	141	1,1
Bauxita protonada	18,2	0,9

Método da OACS - Cd3d-63

Os produtos obtidos pelo craqueamento termocatalítico utilizando a bauxita protonada provocou considerável redução no índice de acidez quando comparados com o craqueamento térmico e o craqueamento termocatalítico com bauxita calcinada, demonstrando a ação desoxigenante dessa amostra no processo de craqueamento termocatalítico do óleo de babaçu. Esse resultado corrobora com o que foi observado nos espectros de infravermelho mostrado na Figura 05. Outro aspecto que pode ser observado é um pequeno aumento do índice de acidez quando comparamos o craqueamento térmico com o craqueamento utilizando a bauxita calcinada. Isso pode ser explicado através do aumento da fragmentação na cadeia carbônica dos ácidos constituintes do óleo de babaçu e liberados nas reações primárias. Durante a fragmentação são liberados ácidos de cadeias curtas que não sofrem o processo de desoxigenação por falta de sítios ácidos eficientes, na amostra de bauxita calcinada. Deve-se ressaltar ainda que a protonação da bauxita com NH_4Cl , solução levemente ácida, aumenta a atividade dos sítios do alumínio, na bauxita, provocando um efeito catalítico maior, além disso, a dissolução do alumínio provocada pelo efeito ácido, da solução protonante, não foi observado e pode ser constatada pela difração de Raios-X da Figura 01.

3.2.2. Aspectos quantitativos.

Os valores obtidos no balanço de massa para o craqueamento térmico e termocatalítico sobre bauxita calcinada e bauxita protonada são mostrados na Tabela 4.

Tabela 4. Balanço de massa para o craqueamento térmico e termocatalítico sobre amostras de bauxita calcinada e bauxita protonada.

Amostra	*LO _{total}	*LO _{fração1}	LO	Gases	Água	Resíduos
Térmico	75,51	34,47	41,04	8,22	1,73	14,55
Bauxita calcinada	76,71	35,40	41,31	8,23	1,64	13,53
Bauxita protonada	83,24	42,58	39,66	9,77	2,27	5,72

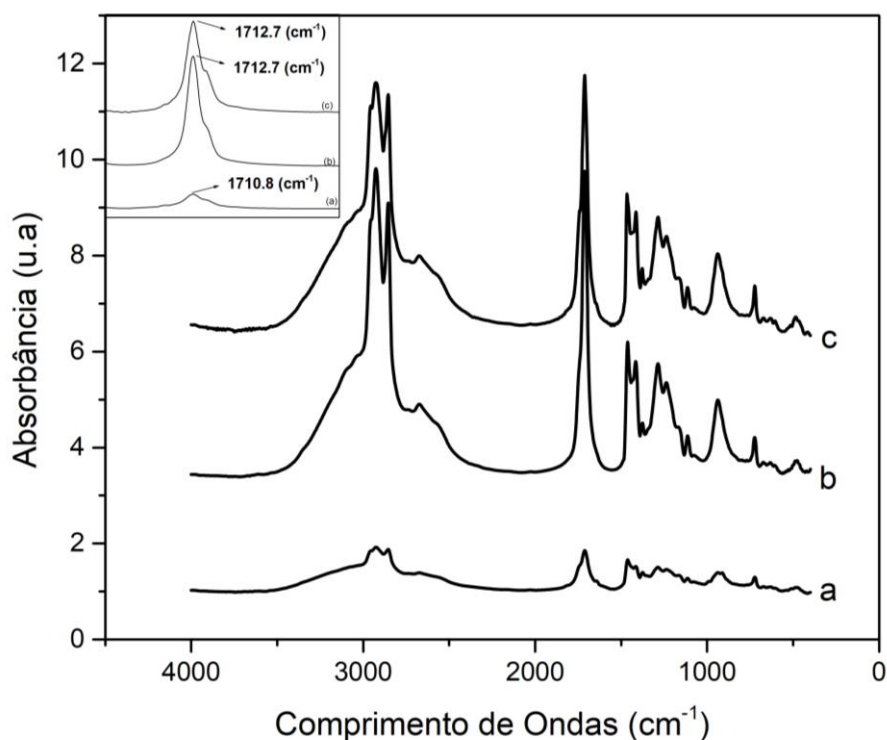
Todos os resultados quantitativos são relativos à massa do óleo de babaçu. Biocombustível: líquido orgânico (LO). Todos os resultados quantitativos são valores médios com desvio padrão (PD) variando de 1,80-2,70 para LO_{total}, LO_{fração1}, LO e resíduos; 1,20-1,85 para gases e para água 0,70 – 0,85.

Pelos valores encontrados na Tabela 4 verifica-se aumento na quantidade de líquido orgânico total e aumento na quantidade de gases quando comparamos o craqueamento térmico e os realizados sobre bauxita calcinada e bauxita protonada. Na amostra obtida através do craqueamento termocatalítico sobre bauxita protonada ocorre uma maior fragmentação das moléculas durante os processos primários, como pode ser constatado na Figura 7, e a geração de diversos radicais livres instáveis e reativos que podem se rearranjar-se em processos de ciclização, aromatização e condensação resultando em produtos que podem constituir o líquido orgânico total (LUZ JR et al., 2011; IDEM et al., 1997). Neste caso, os sítios ácidos existentes na bauxita protonada, catalisam reações de desoxigenação dos ácidos graxos, liberando maior quantidade de gases. Pode-se observar ainda uma diminuição dos resíduos e aumento na quantidade de água mostrando uma maior conversão do óleo de babaçu em líquido orgânico total, já que o aumento da quantidade de água é resultante de uma maior desoxigenação dos ácidos graxos catalisados pela presença dos sítios ácidos existentes na amostra de bauxita protonada (WILLIAMS et al., 1995).

3.2.3. Análise por espectroscopia na região do infravermelho

Na Figura 05 são mostrados os espectros de infravermelho da fração orgânica obtido pelo craqueamento termocatalítico do óleo de babaçu com bauxita calcinada e bauxita protonada e a fração orgânica obtida no craqueamento térmico.

Figura 5. Espectro de absorção FT-IR do biocombustível obtido a partir do craqueamento termocatalítico sobre amostras de bauxita protonada (a), bauxita calcinada (b) e craqueamento térmico (c).



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Ao compararmos os espectros obtidos a partir do craqueamento térmico e termocatalítico do óleo de babaçu observam-se bandas referentes aos modos de deformação “rocking” CH₂. A banda observada em 940 cm⁻¹ tem sido atribuída como estiramento C-C ou uma deformação angular fora do plano C=C-H (ALBUQUERQUE et al., 2003). Na região de 1150 a 1300 cm⁻¹ são observados os modos vibracionais de deformação “wagging e twisting” do grupo CH₂.

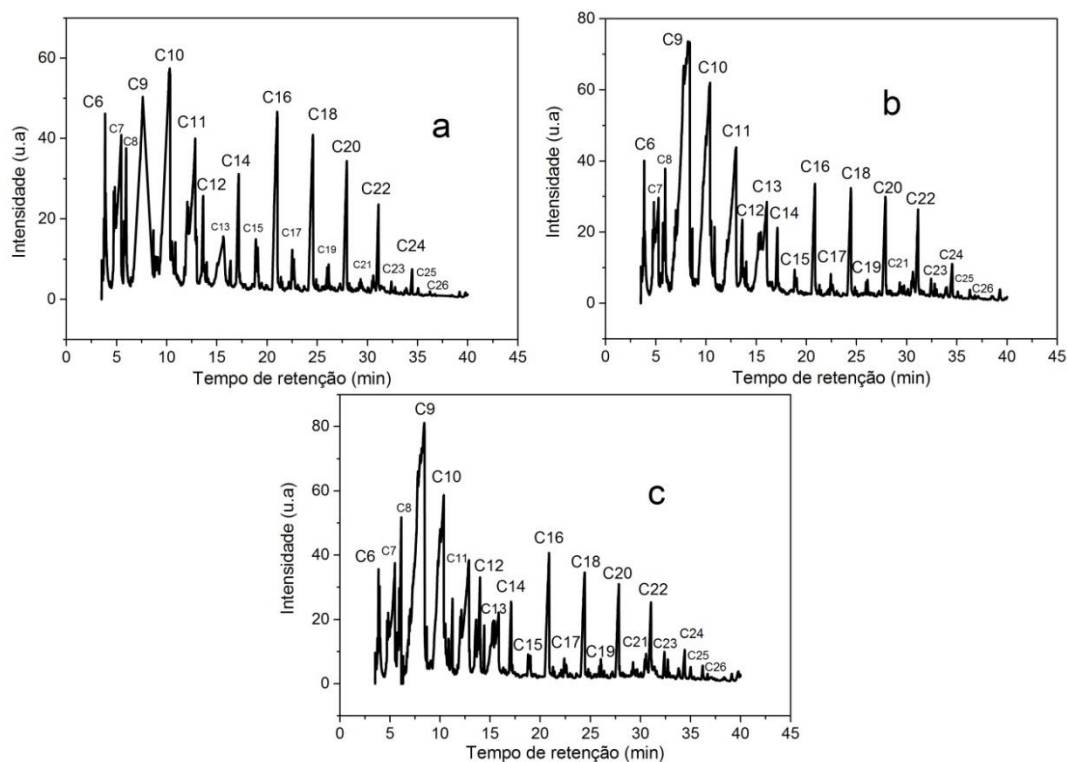
Os espectros obtidos pela bauxita calcinada e pelo craqueamento térmico mostram bandas de absorvância em 1712 cm⁻¹, que são de carbonila (C=O) característica de ácidos carboxílicos, enquanto para a bauxita protonada a frequência é

observada em 1710 cm^{-1} . Esse deslocamento é atribuído a maior capacidade catalítica de desoxigenação na carbonila. O estiramento C-O é observado em 1460 cm^{-1} (ALBUQUERQUE et al., 2003). Além disso, verifica-se a presença de modos vibracionais CH_2 e CH_3 característicos de alcanos e alcenos em 2860 cm^{-1} e 2920 cm^{-1} , respectivamente (PUNA et al., 2010; LUZ JR et al., 2011). Observando os espectros do LO obtido pelo craqueamento térmico e termocatalítico com bauxita calcinada e bauxita protonada, pode ser verificado que as bandas características de ácidos carboxílicos têm menor intensidade na amostra obtida pela bauxita protonada do que nas amostras obtidas pelo craqueamento térmico e termocatalítico com bauxita calcinada. Esse fato é explicado pela ação desoxigenante dos sítios ácidos da bauxita protonada no processo de craqueamento secundário do óleo de babaçu (LUZ JR, et al. 2011). A intensidade da banda em 1712 cm^{-1} é muito maior nas amostras obtidas através do craqueamento térmico e termocatalítico com bauxita calcinada. Esse fato se deve a inexistência de sítios ácidos capaz de realizar a desoxigenação dos ácidos carboxílicos provenientes dos triacilglicerol do óleo de babaçu.

3.2.4. Análise cromatográfica

A Figura 6 mostra os cromatogramas dos produtos dos líquidos orgânicos (LO) obtido através do craqueamento térmico e termocatalítico, do óleo de babaçu, sobre bauxita calcinada e bauxita protonada, respectivamente.

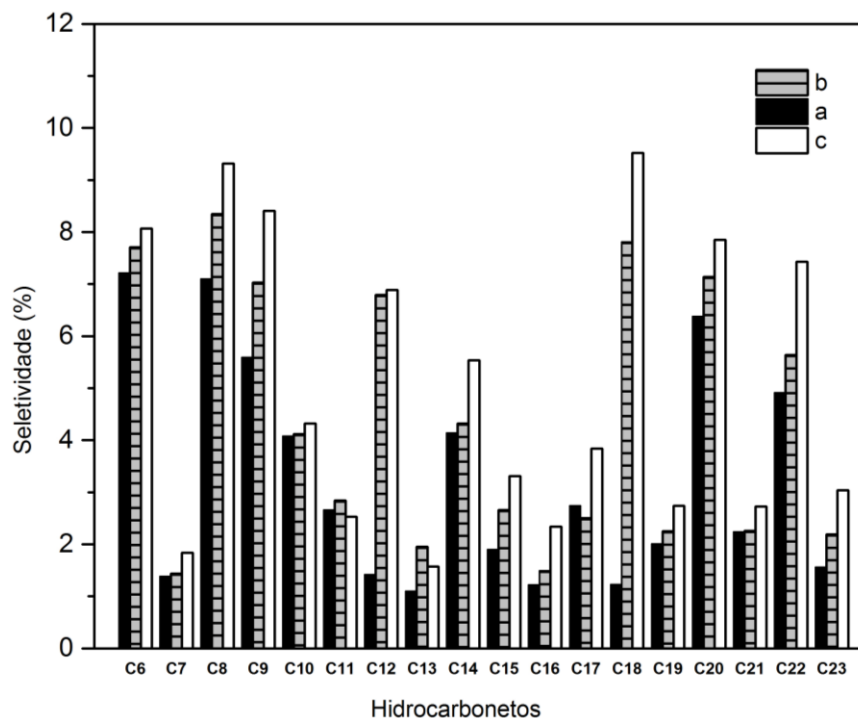
Figura 6. Cromatogramas dos LO oriundos dos craqueamentos térmico (a) e termocatalíticos do óleo de babaçu sobre os catalíticos de bauxita calcinada (b) e bauxita protonada (c).



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

Nos cromatogramas da Figura 6 observam-se vários picos que é um indicativo de uma elevada quantidade de substâncias presentes nessas amostras. Percebe-se que, para os três cromatogramas, a similaridade dos compostos, em cada tempo de retenção, para os produtos obtidos, evidencia que a presença dos catalisadores não provocam alterações significativas nos produtos da reação. Além disso, ocorre uma mudança na intensidade dos picos, para cada cromatograma. Esse comportamento pode ser discutido através das áreas referentes a cada pico e seus respectivos tempos de retenção como são apresentados na Figura 7.

Figura 7. Seletividade dos hidrocarbonetos, na faixa de C₆ a C₂₃, presentes nos LO oriundos dos craqueamentos térmico (a), termocatalíticos sobre bauxita calcinada (b) e termocatalítico sobre bauxita protonada (c).



Fonte: Autor da Pesquisa, 2018

A Figura 7 mostra que a seletividade tanto para hidrocarbonetos leves como para hidrocarbonetos pesados é maior quando se utiliza o craqueamento termocatalítico. Isso demonstra que os catalisadores utilizados, por serem compostos cristalinos e sem ordenamento de poros, provocam uma maior fragmentação dos ácidos graxos que constituem o óleo de babaçu, originando maior quantidade de hidrocarbonetos leves.

Observando-se a seletividade para hidrocarbonetos pesados C₁₂ a C₂₆ percebe-se que a ação dos catalisadores utilizados também promove um aumento na seletividade desses catalisadores. Neste caso, ocorre o aparecimento de uma variedade de radicais livres, instáveis e reativos que podem se rearranjar para formação de compostos de massa molecular elevada. De acordo com (IDEM et al., 1997) e (WILLIAMS & Horne, 1995) a presença de sítios ácidos na superfície de sólidos cristalinos provoca maior fragmentação dos compostos, durante o craqueamento, aumentando tanto a seletividade para hidrocarbonetos leves como para hidrocarbonetos pesados, devido a variedade de radicais livre que são originados, nos processos primários, que podem se reorganizar em processos de ciclização, condensação e aromatização.

3.2.5. Propriedades Físico-químicas

As propriedades físico-químicas são parâmetros utilizados para garantir os padrões de qualidades dos biocombustíveis, garantindo os teores de contaminantes que possam prejudicar a qualidade das emissões da queima, bem como, a integridade do motor, desempenho e segurança no manuseio e transporte (LÔBO & FERREIRA, 2009). Na Tabela 05 são apresentados os resultados das propriedades físico-químicas obtidas para o líquido orgânico sobre o catalisador de bauxita protonada.

Tabela 5. Propriedades físico-químicas do LO oriundo do craqueamento termocatalítico do óleo de babaçu sobre a amostra de bauxita protonada.

Propriedades	LO	Diesel mineral (Tipo B)	Método
Viscosidade cinemática 40 °C (mm^2s^{-1})	4,70	2,0 a 5,0	ASTM D-445
Massa específica a 20 °C ($\text{Kg (m}^3\text{)}^{-1}$)	862	820-880	ASTM D-1298
Índice de cetano	43,1	45	ASTM D-4737
Corrosividade ao cobre	1a	1	ASTM D-130
Teor de enxofre (ppm)	5,45	1800 (max)	ASTM D-5453
Índice de iodo ($\text{g I}_2 (100\text{g})^{-1}$)	34,68	-----	-----
Índice de peróxido	3,97	-----	MBR-9878
Estabilidade oxidativa a 110 °C (hs)	10,0	Min-6	EN-14112

As propriedades fluidodinâmicas, massa específica e viscosidade cinemática, do biocombustível obtido encontram-se no limite aceitável pela ASTM. Tais propriedades exercem grandes influencias na circulação e injeção do combustível o que é de fundamental importância aos motores de injeção por compressão (ciclo diesel). Observando-se os valores dessas propriedades percebe-se que elas estão abaixo do limite máximo aceitável pela ASTM, isso pode ser justificado pela seletividade dos hidrocarbonetos formados, Figura 7, cadeias carbônicas de C_6 a C_{23} , e pela baixa quantidade de insaturações dos ácidos que constituem o óleo vegetal.

O índice de cetano reflete a qualidade da ignição do motor que indica atraso da ignição de combustíveis para motores do ciclo diesel, desta forma, pode-se observar decréscimo do índice de cetano de 45 para 43.1 do diesel mineral para o líquido orgânico (LO), indicando que o biocombustível sintetizado não afeta as propriedades de ignição do motor. O índice de cetano aumenta com a cadeia carbônica não ramificada sugerindo que o craqueamento termocatalítico utilizado promove possíveis processos de ciclização, aromatização e poli-condensação, resultando na formação de hidrocarbonetos que diminuem o índice de cetano (BACHA et al., 2016; PASCOL et al., 2000). Isso se deve a um aumento na fragmentação das moléculas e geração de radicais livres e instáveis, durante os processos primários, em detrimento da desoxigenação provocada pelos sítios ácidos do catalisador.

O índice de peróxido mostra um objetivo de estudo interessante, uma vez que as reações de oxidação são iniciadas na sua presença e seu baixo índice, observado na Tabela 05, indica que o biocombustível obtido apresenta uma boa estabilidade oxidativa (10 horas) valor este que está dentro dos limites da ANP (min 6 horas), o que pode ser justificado pela baixa quantidade de insaturações nas moléculas de ácidos graxos do óleo de babaçu.

Pelos valores da Tabela 05, nota-se uma baixa corrosividade ao cobre devido ao baixo poder de dissociação dos ácidos graxos responsáveis pela acidez da amostra 18,7 mg KOH g⁻¹ do líquido orgânico. Além dessa propriedade podem-se observar baixos valores para índice de iodo e teor de enxofre que era previsto devido aos óleos vegetais apresentarem baixos teores de enxofres e as cadeias carbônicas dos ácidos constituintes dos óleos de babaçu apresentar baixos índices de insaturações indicando baixo índice de iodo.

4. Conclusão

Nesse estudo, considerando os resultados obtidos pelo craqueamento termocatalítico do óleo de babaçu sobre bauxita protonada, foi possível obter uma fração líquida com baixo índice de acidez e que apresenta propriedades físico-químicas dentro dos padrões de qualidade, exigidos pela ANP. Os resultados obtidos no craqueamento termocatalítico mostram que o catalisador sólido utilizado provocou o processo de desoxigenação dos ácidos que constituem o óleo de babaçu. Além disso, os tipos de poros e estruturas do catalisador utilizado provocaram aumento na fragmentação das cadeias carbônicas e rearranjos dos radicais gerados, durante o aquecimento, permitindo a obtenção de hidrocarbonetos bastante semelhantes aos do diesel mineral. Esse processo constitui uma alternativa para se obter um biocombustível que possibilite a redução das emissões de gases poluentes, devido este ser um combustível limpo e proveniente de fontes renováveis. Nesses termos, podem combater os impactos ambientais, devido ao baixo teor de enxofre que é um dos principais precursores de óxidos poluentes, bem como garantir a integridade dos motores do ciclo diesel, desempenho, segurança no manuseio e transporte.

5. REFERÊNCIAS

- ADAMCZYK, A.; DULGON, E. The FTIR studies of gels and thin films of Al₂O₃-TiO₂ and Al₂O₃-TiO₂-SiO₂ systems. **Spectrochimica Acta**, v. 89, p. 11-17, 2012.
- ALBUQUERQUE, M. L. S.; GUEDES, I.; ALCANTARA, P.; & MOREIRA, S. G. C. Infrared absorption spectra of Buriti (*Mauritia flexuosa* L.) oil. **Vibrational Spectroscopy**, v. 33, p. 127-131, 2003.
- BACHA, K.; BEN AMARA, A.; ALVES FORTUNATO, M.; WUND, P.; VEYRAT, B.; HAYRAULT, P.; STARCK, L. Original Experimental Approach for Assessing Transport Fuel Stability. **Journal of visualized experiments**, v. 116, p. 1-9, 2016.
- CARVALHO, D. C. R. **Study of the influence of Mg²⁺ and Zr⁴⁺ ions on the amorphous-phase transition of bauxite**, 2012. Dissertation (Master's degree in chemistry) Polytechnic school of the University of São Paulo.
- COUPERTHWAIT, S. J.; JOHNSTONE, D. W.; MULLETT, M. E.; TAYLOR, K. J.; & MILLAR, G. J. Minimization of Bauxite Residue Neutralization Products Using Nanofiltered Seawater. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 53, p. 3787-3794, 2014.
- DA SILVA, R. B.; LIMA NETO, A. F.; SOARES DOS SANTOS, L. S.; DE OLIVEIRA LIMA J. R.; CHAVES, M. H.; DOS SANTOS, J. R. Catalysts of Cu(II) and Co(II) ions adsorbed in chitosan used in transesterification of soy bean and babassu oils - a new route for biodiesel syntheses. **Bioresource Technology**, v. 99, p. 6793-6798, 2008.
- GEORGOGIANNI, K. G.; KATSOLIDIS, A. K.; POMONIS, P. J.; MANOS, G.; & KONTOMINAS, M. G., Transesterification of rapeseed oil for the production of biodiesel using homogeneous and heterogeneous catalysis. **Fuel Processing Technology**, v. 90, p. 1016-1022, 2009.
- GRAVER, B.M.; FREY, H.C.; HU, J. Effect of Biodiesel Fuels on Real-World Emissions of Passenger Locomotives. **Environmental Science Technology**, v. 50, p. 12030-12039, 2016.
- HUANG, T. J.; CHIANG, D. Y.; SHIH, C.; LEE, C. C.; MAO, C. W.; WANG, B. C. Promoted decomposition of NO_x in automotive diesel-like exhausts by electro-catalytic honeycombs. **Environmental Science Technology**, v. 49, p. 3711-3717, 2015.
- IDEM, R. O.; KATIKANENI, S. P. K; NARENDRA, N. B. Catalytic conversion of canola oil to fuels and chemicals: roles of catalyst acidity, basicity and shape selectivity on product distribution. **Fuel Processing Technology**, v. 51, p. 101-125, 1997.
- KAI, T.; MAK, G. L., WADA, S., NAKAZATO, T., TAKANASHI, H., & UEMURA, Y. Production of biodiesel fuel from canola oil with dimethyl carbonate using an active sodium methoxide catalyst prepared by crystallization. **Bioresource Technology**, v. 163, p. 360-368, 2014.
- KLOPROGGGE, J. T.; RUAN, H. D.; FROST, R. L. Thermal decomposition of bauxite minerals: infrared emission spectroscopy of gibbsite, boehmite and diaspore. **Journal of materials Science**, v. 37, p. 1121-1129, 2002.

KUBÁTOVÁ, A.; LUO, Y.; ŠTÁVOVÁ, J.; SADRAMELI, S. M.; AULICH, T.; KOZLIAK, E.; & SEAMES, W. New path in the thermal cracking of triacylglycerols (canola and soybean oil). **Fuel**, v. 90, p. 2598-2608, 2011.

LIMA, J. R. O.; SILVA, R. B.; SILVA, C. M. Biodiesel de babaçu (Orbignya phalerata) obtido por via etanólica. **Química Nova**, v. 30, p. 600-603, 2007.

LLAMAS, A.; AL-LAL, A.M.; HERNANDEZ, M.; LAPUERTA, M.; & CANOIRA, L. Biokerosene from Babassu and Camelina Oils: Production and Properties of Their Blends with Fossil Kerosene. **Energy & Fuels**, v. 26, p. 5968-5976, 2012.

LÔBO, I.P.; FERREIRA, S. L. C. Biodiesel: quality parameters and analytical methods. **Química nova**, v. 32, n. 06 p. 1596-1609, 2009.

LUZ JR, G. E.; SANTOS, A. G. D.; MELO, A. C. R.; OLIVEIRA, R. M.; ARAUJO, A. S.; & FERNANDES, V. J. Thermal catalytic cracking of buriti oil (*Mauritia flexuosa* L.) over LaSBA-15 mesoporous materials. **Fuel Processing Technology**, v. 92, p. 2099-2104, 2011.

PAIVA, E. J.; DA SILVA, M. L.; BARBOZA, J. C.; DE OLIVEIRA, P. C.; DE CASTRO, H. F.; & GIORDANI, D. S. Non-edible babassu oil as a new source for energy production-a feasibility transesterification survey assisted by ultrasound. **Ultrasonics Sonochemistry**, v. 20, p. 833-838, 2013.

PASCOL, C.; AND PANDOLFELLI, V. C. Bauxitas refratárias: composição química, fases e propriedades - Parte I. **Cerâmica**, v. 46, p. 76-82, 2000.

PRADO, C.M. R.; ALVES, M. I. R.; LELES, M. I. G.; MEDEIROA, R. I. ; OTTO, C. R. N. ; DAMASCENO, F. C.; BRAIT, H. H.; FRANCO, P. I. B. M.; ANTONIOSI FILHO, N. R. Study of acid activation and thermal treatment of bauxite extracted from deposits in Minas Gerais, Brazil. **Cerâmica**, v. 58, p. 111-117, 2012.

PUNA, J. F.; GOMES, J. F.; CORREIA, M. J. N.; SOARES DIAS, A. P.; & BORDADO, J. C. Advances on the development of novel heterogeneous catalysts for transesterification of triglycerides in biodiesel. **Fuel**, v. 89, p. 3602-3606, 2010.

RAMACHANDRAN, K.; SIVAKUMAR, P.; SUGANYA, T.; & RENGANATHAN, S. Production of biodiesel from mixed waste vegetable oil using an aluminium hydrogen sulphate as a heterogeneous acid catalyst. **Bioresource Technology**, v. 102, p. 7289-7293, 2011.

RASHTIZADEH, E. F.; FARZANEH; AND GHANDI M. A comparative study of KOH loaded on double aluminosilicate layers, microporous and mesoporous materials as catalyst for biodiesel production via transesterification of soybean oil. **Fuel**, v. 89, p. 3393-3398, 2010.

ROUQUEROL, J.; ROUQUEROL F.; LLEWELLYN, P; SING, M. K. **adsorption by powders & porous solids, principles, methodology and applications**. San diego: Academic press 2013.

SUSLICK, S. B.; MACHADO, I. F. Earth System: History and natural variability. **Non-renewable resources**, v. 01, p. 01-14, 1989.

SATHYASEELAN, B.; BASKARAN, I.; & SIVAKUMAR, K. Phase Transition Behavior of Nanocrystalline Al₂O₃ Powders. **Soft Nanoscience Letters**, v. 03, p. 69-74, 2013.

SEMWAL, S.; ARORA, A. K.; BADONI, R. P.; & TULI, D. K. Biodiesel production using heterogeneous catalysts. **Bioresource Technology**, v. 102 p. 2151-2161, 2011.

VIEIRA, S. S.; MAGRIOTIS, Z. M.; SANTOS, N. A.; SACZK, A. A.; HORI, C. E.; & ARROYO, P. A. Biodiesel production by free fatty acid esterification using Lanthanum (La³⁺) and HZSM-5 based catalysts. **Bioresource Technology**, v. 133, p. 248-255, 2013.

VIJAYAKUMAR, C.; RAMESH, M.; MURUGESAN, A.; PANNEERSELVAM, N.; SUBRAMANIAM, D.; BHARATHIRAJA, M., Biodiesel from plant seed oils as an alternate fuel for compression ignition engines-a review. **Environmental Science Pollution Research-Int**, v. 23, p. 24711-24730, 2016.

ZABETI, M.; WAN DAUD, W. M. A.; AROUA, M. K. Activity of solid catalysts for biodiesel production: A review. **Fuel Processing Technology**, v. 90, p. 770-777, 2009.

ZIELINSKA, B. Atmospheric transformation of diesel emissions. **Experimental and Toxicologic Pathology**, v. 57, p. 31-42, 2005.

WELLINGTON, M.A. Effect of Thermal Treatment of Bauxite Ore on Carbon (Organic and Inorganic) Content and Solubility in Bayer Process Liquor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, p. 1434-1438, 2013.

WILLIAMS, P.; HORNE, P. A. The influence of catalytic type on the composition of upgraded biomass pyrolysis oils. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 31, p. 39-61, 1995.

YANG, Y., LI, T., JIN, S., LIN, Y., & YANG, H. Catalytic pyrolysis of tobacco rob: kinetic study and fuel gas produced. **Bioresource Technology**, v. 102, p. 11027-11033, 2011.

ANEXOS

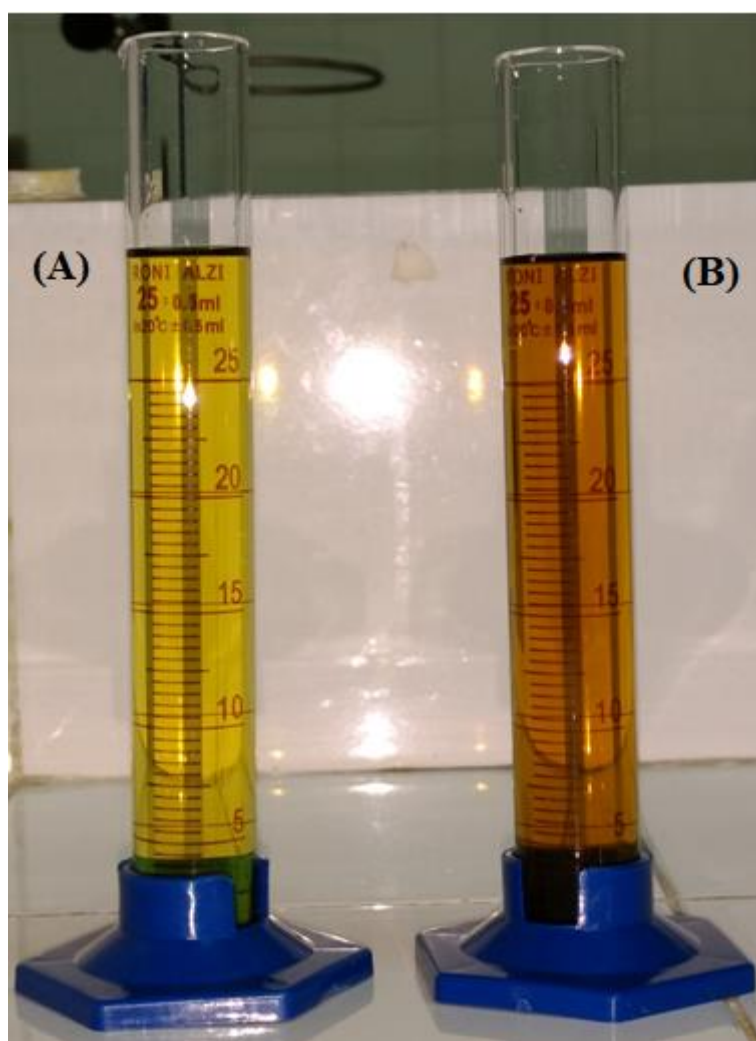
Anexo I: Estudo da porcentagem de bauxita protonada

Tabela 01. Estudo da porcentagem de bauxita protonada e índice de acidez dos biocombustíveis do óleo de babaçu.

Amostras (%)	Índice de acidez (mg KOH/g de amostra)	Desvio padrão
Térmico	112	1,2
Bauxita calcinada 5,0	141	1,1
Bauxita protonada 2,5	29,3	1,4
Bauxita protonada 5,0	18,2	0,9
Bauxita protonada 7,5	19,1	1,1
Bauxita protonada 10,0	19,7	1,3

Anexo II: Frações de biocombustíveis

Figura 01. Biocombustíveis obtidos na pirólise do óleo de babaçu, (A) fração leve e (B) fração pesada.



Anexo III: Coordenadas cartesianas da molécula de ácido láurico a 298 K

rb3lyp/6-31+g(d,p) test

Coordenadas do ácido láurico a 298 K

0 1

C	4,77212100	-0,62451200	-0,00007800
C	3,52831100	0,26654100	-0,00002300
H	4,78456900	-1,29048200	0,87291400
H	4,78453600	-1,29035000	-0,87318100
C	2,22597400	-0,54433400	-0,00001700
H	3,55694600	0,92650900	-0,87530600
H	3,55696100	0,92645400	0,87530400
H	2,20641700	-1,20565800	0,87867500
H	2,20634100	-1,20553500	-0,87880000
C	0,96649700	0,33213100	0,00007900
C	-0,34005200	-0,47246100	-0,00005700
H	0,98590200	0,99322000	-0,87826800
H	0,98585800	0,99302100	0,87857800
C	-1,60065200	0,40243400	0,00043300
H	-0,35816900	-1,13405100	0,87834900
H	-0,35841000	-1,13340000	-0,87894900
H	-1,58244500	1,06430000	-0,87765600
H	-1,58254400	1,06315400	0,87938600
C	-2,90730200	-0,40217700	-0,00015100
C	-4,16850400	0,47192700	0,00038500
H	-2,92524500	-1,06412200	0,87798500
H	-2,92518300	-1,06295800	-0,87916400
C	-5,47503300	-0,33270400	-0,00024000
H	-4,15067900	1,13388100	-0,87773700
H	-4,15077800	1,13268300	0,87941200
H	-5,49384500	-0,99483000	0,87793500
H	-5,49369900	-0,99369800	-0,87926900
C	6,07353100	0,14408000	-0,00008900
O	6,19808700	1,35070600	-0,00055700
O	7,14728800	-0,69141200	0,00042000
H	7,94264700	-0,13213000	0,00029700
C	-6,73706900	0,54029900	0,00021200
C	-8,03706800	-0,27236200	-0,00032500
H	-6,71892500	1,20144200	-0,87739600
H	-6,71899700	1,20040000	0,87860900
H	-8,91742300	0,37961400	-0,00052400
H	-8,10038800	-0,91736200	-0,88490800
H	-8,10097400	-0,91761800	0,88402600

Anexo IV: Coordenadas cartesianas da molécula de ácido láurico a 748 K

b3lyp/6-31+g(d,p) temperature=748 test

Coordenadas do ácido láurico a 748K

0 1

C	4,77212100	-0,62451200	-0,00007800
C	3,52831100	0,26654100	-0,00002300
H	4,78456900	-1,29048200	0,87291400
H	4,78453600	-1,29035000	-0,87318100
C	2,22597400	-0,54433400	-0,00001700
H	3,55694600	0,92650900	-0,87530600
H	3,55696100	0,92645400	0,87530400
H	2,20641700	-1,20565800	0,87867500
H	2,20634100	-1,20553500	-0,87880000
C	0,96649700	0,33213100	0,00007900
C	-0,34005200	-0,47246100	-0,00005700
H	0,98590200	0,99322000	-0,87826800
H	0,98585800	0,99302100	0,87857800
C	-1,60065200	0,40243400	0,00043300
H	-0,35816900	-1,13405100	0,87834900
H	-0,35841000	-1,13340000	-0,87894900
H	-1,58244500	1,06430000	-0,87765600
H	-1,58254400	1,06315400	0,87938600
C	-2,90730200	-0,40217700	-0,00015100
C	-4,16850400	0,47192700	0,00038500
H	-2,92524500	-1,06412200	0,87798500
H	-2,92518300	-1,06295800	-0,87916400
C	-5,47503300	-0,33270400	-0,00024000
H	-4,15067900	1,13388100	-0,87773700
H	-4,15077800	1,13268300	0,87941200
H	-5,49384500	-0,99483000	0,87793500
H	-5,49369900	-0,99369800	-0,87926900
C	6,07353100	0,14408000	-0,00008900
O	6,19808700	1,35070600	-0,00055700
O	7,14728800	-0,69141200	0,00042000
H	7,94264700	-0,13213000	0,00029700
C	-6,73706900	0,54029900	0,00021200
C	-8,03706800	-0,27236200	-0,00032500
H	-6,71892500	1,20144200	-0,87739600
H	-6,71899700	1,20040000	0,87860900
H	-8,91742300	0,37961400	-0,00052400
H	-8,10038800	-0,91736200	-0,88490800
H	-8,10097400	-0,91761800	0,88402600

Anexo V: Possíveis radicais do ácido láurico**Tabela 01.** Radicais gerados na pirólise do ácido láurico.

Radicais A	Radicais B	Radicais C	Radicais D
•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•OH
•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COH]:	O:
•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	H•
•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO] ⁺	[OH] ⁻
•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ C(OH)] ⁺	[O] ²⁻
•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO] ⁻	[H] ⁺
•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH		
•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH		
•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	•CH ₂ CH ₂ COOH		
•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	•CH ₂ COOH		
•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	•COOH		

Anexo VI: Compostos gerados na pirólise do ácido láurico a 448 K

Tabela 01. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₆.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-197,030352	-236,977996	-62,397712
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-157,737249	-236,977996	-56,623992
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-118,444419	-236,977996	-55,947537
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	•H	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	
ΔG	-236,323726	-0,516743	-236,977996	-86,299568
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-189,125000	-197,030352	-386,261639	-66,696155
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-228,436031	-157,737249	-386,261639	-55,446156
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-267,724280	-118,444419	-386,261639	-58,320779
Álcoois				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	•OH	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₂ OH	
ΔG	-236,323726	-75,758047	-312,192804	-69,673063
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	•OH	HOCH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-385,606602	-75,758047	-461,476075	-69,920929
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	HOOC(CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-189,125121	-346,313235	-535,544080	-66,342867
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	HOOC(CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-228,436031	-307,019263	-535,544080	-55,714103
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ CH ₂ COOH	HOOC(CH ₂) ₄ COOH	
ΔG	-267,724280	-267,724280	-535,544080	-59,939755

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 02. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₇.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal\ mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-236,323726	-276,271133	-62,248992
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-197,030352	-276,271133	-56,645328
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-157,737249	-276,271133	-56,140182
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	•H	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	
ΔG	-275,616761	-0,5167430	-276,271133	-86,36357
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-189,125000	-236,323726	-425,554663	-66,476527
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-228,436031	-197,030352	-425,554663	-55,396583
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-267,724280	-157,737249	-425,554663	-58,442516
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-307,019263	-118,444419	-425,554663	-57,091487
Álcoois				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	•OH	CH ₃ (CH ₂) ₅ H ₂ COH	
ΔG	-275,616761	-75,758047	-351,486026	-69,790407
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	•OH	HOCH ₂ (CH) ₅ COOH	
ΔG	-424,899574	-75,758047	-500,769492	-70,200171
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	HOOC(CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-189,125121	-385,606602	-574,838573	-67,049444
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	HOOC(CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-228,436031	-346,313235	-574,838573	-56,041036
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	HOOC(CH ₂) ₅ COOH	
ΔG	-267,724280	-307,019263	-574,838573	-59,632275

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 03. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₈.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-275,616761	-315,564444	-62,422185
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-236,323726	-315,564444	-56,605795
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-197,030352	-315,564444	-56,270704
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-157,737249	-157,737249	-315,564444	-56,442014
Reação 5	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	•H	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	
ΔG	-314,909959	-0,5167430	-315,564444	-86,434482
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-189,125000	-275,616761	-464,847899	-66,602656
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-228,436031	-236,323726	-464,847899	-55,309986
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-267,724280	-197,030352	-464,847899	-58,525975
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-346,313235	-118,444419	-464,847899	-56,629640
Álcoois				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	•OH	CH ₃ (CH ₂) ₆ H ₂ COH	
ΔG	-314,909959	-75,758047	-390,779149	-69,743344
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	•OH	HOOC(CH ₂) ₆ H ₂ COH	
ΔG	-464,192970	-75,758047	-540,062569	-69,999996
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	HOOC(CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-189,125000	-424,899574	-614,131738	-67,246482
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	HOOC(CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-228,436031	-385,606602	-614,131738	-55,914279
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	HOOC(CH ₂) ₆ COOH	
ΔG	-267,724280	-346,313235	-614,131738	-59,125875

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 04. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₉.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-314,909959	-354,856467	-61,684861
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-275,616761	-354,856467	-55,970754
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-236,323726	-354,856467	-55,422938
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-157,737249	-197,030352	-354,856467	-55,764304
Reação 5	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	•H	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	
ΔG	-354,202989	-0,5167430	-354,856467	-85,802580
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-189,125000	-314,909959	-504,140852	-66,448916
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-228,436031	-275,616761	-504,140852	-55,258531
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-267,724280	-236,323726	-504,140852	-58,261793
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-346,313235	-157,737249	-504,140852	-56,706824
Álcoois				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	•OH	CH ₃ (CH ₂) ₇ H ₂ COH	
ΔG	-354,202989	-75,758047	-430,071673	-69,425824
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	•OH	HOCH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-503,485707	-75,758047	-579,355503	-70,123615
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-189,125000	-464,192970	-653,424094	-66,593871
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-228,436031	-424,899574	-653,424094	-55,527732
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	
ΔG	-267,724280	-385,606602	-653,424094	-58,491462

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 05. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₀.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal\ mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-354,202989	-394,150660	-62,414655
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-314,909959	-394,150660	-56,595127
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-275,616761	-394,150660	-56,149595
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
ΔG	-157,737249	-236,323726	-394,150660	-56,278234
Reação 5	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	•H	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	
ΔG	-393,496148	-0,5167430	-394,150660	-86,451425
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-189,125000	-354,202989	-543,434120	-66,598264
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-228,436031	-314,909959	-543,434120	-55,302456
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-267,724280	-275,616761	-543,434120	-58,408003
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-346,313235	-197,030352	-543,434120	-56,810363
Álcoois				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	•OH	CH ₃ (CH ₂) ₈ H ₂ COH	
ΔG	-393,496148	-75,758047	-469,365397	-69,780367
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	•OH	HOCH ₂ (CH ₂) ₈ H ₂ COOH	
ΔG	-542,779741	-75,758047	-618,648840	-69,686241
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-189,125000	-503,485707	-692,718065	-67,368219
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	HOOC(CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-228,436031	-464,192970	-692,718065	-55,888551
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	HOOC(CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-267,724280	-424,899574	-692,718065	-59,118345
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	HOOC(CH ₂) ₈ COOH	
ΔG	-307,019263	-385,606602	-692,718065	-57,856422

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 06. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₁.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal\ mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-393,496148	-433,443661	-62,315508
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-354,202989	-433,443661	-56,576929
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-314,909959	-433,443661	-56,025975
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
ΔG	-157,737249	-275,616761	-433,443661	-56,256899
Reação 5	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	•H	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	
ΔG	-432,789112	-0,5167430	-433,443661	-86,474643
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-189,125000	-393,496148	-582,727120	-66,498490
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-228,436031	-354,202989	-582,727120	-55,283631
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-267,724280	-314,909959	-582,727120	-58,283756
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-307,019263	-275,616761	-582,727120	-57,163651
Álcoois				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	•OH	CH ₃ (CH ₂) ₉ H ₂ COH	
ΔG	-432,789112	-75,758047	-508,658518	-69,878886
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	•OH	HOCH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-582,072664	-75,758047	-657,941957	-69,807977
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	HOOC(CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-189,125000	-542,779741	-732,011276	-66,851778
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-228,436031	-503,485707	-732,011276	-56,185990
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	HOOC(CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-267,724280	-464,192970	-732,011276	-59,002255
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	HOOC(CH ₂) ₉ COOH	
ΔG	-307,019263	-424,899574	-732,011276	-58,006397

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 07. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₂.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal\ mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	
ΔG	-39,848207	-432,789112	-472,736744	-62,390182
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	
ΔG	-79,150511	-393,496148	-472,736744	-56,529238
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	
ΔG	-118,444419	-354,202989	-472,736744	-56,059233
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	
ΔG	-157,737249	-314,909959	-472,736744	-56,184735
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-39,848207	-582,072664	-622,020228	-62,347511
Reação 2	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-79,150511	-542,779741	-622,020228	-56,460840
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-118,444419	-503,485707	-622,020228	-56,539906
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-157,737249	-464,192970	-622,020228	-56,481548
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-189,125000	-582,072664	-771,304199	-66,851778
Reação 2	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-228,436031	-542,779741	-771,304199	-55,488827
Reação 3	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-267,724280	-503,485707	-771,304199	-59,118972
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₀ COOH	
ΔG	-307,019263	-464,192970	-771,304199	-57,709585

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 08. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₃.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal\ mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1	$\bullet CH_2CH_3$	$\bullet CH_2(CH_2)_9CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}CH_3$	
ΔG	-79,150511	-432,789112	-512,029686	-56,515433
Reação 2	$\bullet CH_2CH_2CH_3$	$\bullet CH_2(CH_2)_8CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}CH_3$	
ΔG	-118,444419	-393,496148	-512,029686	-55,923064
Reação 3	$\bullet CH_2(CH_2)_2CH_3$	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}CH_3$	
ΔG	-157,737249	-354,202989	-512,029686	-56,129514
Reação 4	$\bullet CH_2(CH_2)_3CH_3$	$\bullet CH_2(CH_2)_6CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}CH_3$	
ΔG	-197,030352	-314,909959	-512,029686	-56,083706
Reação 5	$\bullet CH_2(CH_2)_4CH_3$	$\bullet CH_2(CH_2)_5CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}CH_3$	
ΔG	-236,323726	-275,616761	-512,029686	-55,973264
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	$\bullet CH_2COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_9CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-228,436031	-432,789112	-661,313174	-55,240333
Reação 2	$\bullet CH_2CH_2COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_8CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-267,724280	-393,496148	-661,313174	-58,199042
Reação 3	$\bullet CH_2(CH_2)_2COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-307,08	-354,294	-661,437	-57,054
Reação 4	$\bullet CH_2(CH_2)_3COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_6CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-346,313235	-314,909959	-661,313174	-56,463350
Reação 5	$\bullet CH_2(CH_2)_4COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_5CH_3$	$CH_3(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-385,606602	-275,616761	-661,313174	-56,357301
Cetona/Álcool				
Reação 1	$[CH_3(CH_2)_{10}CO] \bullet$	$\bullet CH_3$	$CH_3(CH_2)_{10}COCH_3$	
ΔG	-546,123281	-39,848207	-586,069440	-61,465860
Éster				
Reação 1	$[CH_3(CH_2)_{10}COO] \bullet$	$\bullet CH_3$	$CH_3(CH_2)_{10}COOCH_3$	
ΔG	-621,359792	-39,848207	-661,300899	-58,295679
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	$\bullet CH_2COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_9COOH$	$HOOC(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-228,436031	-582,072664	-810,597301	-55,601151
Reação 2	$\bullet CH_2CH_2COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_8COOH$	$HOOC(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-267,724280	-542,779741	-810,597301	-58,534133
Reação 3	$\bullet CH_2(CH_2)_2COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_7COOH$	$HOOC(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-307,019263	-503,485707	-810,597301	-57,938626
Reação 4	$\bullet CH_2(CH_2)_3COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_6COOH$	$HOOC(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-346,313235	-464,192970	-810,597301	-57,163651
Reação 5	$\bullet CH_2(CH_2)_4COOH$	$\bullet CH_2(CH_2)_5COOH$	$HOOC(CH_2)_{11}COOH$	
ΔG	-385,606602	-424,899574	-810,597301	-57,181849

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 09. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₄.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	$\bullet CH_2CH_2CH_3$ -118,444419	$\bullet CH_2(CH_2)_9CH_3$ -432,789112	$CH_3(CH_2)_{12}CH_3$ -551,322720	-55,966989
Reação 2 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_2CH_3$ -157,737249	$\bullet CH_2(CH_2)_8CH_3$ -393,496148	$CH_3(CH_2)_{12}CH_3$ -551,322720	-56,051076
Reação 3 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_3CH_3$ -197,030352	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$ -354,202989	$CH_3(CH_2)_{12}CH_3$ -551,322720	-56,086216
Reação 4 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_4CH_3$ -236,323726	$\bullet CH_2(CH_2)_6CH_3$ -314,909959	$CH_3(CH_2)_{12}CH_3$ -551,322720	-55,870353
Reação 5 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_5CH_3$ -275,616761	$\bullet CH_2(CH_2)_5CH_3$ -275,616761	$CH_3(CH_2)_{12}CH_3$ -551,322720	-55,972637
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet CH_2CH_2COOH$ -267,724280	$\bullet CH_2(CH_2)_9CH_3$ -432,789112	$CH_3(CH_2)_{12}COOH$ -700,606302	-58,301954
Reação 2 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_2COOH$ -307,019263	$\bullet CH_2(CH_2)_8CH_3$ -393,496148	$CH_3(CH_2)_{12}COOH$ -700,606302	-57,035011
Reação 3 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_3COOH$ -346,313235	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$ -354,202989	$CH_3(CH_2)_{12}COOH$ -700,606302	-56,524846
Reação 4 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_4COOH$ -385,606602	$\bullet CH_2(CH_2)_6CH_3$ -314,909959	$CH_3(CH_2)_{12}COOH$ -700,606302	-56,313375
Reação 5 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_5COOH$ -424,899574	$\bullet CH_2(CH_2)_5CH_3$ -275,616761	$CH_3(CH_2)_{12}COOH$ -700,606302	-56,455192
Álcool				
Reação 1 ΔG	$[CH_3(CH_2)_{10}COH]\bullet$ -546,641981	$2(\bullet[CH_3])$ -79,696414	$CH_3(CH_2)_{10}(CH_3)_2COH$ -626,543186	-128,508400
Éster				
Reação 1 ΔG	$[CH_3(CH_2)_{10}COO]\bullet$ -621,359792	$\bullet CH_2CH_3$ -79,150511	$CH_3(CH_2)_{10}COOCH_2CH_3$ -700,599602	-56,036015
Cetona				
Reação 1 ΔG	$[CH_3(CH_2)_{10}CO]\bullet$ -546,123281	$\bullet CH_2CH_3$ -79,150511	$CH_3(CH_2)_{10}COCH_2CH_3$ -625,362381	-55,590483
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet CH_2CH_2COOH$ -267,724280	$\bullet CH_2(CH_2)_9COOH$ -582,072664	$HOOC(CH_2)_{12}COOH$ -849,890349	-58,612572
Reação 2 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_2COOH$ -307,019263	$\bullet CH_2(CH_2)_8COOH$ -542,779741	$HOOC(CH_2)_{12}COOH$ -849,890349	-57,319901
Reação 3 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_3COOH$ -346,313235	$\bullet CH_2(CH_2)_7COOH$ -503,485707	$HOOC(CH_2)_{12}COOH$ -849,890349	-57,358807
Reação 4 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_4COOH$ -385,606602	$\bullet CH_2(CH_2)_6COOH$ -464,192970	$HOOC(CH_2)_{12}COOH$ -849,890349	-56,963475
Reação 5 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_5COOH$ -424,899574	$\bullet CH_2(CH_2)_5COOH$ -424,899574	$HOOC(CH_2)_{12}COOH$ -849,890349	-57,229540

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 10. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃ -157,737249	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃ -590,615713	-56,069274
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃ -197,030352	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃ -590,615713	-55,982050
Reação 3 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃ -236,323726	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ -354,202989	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃ -590,615713	-55,847135
Reação 4 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃ -275,616761	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃ -590,615713	-55,843997
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH -307,019263	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ COOH -739,899245	-57,021834
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH -346,313235	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ COOH -739,899245	-56,389304
Reação 3 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH -385,606602	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ -354,202989	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ COOH -739,899245	-56,258782
Reação 4 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH -424,899574	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ COOH -739,899245	-56,295177
Éster				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]• -621,359792	•CH ₂ CH ₂ CH ₃ -118,444419	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOCH ₂ CH ₂ CH ₃ -739,892083	-55,140559
Cetona				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]• -546,123281	•CH ₂ CH ₂ CH ₃ -118,444419	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COCH ₂ CH ₂ CH ₃ -664,653111	-53,596257
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₂ COOH -307,019263	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH -582,072664	HOOC(CH ₂) ₁₃ COOH -889,183421	-57,413400
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH -346,313235	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH -542,779741	HOOC(CH ₂) ₁₃ COOH -889,183421	-56,755142
Reação 3 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH -385,606602	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH -503,485707	HOOC(CH ₂) ₁₃ COOH -889,183421	-57,173691
Reação 4 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH -424,899574	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH -464,192970	HOOC(CH ₂) ₁₃ COOH -889,183421	-57,026226

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 11. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₆.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃ -197,030352	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃ -629,908855	-56,093746
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃ -236,323726	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃ -629,908855	-55,836467
Reação 3 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃ -275,616761	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ -354,202989	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃ -629,908855	-55,914279
Reação 4 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃ -629,908855	-55,808857
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH -346,313235	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ COOH -779,192278	-56,432602
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH -385,606602	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ COOH -779,192278	-56,179715
Reação 3 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH -424,899574	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ -354,202989	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ COOH -779,192278	-56,297060
Reação 4 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH -464,192970	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ COOH -779,192278	-56,067391
Éster				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]• -621,359792	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ -157,737249	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₃ CH ₃ -779,185701	-55,635037
Cetona				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]• -546,123281	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ -157,737249	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₃ CH ₃ -703,948190	-55,007527
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₃ COOH -346,313235	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH -582,072664	HOOC(CH ₂) ₁₄ COOH -928,476335	-56,749494
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH -385,606602	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH -542,779741	HOOC(CH ₂) ₁₄ COOH -928,476335	-56,470880
Reação 3 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH -424,899574	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH -503,485707	HOOC(CH ₂) ₁₄ COOH -928,476335	-57,137296
Reação 4 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH -464,192970	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH -464,192970	HOOC(CH ₂) ₁₄ COOH -928,476335	-56,723766

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 12. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₇.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃	
ΔG	-236,323726	-432,789112	-669,201757	-55,797562
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃	
ΔG	-275,616761	-393,496148	-669,201757	-55,753008
Reação 3	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃	
ΔG	-314,909959	-354,202989	-669,201757	-55,728536
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-385,606602	-432,789112	-818,485189	-56,146457
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-424,899574	-393,496148	-818,485189	-56,141437
Reação 3	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-464,192970	-354,202989	-818,485189	-55,992717
Reação 4	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-503,485707	-314,909959	-818,485189	-56,176578
Éster				
Reação 1	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₄ CH ₃	
ΔG	-621,360	-197,030	-818,480	-56,076
Cetona				
Reação 1	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₄ CH ₃	
ΔG	-546,123281	-197,030352	-743,239519	-53,894324
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-385,606602	-582,072664	-967,769328	-56,514806
Reação 2	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-424,899574	-542,779741	-967,769328	-56,484058
Reação 3	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	HOOC(CH ₂) ₁₅ COOH	
ΔG	-464,192970	-503,485707	-967,769328	-56,884409

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 13. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	$\Delta G_{total}(Kcal\ mol^{-1})$
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_5CH_3$ -275,616761	$\bullet CH_2(CH_2)_9CH_3$ -432,789112	$CH_3(CH_2)_{16}CH_3$ -708,494762	-55,778736
Reação 2 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_6CH_3$ -314,909959	$\bullet CH_2(CH_2)_8CH_3$ -393,496148	$CH_3(CH_2)_{16}CH_3$ -708,494762	-55,631899
Reação 3 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$ -354,202989	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$ -354,202989	$CH_3(CH_2)_{16}CH_3$ -708,494762	-55,712848
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_5COOH$ -424,899574	$\bullet CH_2(CH_2)_9CH_3$ -432,789112	$CH_3(CH_2)_{16}COOH$ -857,778177	-56,156497
Reação 2 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_6COOH$ -464,192970	$\bullet CH_2(CH_2)_8CH_3$ -393,496148	$CH_3(CH_2)_{16}COOH$ -857,778177	-55,885413
Reação 3 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_7COOH$ -503,485707	$\bullet CH_2(CH_2)_7CH_3$ -354,202989	$CH_3(CH_2)_{16}COOH$ -857,778177	-56,150222
Reação 4 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_8COOH$ -542,779741	$\bullet CH_2(CH_2)_6CH_3$ -314,909959	$CH_3(CH_2)_{16}COOH$ -857,778177	-55,520202
Éster				
Reação 1 ΔG	$[CH_3(CH_2)_{10}COO]\bullet$ -621,359792	$\bullet CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ -236,323726	$CH_3(CH_2)_{10}COO(CH_2)_5CH_3$ -857,770008	-54,273340
Cetona				
Reação 1 ΔG	$[CH_3(CH_2)_{10}CO]\bullet$ -546,123281	$\bullet CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ -236,323726	$CH_3(CH_2)_{10}CO(CH_2)_5CH_3$ -782,533310	-54,155996
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_5COOH$ -424,899574	$\bullet CH_2(CH_2)_9COOH$ -582,072664	$HOOC(CH_2)_{16}COOH$ -1007,062227	-56,468997
Reação 2 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_6COOH$ -464,192970	$\bullet CH_2(CH_2)_8COOH$ -542,779741	$HOOC(CH_2)_{16}COOH$ -1007,062227	-56,172185
Reação 3 ΔG	$\bullet CH_2(CH_2)_7COOH$ -503,485707	$\bullet CH_2(CH_2)_7COOH$ -503,485707	$HOOC(CH_2)_{16}COOH$ -1007,062227	-56,986066

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 14. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₉.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃ -747,787638	-55,576678
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ -354,202989	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃ -747,787638	-55,535263
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH -464,192970	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ COOH -897,071056	-55,832075
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH -503,485707	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ COOH -897,071056	-55,974520
Éster				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]• -621,359792	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃ -275,616761	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₆ CH ₃ -897,065091	-55,558480
Cetona				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]• -546,123281	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃ -275,616761	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₆ CH ₃ -821,826626	-54,332326
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH -464,192970	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH -582,072664	HOOC(CH ₂) ₁₇ COOH -1046,355165	-56,181598
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH -503,485707	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH -542,779741	HOOC(CH ₂) ₁₇ COOH -1046,355165	-56,298315

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 15. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₀.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -393,496148	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃ -787,080587	-55,403485
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	•CH ₂ (CH ₂) ₇ CH ₃ -354,202989	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃ -787,080587	-55,525850
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH -503,485707	•CH ₂ (CH ₂) ₉ CH ₃ -432,789112	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ COOH -1085,648041	-93,733191
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH -542,779741	•CH ₂ (CH ₂) ₈ CH ₃ -542,779741	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ COOH -1085,648041	-55,571658
Álcool				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COH]: -546,641981	2([•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃]) -315,474498	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COH[(CH ₂) ₃ CH ₃] ₂ -862,285127	-105,828
Éster				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]• -621,360	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,910	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₇ CH ₃ -936,358	-55,651
Cetona				
Reação 1 ΔG	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]• -546,123281	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃ -314,909959	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₇ CH ₃] -861,119045	-53,843496
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH -503,485707	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH -582,072664	HOOC(CH ₂) ₁₈ COOH -1085,648041	-56,268822
Reação 2 ΔG	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH -542,779741	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH -542,779741	HOOC(CH ₂) ₁₈ COOH -1085,648041	-55,571658

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 16. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₁.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarbonetos				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$ -393,496148	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}_3$ -826,373204	-55,185739
Ácidos Carboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_8\text{COOH}$ -542,779741	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{COOH}$ -975,656916	-55,260413
Ésteres				
Reação 1 ΔG	$[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COO}] \bullet$ -582,067818	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$ -393,496148	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COO}((\text{CH}_2)_9\text{CH}_3)$ -975,652583	-55,608054

Valores de ΔG em Hartre.**Tabela 17.** Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₂.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{CH}_3$ -865,666419	-55,343244
Ácido Carboxílico				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$ -582,072664	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$ -1014,949872	-55,281121
Álcool				
Reação 1 ΔG	$[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COH}] \bullet$ -546,641981	$2(\bullet[\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3])$ -394,060704	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COH}[(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3]_2$ -940,879505	-110,956318
Éster				
Reação 1 ΔG	$[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COO}] \bullet$ -582,067818	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COOCH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -1014,943627	-54,403234
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$ -582,072664	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$ -582,072664	$\text{HOOC}(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$ -1164,233931	-55,599269
Reação 2 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$ -621,365654	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_8\text{COOH}$ -542,779741	$\text{HOOC}(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$ -1164,233931	-55,557225

Valores de ΔG em Hartre.

Tabela 18. Compostos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₃.

Reações/ ΔG	Radical 1	Radical 2	Compostos	ΔG_{total} (Kcal mol ⁻¹)
Hidrocarboneto				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{CH}_3$ -865,666419	-55,343244
Ácido Carboxílico				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$ -582,072664	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$ -1014,949872	-55,281121
Álcool				
Reação 1 ΔG	$[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COH}]$: -546,641981	$2(\bullet[\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3])$ -394,060704	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COH}[(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3]_2$ -940,879505	-110,956318
Éster				
Reação 1 ΔG	$[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COO}]$ \bullet -582,067818	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -432,789112	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COOCH}_2(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$ -1014,943627	-54,403234
Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$ -582,072664	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$ -582,072664	$\text{HOOC}(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$ -1164,233931	-55,599269
Reação 2 ΔG	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$ -621,365654	$\bullet\text{CH}_2(\text{CH}_2)_8\text{COOH}$ -542,779741	$\text{HOOC}(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$ -1164,233931	-55,557225

Valores de ΔG em Hartre.

Anexo VII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₆**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico, C₆.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₃	•CH₂(CH₂)₃CH₃	CH₃(CH₂)₄CH₃	Total (Kcal mol⁻¹)
ΔH	-39,813521	-196,968154	-236,913238	-82,557098
ΔG	-39,836258	-197,008460	-236,955102	-69,267064
ΔS	47,878000	84,872000	88,110000	-28,012046
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-196,960285	-236,904073	-83,227279
ΔG	-39,848207	-197,030352	-236,977996	-62,397712
ΔS	51,895000	98,143000	103,544000	-29,175450
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-196,933203	-236,871170	-83,645828
ΔG	-39,879122	-197,092993	-237,045270	-45,905494
ΔS	58,547000	125,651000	136,904000	-29,677458
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₂CH₃	CH₃(CH₂)₄CH₃	Total (Kcal mol⁻¹)
ΔH	-79,105920	-157,680598	-236,913238	-79,518067
ΔG	-79,135088	-157,717406	-236,955102	-64,387546
ΔS	61,421000	77,509000	88,110000	-31,890058
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-157,674163	-236,904073	-80,045176
ΔG	-79,150511	-157,737249	-236,977996	-56,623992
ΔS	67,459000	88,364000	103,544000	-32,805595
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-157,652297	-236,871170	-80,276727
ΔG	-79,191503	-157,792928	-237,045270	-38,177081
ΔS	79,075000	11,058500	136,904000	29,348956
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂CH₂CH₃	CH₃(CH₂)₄CH₃	Total (Kcal mol⁻¹)
ΔH	-118,392684	-118,392684	-236,913238	-80,239704
ΔG	-118,426415	-118,426415	-236,955102	-64,176703
ΔS	71,030000	71,030000	88,110000	-33,854165
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-118,387696	-236,904073	-80,748614
ΔG	-118,444419	-118,444419	-236,977996	-55,947537
ΔS	79,452000	79,452000	103,544000	-34,738954
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-118,371074	-236,871170	-80,962595
ΔG	-118,493609	-118,493609	-237,045270	-36,428211
ΔS	96,355000	96,355000	136,904000	-35,018823

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₆.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	·COOH	·CH₂(CH₂)₃CH₃	CH₃(CH₂)₄COOH	Total
ΔH	-189,082000	-196,968154	-386,189314	-87,324292
ΔG	-189,110000	-197,008460	-386,236054	-73,791411
ΔS	60,177000	84,872000	98,374000	-29,289029
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-196,960285	-386,179023	-87,686992
ΔG	-189,125000	-197,030352	-386,261639	-66,696155
ΔS	64,854000	98,143000	115,720000	-29,666790
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-196,933203	-386,143629	-87,491209
ΔG	-189,164000	-197,092993	-386,336527	-49,908380
ΔS	72,883000	125,651000	151,686000	-29,397588
Reação 2				
Temperatura=298 K	·CH₂COOH	·CH₂(CH₂)₂CH₃	CH₃(CH₂)₄COOH	Total
ΔH	-228,387003	-157,680598	-386,189314	-76,376125
ΔG	-228,419000	-157,717406	-386,236054	-62,530116
ΔS	67,378000	77,509000	98,374000	-29,187373
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-157,674163	-386,179023	-76,758278
ΔG	-228,436031	-157,737249	-386,261639	-55,446156
ΔS	74,927000	88,364000	115,720000	-29,851278
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-157,652297	-386,143629	-76,829814
ΔG	-228,481915	-157,792928	-386,336527	-38,707327
ΔS	88,873000	110,585000	151,686000	-29,977408
Reação 3				
Temperatura=298 K	·CH₂CH₂COOH	·CH₂CH₂CH₃	CH₃(CH₂)₄COOH	Total
ΔH	-267,666670	-118,392684	-386,189314	-81,551200
ΔG	-267,704159	-118,426415	-386,236054	-66,189755
ΔS	78,942000	71,030000	98,374000	-32,378261
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-118,387696	-386,179023	-82,023087
ΔG	-267,724280	-118,444419	-386,261639	-58,320779
ΔS	89,175000	79,452000	115,720000	-33,199672
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-118,371074	-386,143629	-82,189377
ΔG	-267,779687	-118,493609	-386,336527	-39,678085
ΔS	108,603000	96,355000	151,686000	-33,428713

Tabela 03. Energias dos álcoois gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₆.

Álcoois				
Reação 1				
Temperatura=298 K	$\cdot\text{CH}_2(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	$\cdot\text{OH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_2\text{OH}$	Total
ΔH	-236,255758	-75,727274	-312,122932	-87,788649
ΔG	-236,299708	-75,747502	-312,168064	-75,837094
ΔS	92,546000	42,597000	94,989000	-25,197037
Temperatura=448 K				
ΔH	-236,246445	-75,725611	-312,112796	-88,315757
ΔG	-236,323726	-75,758047	-312,192804	-69,673063
ΔS	108,247000	45,432000	112,067000	-26,111946
Temperatura=798 K				
ΔH	-236,214127	-75,721710	-312,077137	-88,667163
ΔG	-236,393517	-75,784617	-312,265675	-54,932853
ΔS	141,064000	49,467000	148,258000	-26,526730
Reação 2				
Temperatura=298 K	$\cdot\text{CH}_2(\text{CH}_2)_4\text{COOH}$	$\cdot\text{OH}$	$\text{HOCH}_2(\text{CH}_2)_4\text{COOH}$	Total
ΔH	-385,530842	-75,727274	-461,398764	-88,258026
ΔG	-385,579821	-75,747502	-461,448688	-76,157751
ΔS	103,136000	42,597000	105,073000	-25,514557
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,520439	-75,725611	-461,387506	-88,765055
ΔG	-385,606602	-75,758047	-461,476075	-69,920929
ΔS	120,688000	45,432000	124,058000	-26,394326
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,485664	-75,721710	-461,349359	-89,097007
ΔG	-385,684141	-75,784617	-461,556456	-55,031372
ΔS	156,073000	49,467000	162,851000	-26,787774

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₆.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₃COOH	HOOC(CH₂)₄COOH	Total
ΔH	-189,081577	-346,243075	-535,464598	-87,817514
ΔG	-189,110155	-346,288522	-535,515945	-73,586843
ΔS	60,177000	95,699000	108,070000	-29,998743
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,078820	-346,234112	-535,453204	-88,022083
ΔG	-189,125121	-346,313235	-535,544080	-66,342867
ΔS	64,854000	110,827000	127,290000	-30,365836
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,070987	-346,204569	-535,415334	-87,712093
ΔG	-189,163672	-346,383761	-535,626237	-49,450298
ΔS	72,883000	140,908000	165,844000	-30,087222
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	CH₂(CH₂)₂COOH	HOOC(CH₂)₄COOH	Total
ΔH	-228,387003	-306,955103	-535,464598	-76,864955
ΔG	-228,419000	-306,996752	-535,515945	-62,872109
ΔS	67,378000	87,702000	108,070000	-29,499245
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-306,947582	-535,453204	-77,236441
ΔG	-228,436031	-307,019263	-535,544080	-55,714103
ΔS	74,927000	100,403000	127,290000	-30,145580
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-306,923271	-535,415334	-77,288524
ΔG	-228,481915	-307,082461	-535,626237	-38,818396
ΔS	88,873000	125,179000	165,844000	-30,251002
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂CH₂COOH	HOOC(CH₂)₄COOH	Total
ΔH	-267,666670	-267,666670	-535,464598	-82,365708
ΔG	-267,704159	-267,704159	-535,515945	-67,537019
ΔS	78,942000	78,942000	108,070000	-31,258783
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-267,660615	-535,453204	-82,815005
ΔG	-267,724280	-267,724280	-535,544080	-59,939755
ΔS	89,175000	89,175000	127,290000	-32,040661
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-267,641578	-535,415334	-82,943017
ΔG	-267,779687	-267,779687	-535,626237	-41,957201
ΔS	108,603000	108,603000	165,844000	-32,230169

Anexo VIII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₇**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₇.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₃	•CH₂(CH₂)₄CH₃	CH₃(CH₂)₅CH₃	Total
ΔH	-39,813521	-236,255758	-276,200808	-82,535763
ΔG	-39,836258	-236,299708	-276,246184	-69,162897
ΔS	47,878000	92,546000	95,501000	-28,189632
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-236,246445	-276,190204	-83,209081
ΔG	-39,848207	-236,323726	-276,271133	-62,248992
ΔS	51,895000	108,247000	113,356000	-29,358683
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-236,214127	-276,152073	-83,632650
ΔG	-39,879122	-236,393517	-276,345392	-45,653235
ΔS	58,547000	141,064000	152,017000	-29,865711
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₃CH₃	CH₃(CH₂)₅CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-196,968154	-276,200808	-79,526852
ΔG	-79,135088	-197,008460	-276,246184	-64,405116
ΔS	61,421000	84,872000	95,501000	-31,872488
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-196,960285	-276,190204	-80,050823
ΔG	-79,150511	-197,030352	-276,271133	-56,645328
ΔS	67,459000	98,143000	113,356000	-32,784887
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-196,933203	-276,152073	-80,274844
ΔG	-79,191503	-197,092993	-276,345392	-38,212849
ΔS	79,075000	125,651000	152,017000	-33,075425
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₂CH₃	CH₃(CH₂)₅CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-157,680598	-276,200808	-80,023840
ΔG	-118,426415	-157,717406	-276,246184	-64,233806
ΔS	71,030000	77,509000	95,501000	-33,281875
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-157,674163	-276,190204	-80,537771
ΔG	-118,444419	-157,737249	-276,271133	-56,140182
ΔS	79,452000	88,364000	113,356000	-34,174195
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-157,652297	-276,152073	-80,761792
ΔG	-118,493609	-157,792928	-276,345392	-36,932101
ΔS	96,355000	11,058500	152,017000	27,989142

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₇.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₄CH₃	CH₃(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-189,082000	-236,255758	-425,476898	-87,311741
ΔG	-189,110000	-236,299708	-425,527066	-73,643319
ΔS	60,177000	92,546000	105,586000	-29,578939
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-236,246445	-425,465167	-87,676952
ΔG	-189,125000	-236,323726	-425,554663	-66,476527
ΔS	64,854000	108,247000	125,356000	-29,960465
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-236,214127	-425,424544	-87,485562
ΔG	-189,164000	-236,393517	-425,636438	-49,523717
ΔS	72,883000	141,064000	166,624000	-29,695656
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₃CH₃	CH₃(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-228,387003	-196,968154	-425,476898	-76,393695
ΔG	-228,419000	-197,008460	-425,527066	-62,503761
ΔS	67,378000	84,872000	105,586000	-29,282127
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-196,960285	-425,465167	-76,772083
ΔG	-228,436031	-197,030352	-425,554663	-55,396583
ΔS	74,927000	98,143000	125,356000	-29,941012
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-196,933203	-425,424544	-76,835462
ΔG	-228,481915	-197,092993	-425,636438	-38,610690
ΔS	88,873000	125,651000	166,624000	-30,057729
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₂CH₃	CH₃(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-267,666670	-157,680598	-425,476898	-81,344121
ΔG	-267,704159	-157,717406	-425,527066	-66,202933
ΔS	78,942000	77,509000	105,586000	-31,918296
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-157,674163	-425,465167	-81,820401
ΔG	-267,724280	-157,737249	-425,554663	-58,442516
ΔS	89,175000	88,364000	125,356000	-32,745354
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-157,652297	-425,424544	-81,996104
ΔG	-267,779687	-157,792928	-425,636438	-40,049571
ΔS	108,603000	11,058500	166,624000	29,469438

Tabela 03. Energias dos álcoois gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₇.

Álcoois				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅CH₃	•OH	CH₃(CH₂)₅H₂COH	Total
ΔH	-275,543325	-75,727274	-351,410548	-87,819397
ΔG	-275,590719	-75,747502	-351,459218	-75,926827
ΔS	99,800000	42,597000	102,435000	-25,076555
Temperatura=448 K				
ΔH	-275,532573	-75,725611	-351,398970	-88,344623
ΔG	-275,616761	-75,758047	-351,486026	-69,790407
ΔS	117,921000	45,432000	121,939000	-25,987699
Temperatura=798 K				
ΔH	-275,495031	-75,721710	-351,358079	-88,691008
ΔG	-275,693460	-75,784617	-351,565917	-55,120478
ΔS	156,035000	49,467000	163,434000	-26,398091
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•OH	HOCH₂(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-424,818509	-75,727274	-500,686642	-88,390431
ΔG	-424,870823	-75,747502	-500,740059	-76,389302
ΔS	110,159000	42,597000	112,425000	-25,308106
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-75,725611	-500,673943	-88,896204
ΔG	-424,899574	-75,758047	-500,769492	-70,200171
ΔS	130,133000	45,432000	133,834000	-26,186620
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-75,721710	-500,630566	-89,224392
ΔG	-424,983892	-75,784617	-500,856838	-55,427331
ΔS	170,814000	49,467000	177,930000	-26,575676

Tabela 04 Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₇.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₄COOH	HOOC(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-189,081577	-385,530842	-574,752560	-87,939879
ΔG	-189,110155	-385,579821	-574,808057	-74,097008
ΔS	60,177000	103,136000	116,804000	-29,184863
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,078820	-385,520439	-574,739705	-88,131269
ΔG	-189,125121	-385,606602	-574,838573	-67,049444
ΔS	64,854000	120,688000	138,484000	-29,529366
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,070987	-385,485664	-574,696592	-87,814377
ΔG	-189,163672	-385,684141	-574,928492	-50,626879
ΔS	72,883000	156,073000	182,356000	-29,241966
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₃COOH	HOOC(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-228,387003	-346,243075	-574,752560	-76,858680
ΔG	-228,419000	-346,288522	-574,808057	-63,086718
ΔS	67,378000	95,699000	116,804000	-29,036770
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-346,234112	-574,739705	-77,218243
ΔG	-228,436031	-346,313235	-574,838573	-56,041036
ΔS	74,927000	110,827000	138,484000	-29,662398
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-346,204569	-574,696592	-77,263424
ΔG	-228,481915	-346,383761	-574,928492	-39,417668
ΔS	88,873000	140,908000	182,356000	-29,759662
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₂COOH	HOOC(CH₂)₅COOH	Total
ΔH	-267,666670	-306,955103	-574,752560	-82,070150
ΔG	-267,704159	-306,996752	-574,808057	-67,235186
ΔS	78,942000	87,702000	116,804000	-31,275098
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-306,947582	-574,739705	-82,522585
ΔG	-267,724280	-307,019263	-574,838573	-59,632275
ΔS	89,175000	100,403000	138,484000	-32,061996
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-306,923271	-574,696592	-82,670050
ΔG	-267,779687	-307,082461	-574,928492	-41,631523
ΔS	108,603000	125,179000	182,356000	-32,270329

Anexo IX: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₈**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₈.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	·CH₃	·CH₂(CH₂)₅CH₃	CH₃(CH₂)₆CH₃	Total
ΔH	-39,813521	-275,543325	-315,488389	-82,544548
ΔG	-39,836258	-275,590719	-315,537384	-69,281497
ΔS	47,878000	99,800000	103,120000	-27,960591
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-275,532573	-315,476339	-83,213474
ΔG	-39,848207	-275,616761	-315,564444	-62,422185
ΔS	51,895000	117,921000	123,407000	-29,122112
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-275,495031	-315,432971	-83,628885
ΔG	-39,879122	-275,693460	-315,645824	-45,960087
ΔS	58,547000	156,035000	167,377000	-29,621610
Reação 2				
Temperatura=298 K	·CH₂CH₃	·CH₂(CH₂)₄CH₃	CH₃(CH₂)₆CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-236,255758	-315,488389	-79,512420
ΔG	-79,135088	-236,299708	-315,537384	-64,374996
ΔS	61,421000	92,546000	103,120000	-31,907001
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-236,246445	-315,476339	-80,035135
ΔG	-79,150511	-236,323726	-315,564444	-56,605795
ΔS	67,459000	108,247000	123,407000	-32,818145
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-236,214127	-315,432971	-80,258529
ΔG	-79,191503	-236,393517	-315,645824	-38,155118
ΔS	79,075000	141,064000	167,377000	-33,108683
Reação 3				
Temperatura=298 K	·CH₂CH₂CH₃	·CH₂(CH₂)₃CH₃	CH₃(CH₂)₆CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-196,968154	-315,488389	-80,039528
ΔG	-118,426415	-197,008460	-315,537384	-64,325423
ΔS	71,030000	84,872000	103,120000	-33,121233
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-196,960285	-315,476339	-80,545929
ΔG	-118,444419	-197,030352	-315,564444	-56,270704
ΔS	79,452000	98,143000	123,407000	-34,003512
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-196,933203	-315,432971	-80,756772
ΔG	-118,493609	-197,092993	-315,645824	-37,162397
ΔS	96,355000	125,651000	167,377000	-34,280244

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₈.

Ácido Carboxílico				
Reação 1				
Temperatura=298 K	$\dot{\text{C}}\text{OOH}$	$\dot{\text{C}}\text{H}_2(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{COOH}$	Total
ΔH	-189,082000	-275,543325	-464,764507	-87,338097
ΔG	-189,110000	-275,590719	-464,818226	-73,736818
ΔS	60,177000	99,800000	113,062000	-29,439632
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-275,532573	-464,751335	-87,702053
ΔG	-189,125000	-275,616761	-464,847899	-66,602656
ΔS	64,854000	117,921000	135,256000	-29,818648
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-275,495031	-464,705480	-87,505642
ΔG	-189,164000	-275,693460	-464,936709	-49,729540
ΔS	72,883000	156,035000	181,828000	-29,549446
Reação 2				
Temperatura=298 K	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{COOH}$	$\dot{\text{C}}\text{H}_2(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{COOH}$	Total
ΔH	-228,387003	-236,255758	-464,764507	-76,396832
ΔG	-228,419000	-236,299708	-464,818226	-62,448540
ΔS	67,378000	92,546000	113,062000	-29,406374
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-236,246445	-464,751335	-76,777104
ΔG	-228,436031	-236,323726	-464,847899	-55,309986
ΔS	74,927000	108,247000	135,256000	-30,069024
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-236,214127	-464,705480	-76,842992
ΔG	-228,481915	-236,393517	-464,936709	-38,451930
ΔS	88,873000	141,064000	181,828000	-30,188879
Reação 3				
Temperatura=298 K	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{CH}_2\text{COOH}$	$\dot{\text{C}}\text{H}_2(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{COOH}$	Total
ΔH	-267,666670	-196,968154	-464,764507	-81,377379
ΔG	-267,704159	-197,008460	-464,818226	-66,269449
ΔS	78,942000	84,872000	113,062000	-31,847388
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-196,960285	-464,751335	-81,849267
ΔG	-267,724280	-197,030352	-464,847899	-58,525975
ΔS	89,175000	98,143000	135,256000	-32,669426
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-196,933203	-464,705480	-82,014929
ΔG	-267,779687	-197,092993	-464,936709	-40,178838
ΔS	108,603000	125,651000	181,828000	-32,897839

Tabela 03. Energias dos álcoois gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₈.

Álcoois				
Reação 1				
Temperatura=298 K	·CH₂(CH₂)₆CH₃	·OH	CH₃(CH₂)₆H₂COH	Total
ΔH	-314,830933	-75,727274	-390,698128	-87,801827
ΔG	-314,881852	-75,747502	-390,750294	-75,891059
ΔS	107,222000	42,597000	109,793000	-25,116715
Temperatura=448 K				
ΔH	-314,818740	-75,725611	-390,685113	-88,329563
ΔG	-314,909959	-75,758047	-390,779149	-69,743344
ΔS	127,770000	45,432000	131,716000	-26,032880
Temperatura=798 K				
ΔH	-314,775965	-75,721710	-390,638995	-88,679713
ΔG	-314,993664	-75,784617	-390,866005	-55,047687
ΔS	171,188000	49,467000	178,510000	-26,446409
Reação 2				
Temperatura=298 K	·CH₂(CH₂)₆COOH	·OH	HOOC(CH₂)₆H₂COH	Total
ΔH	-464,106170	-75,727274	-539,974143	-88,290029
ΔG	-464,162106	-75,747502	-540,031078	-76,223640
ΔS	117,786000	42,597000	119,829000	-25,448041
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-75,725611	-539,960005	-88,797685
ΔG	-464,192970	-75,758047	-540,062569	-69,999996
ΔS	140,187000	45,432000	143,660000	-26,329692
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-75,721710	-539,911399	-89,127128
ΔG	-464,284409	-75,784617	-540,156908	-55,146834
ΔS	186,172000	49,467000	193,056000	-26,721258

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₈.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₅COOH	HOOC(CH₂)₆COOH	Total
ΔH	-189,082000	-424,818509	-614,040514	-87,854538
ΔG	-189,110000	-424,870823	-614,099286	-74,336717
ΔS	60,177000	110,159000	123,697000	-29,266439
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-424,806667	-614,026222	-88,199668
ΔG	-189,125000	-424,899574	-614,131738	-67,246482
ΔS	64,854000	130,133000	147,795000	-29,613452
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-424,766668	-613,977882	-87,985687
ΔG	-189,164000	-424,983892	-614,228362	-50,495730
ΔS	72,883000	170,814000	196,965000	-29,324797
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₄COOH	HOOC(CH₂)₆COOH	Total
ΔH	-228,387003	-385,530842	-614,040514	-76,976024
ΔG	-228,419000	-385,579821	-614,099286	-63,042792
ΔS	67,378000	103,136000	123,697000	-29,378136
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-385,520439	-614,026222	-77,337470
ΔG	-228,436031	-385,606602	-614,131738	-55,914279
ΔS	74,927000	120,688000	147,795000	-30,007528
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-385,485664	-613,977882	-77,385788
ΔG	-228,481915	-385,684141	-614,228362	-39,097638
ΔS	88,873000	156,073000	196,965000	-30,108557
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₃COOH	HOOC(CH₂)₆COOH	Total
ΔH	-267,666670	-346,243075	-614,040514	-82,058855
ΔG	-267,704159	-346,288522	-614,099286	-66,895704
ΔS	78,942000	95,699000	123,697000	-31,967869
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-346,234112	-614,026222	-82,514427
ΔG	-267,724280	-346,313235	-614,131738	-59,125875
ΔS	89,175000	110,827000	147,795000	-32,760415
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-346,204569	-613,977882	-82,665030
ΔG	-267,779687	-346,383761	-614,228362	-40,734184
ΔS	108,603000	140,908000	196,965000	-32,973140

Anexo X: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₉**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₉.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	·CH₃	·CH₂(CH₂)₆CH₃	CH₃(CH₂)₇CH₃	Total
ΔH	-39,813521	-314,830933	-354,774453	-81,575672
ΔG	-39,836258	-314,881852	-354,827222	-68,468871
ΔS	47,878000	107,222000	111,061000	-27,634913
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-314,818740	-354,760964	-82,245853
ΔG	-39,848207	-314,909959	-354,856467	-61,684861
ΔS	51,895000	127,770000	133,770000	-28,799571
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-314,775965	-354,712351	-82,653735
ΔG	-39,879122	-314,993664	-354,945144	-45,405369
ΔS	58,547000	171,188000	183,057000	-29,290912
Reação 2				
Temperatura=298 K	·CH₂CH₃	·CH₂(CH₂)₅CH₃	CH₃(CH₂)₇CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-275,543325	-354,774453	-78,569272
ΔG	-79,135088	-275,590719	-354,827222	-63,638927
ΔS	61,421000	99,800000	111,061000	-31,475902
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-275,532573	-354,760964	-79,091988
ΔG	-79,150511	-275,616761	-354,856467	-55,970754
ΔS	67,459000	117,921000	133,770000	-32,385791
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-275,495031	-354,712351	-79,302204
ΔG	-79,191503	-275,693460	-354,945144	-37,764179
ΔS	79,075000	156,035000	183,057000	-32,663778
Reação 3				
Temperatura=298 K	·CH₂CH₂CH₃	·CH₂(CH₂)₄CH₃	CH₃(CH₂)₇CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-236,255758	-354,774453	-79,073163
ΔG	-118,426415	-236,299708	-354,827222	-63,440633
ΔS	71,030000	92,546000	111,061000	-32,953688
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-236,246445	-354,760964	-79,582701
ΔG	-118,444419	-236,323726	-354,856467	-55,422938
ΔS	79,452000	108,247000	133,770000	-33,840987
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-236,214127	-354,712351	-79,787897
ΔG	-118,493609	-236,393517	-354,945144	-36,406875
ΔS	96,355000	141,064000	183,057000	-34,112699

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₉.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	$\dot{\text{C}}\text{OOH}$	$\dot{\text{C}}\text{H}_2(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	Total
ΔH	-189,082000	-314,830933	-504,050574	-86,371104
ΔG	-189,110000	-314,881852	-504,108682	-73,311993
ΔS	60,177000	107,222000	122,299000	-28,300701
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-314,818740	-504,035955	-86,731295
ΔG	-189,125000	-314,909959	-504,140852	-66,448916
ΔS	64,854000	127,770000	146,929000	-28,674069
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-314,775965	-503,984840	-86,517941
ΔG	-189,164000	-314,993664	-504,237695	-50,220253
ΔS	72,883000	171,188000	198,833000	-28,387297
Reação 2				
Temperatura=298 K	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{COOH}$	$\dot{\text{C}}\text{H}_2(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	Total
ΔH	-228,387003	-275,543325	-504,050574	-75,455567
ΔG	-228,419000	-275,590719	-504,108682	-62,100272
ΔS	67,378000	99,800000	122,299000	-28,162021
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-275,532573	-504,035955	-75,830818
ΔG	-228,436031	-275,616761	-504,140852	-55,258531
ΔS	74,927000	117,921000	146,929000	-28,814632
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-275,495031	-503,984840	-75,874117
ΔG	-228,481915	-275,693460	-504,237695	-39,106423
ΔS	88,873000	156,035000	198,833000	-28,912523
Reação 3				
Temperatura=298 K	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{CH}_2\text{COOH}$	$\text{CH}_2(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	Total
ΔH	-267,666670	-236,255758	-504,050574	-80,412896
ΔG	-267,704159	-236,299708	-504,108682	-65,772461
ΔS	78,942000	92,546000	122,299000	-30,866589
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-236,246445	-504,035955	-80,882901
ΔG	-267,724280	-236,323726	-504,140852	-58,261793
ΔS	89,175000	108,247000	146,929000	-31,684862
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-236,214127	-503,984840	-81,033504
ΔG	-267,779687	-236,393517	-504,237695	-40,468747
ΔS	108,603000	141,064000	198,833000	-31,898843

Tabela 03. Energias dos álcoois gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₉.

Álcoois				
Reação 1				
Temperatura=298 K	$\cdot\text{CH}_2(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	$\cdot\text{OH}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{H}_2\text{COH}$	Total
ΔH	-354,118505	-75,727274	-429,984249	-86,891310
ΔG	-354,172862	-75,747502	-430,040482	-75,375246
ΔS	114,461000	42,597000	118,353000	-24,287775
Temperatura=448 K				
ΔH	-354,104874	-75,725611	-429,969784	-87,411515
ΔG	-354,202989	-75,758047	-430,071673	-69,425824
ΔS	137,428000	45,432000	142,715000	-25,191389
Temperatura=798 K				
ΔH	-354,056874	-75,721710	-429,918405	-87,739076
ΔG	-354,293592	-75,784617	-430,166187	-55,207075
ΔS	186,144000	49,467000	194,845000	-25,581073
Reação 2				
Temperatura=298 K	$\cdot\text{CH}_2(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	$\cdot\text{OH}$	$\text{HOCH}_2(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	Total
ΔH	-503,393316	-75,727274	-579,260344	-87,697033
ΔG	-503,452778	-75,747502	-579,321566	-76,108178
ΔS	125,212000	42,597000	128,853000	-24,445280
Temperatura=448 K				
ΔH	-503,378598	-75,725611	-579,244756	-88,194648
ΔG	-503,485707	-75,758047	-579,355503	-70,123615
ΔS	150,026000	45,432000	155,123000	-25,310616
Temperatura=798 K				
ΔH	-503,328162	-75,721710	-579,190886	-88,487695
ΔG	-503,584139	-75,784617	-579,457760	-55,850900
ΔS	201,289000	49,467000	209,857000	-25,664531

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₉.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₆ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	Total
ΔH	-189,082000	-464,106170	-653,326606	-86,869974
ΔG	-189,110000	-464,162106	-653,389354	-73,574292
ΔS	60,177000	117,786000	132,064000	-28,802081
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-464,092886	-653,310868	-87,212595
ΔG	-189,125000	-464,192970	-653,424094	-66,593871
ΔS	64,854000	140,187000	158,594000	-29,145957
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-464,047656	-653,257278	-86,986691
ΔG	-189,164000	-464,284409	-653,528261	-50,107929
ΔS	72,883000	186,172000	213,088000	-28,844752
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₅ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	Total
ΔH	-228,387003	-424,818509	-653,326606	-75,987696
ΔG	-228,419000	-424,870823	-653,389354	-62,456698
ΔS	67,378000	110,159000	132,064000	-28,534762
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-424,806667	-653,310868	-76,344749
ΔG	-228,436031	-424,899574	-653,424094	-55,527732
ΔS	74,927000	130,133000	158,594000	-29,157880
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-424,766668	-653,257278	-76,376752
ΔG	-228,481915	-424,983892	-653,528261	-39,190510
ΔS	88,873000	170,814000	213,088000	-29,241338
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH ₂ CH ₂ COOH	•CH ₂ (CH ₂) ₄ COOH	HOOC(CH ₂) ₇ COOH	Total
ΔH	-267,666670	-385,530842	-653,326606	-81,007776
ΔG	-267,704159	-385,579821	-653,389354	-66,123239
ΔS	78,942000	103,136000	132,064000	-31,384285
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-385,520439	-653,310868	-81,459583
ΔG	-267,724280	-385,606602	-653,424094	-58,491462
ΔS	89,175000	120,688000	158,594000	-32,171810
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-385,485664	-653,257278	-81,598890
ΔG	-267,779687	-385,684141	-653,528261	-40,432352
ΔS	108,603000	156,073000	213,088000	-32,371986

Anexo XI: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₀**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₀.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₈CH₃	Total
ΔH	-39,813521	-354,118505	-394,063557	-82,537018
ΔG	-39,836258	-354,172862	-394,119520	-69,277104
ΔS	47,878000	114,461000	117,782000	-27,959963
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-354,104874	-394,048631	-83,207826
ΔG	-39,848207	-354,202989	-394,150660	-62,414655
ΔS	51,895000	137,428000	142,911000	-29,123994
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-354,056874	-393,994805	-83,623238
ΔG	-39,879122	-354,293592	-394,245943	-45,951930
ΔS	58,547000	186,144000	197,483000	-29,623492
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₆CH₃	CH₃(CH₂)₈CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-314,830933	-394,063557	-79,508027
ΔG	-79,135088	-314,881852	-394,119520	-64,369976
ΔS	61,421000	107,222000	117,782000	-31,915786
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-314,818740	-394,048631	-80,033253
ΔG	-79,150511	-314,909959	-394,150660	-56,595127
ΔS	67,459000	127,770000	142,911000	-32,830068
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-314,775965	-393,994805	-80,256019
ΔG	-79,191503	-314,993664	-394,245943	-38,137548
ΔS	79,075000	171,188000	197,483000	-33,119978
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₅CH₃	CH₃(CH₂)₈CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-275,543325	-394,063557	-80,037645
ΔG	-118,426415	-275,590719	-394,119520	-64,248239
ΔS	71,030000	99,800000	117,782000	-33,288150
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-275,532573	-394,048631	-80,548439
ΔG	-118,444419	-275,616761	-394,150660	-56,149595
ΔS	79,452000	117,921000	142,911000	-34,175450
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-275,495031	-393,994805	-80,760537
ΔG	-118,493609	-275,693460	-394,245943	-36,944024
ΔS	96,355000	156,035000	197,483000	-34,454692

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₀.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₈COOH	Total
ΔH	-189,082000	-354,118505	-543,339684	-87,336214
ΔG	-189,110000	-354,172862	-543,400368	-73,736190
ΔS	60,177000	114,461000	127,720000	-29,441514
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-354,104874	-543,323633	-87,700170
ΔG	-189,125000	-354,202989	-543,434120	-66,598264
ΔS	64,854000	137,428000	154,758000	-29,821785
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-354,056874	-543,267319	-87,503132
ΔG	-189,164000	-354,293592	-543,536833	-49,724520
ΔS	72,883000	186,144000	211,933000	-29,551956
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₆CH₃	CH₃(CH₂)₈COOH	Total
ΔH	-228,387003	-314,830933	-543,339684	-76,398087
ΔG	-228,419000	-314,881852	-543,400368	-62,447285
ΔS	67,378000	107,222000	127,720000	-29,417669
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-314,818740	-543,323633	-76,778986
ΔG	-228,436031	-314,909959	-543,434120	-55,302456
ΔS	74,927000	127,770000	154,758000	-30,082202
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-314,775965	-543,267319	-76,843620
ΔG	-228,481915	-314,993664	-543,536833	-38,437498
ΔS	88,873000	171,188000	211,933000	-30,200801
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₅CH₃	CH₃(CH₂)₈COOH	Total
ΔH	-267,666670	-275,543325	-543,339684	-81,381144
ΔG	-267,704159	-275,590719	-543,400368	-66,196030
ΔS	78,942000	99,800000	127,720000	-32,016815
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-275,532573	-543,323633	-81,855542
ΔG	-267,724280	-275,616761	-543,434120	-58,408003
ΔS	89,175000	117,921000	154,758000	-32,842618
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-275,495031	-543,267319	-82,021832
ΔG	-267,779687	-275,693460	-543,536833	-39,963602
ΔS	108,603000	156,035000	211,933000	-33,072915

Tabela 03. Energias dos álcoois gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₀.

Álcoois				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₈CH₃	•OH	CH₃(CH)₈H₂COH	Total
ΔH	-393,406101	-75,727274	-469,273314	-87,813122
ΔG	-393,463965	-75,747502	-469,332456	-75,921807
ΔS	121,846000	42,597000	124,476000	-25,079692
Temperatura=448 K				
ΔH	-393,391029	-75,725611	-469,257420	-88,340858
ΔG	-393,496148	-75,758047	-469,365397	-69,780367
ΔS	147,240000	45,432000	151,242000	-25,997739
Temperatura=798 K				
ΔH	-393,337797	-75,721710	-469,200844	-88,690381
ΔG	-393,593737	-75,784617	-469,466169	-55,104791
ΔS	201,259000	49,467000	208,639000	-26,410013
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₈COOH	•OH	HOCH₂(CH)₈H₂COOH	Total
ΔH	-542,680977	-75,727274	-618,549391	-88,566761
ΔG	-542,744484	-75,747502	-618,613276	-76,110688
ΔS	133,730000	42,597000	134,457000	-26,273844
Temperatura=448 K				
ΔH	-542,664809	-75,725611	-618,532375	-89,078182
ΔG	-542,779741	-75,758047	-618,648840	-69,686241
ΔS	160,985000	45,432000	163,131000	-27,162398
Temperatura=798 K				
ΔH	-542,609125	-75,721710	-618,473311	-89,405115
ΔG	-542,885806	-75,784617	-618,757063	-54,367466
ΔS	217,568000	49,467000	223,129000	-27,551454

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₀.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₈COOH	Total
ΔH	-189,082000	-503,393316	-692,615764	-88,132524
ΔG	-189,110000	-503,452778	-692,681522	-74,513047
ΔS	60,177000	125,212000	138,400000	-29,486067
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-503,378598	-692,598593	-88,475772
ΔG	-189,125000	-503,485707	-692,718065	-67,368219
ΔS	64,854000	150,026000	167,343000	-29,829943
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-503,328162	-692,539794	-88,247986
ΔG	-189,164000	-503,584139	-692,828617	-50,500750
ΔS	72,883000	201,289000	227,117000	-29,527483
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₆COOH	HOOC(CH₂)₈COOH	Total
ΔH	-228,387003	-464,106170	-692,615764	-76,927078
ΔG	-228,419000	-464,162106	-692,681522	-63,012044
ΔS	67,378000	117,786000	138,400000	-29,344878
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-464,092886	-692,598593	-77,289779
ΔG	-228,436031	-464,192970	-692,718065	-55,888551
ΔS	74,927000	140,187000	167,343000	-29,976780
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-464,047656	-692,539794	-77,335587
ΔG	-228,481915	-464,284409	-692,828617	-39,089480
ΔS	88,873000	186,172000	227,117000	-30,075299
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₅COOH	HOOC(CH₂)₈COOH	Total
ΔH	-267,666670	-424,818509	-692,615764	-81,943393
ΔG	-267,704159	-424,870823	-692,681522	-66,854915
ΔS	78,942000	110,159000	138,400000	-31,815385
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-424,806667	-692,598593	-82,398966
ΔG	-267,724280	-424,899574	-692,718065	-59,118345
ΔS	89,175000	130,133000	167,343000	-32,608557
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-424,766668	-692,539794	-82,547685
ΔG	-267,779687	-424,983892	-692,828617	-40,811995
ΔS	108,603000	170,814000	227,117000	-32,818773

Anexo XII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₁**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₁.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₉CH₃	Total
ΔH	-39,813521	-393,406101	-433,351128	-82,521330
ΔG	-39,836258	-393,463965	-433,410512	-69,207450
ΔS	47,878000	121,846000	124,984000	-28,074797
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-393,391029	-433,334764	-83,194021
ΔG	-39,848207	-393,496148	-433,443661	-62,315508
ΔS	51,895000	147,240000	152,531000	-29,244476
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-393,337797	-433,275714	-83,614452
ΔG	-39,879122	-393,593737	-433,545821	-45,784385
ΔS	58,547000	201,259000	212,400000	-29,747739
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₉CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-354,118505	-433,351128	-79,507400
ΔG	-79,135088	-354,172862	-433,410512	-64,358681
ΔS	61,421000	114,461000	124,984000	-31,939004
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-354,104874	-433,334764	-80,032625
ΔG	-79,150511	-354,202989	-433,443661	-56,576929
ΔS	67,459000	137,428000	152,531000	-32,853914
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-354,056874	-433,275714	-80,256019
ΔG	-79,191503	-354,293592	-433,545821	-38,106172
ΔS	79,075000	186,144000	212,400000	-33,144451
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₆CH₃	CH₃(CH₂)₉CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-314,830933	-433,351128	-80,014428
ΔG	-118,426415	-314,881852	-433,410512	-64,159760
ΔS	71,030000	107,222000	124,984000	-33,426203
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-314,818740	-433,334764	-80,527103
ΔG	-118,444419	-314,909959	-433,443661	-56,025975
ΔS	79,452000	127,770000	152,531000	-34,319149
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-314,775965	-433,275714	-80,744849
ΔG	-118,493609	-314,993664	-433,545821	-36,739455
ΔS	96,355000	171,188000	212,400000	-34,602784

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₁.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-189,082000	-393,406101	-582,627251	-87,318017
ΔG	-189,110000	-393,463965	-582,691358	-73,665281
ΔS	60,177000	121,846000	134,924000	-29,555093
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-393,391029	-582,609764	-87,685110
ΔG	-189,125000	-393,496148	-582,727120	-66,498490
ΔS	64,854000	147,240000	164,380000	-29,941012
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-393,337797	-582,548224	-87,491837
ΔG	-189,164000	-393,593737	-582,836711	-49,556975
ΔS	72,883000	201,259000	226,853000	-29,674320
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-228,387003	-354,118505	-582,627251	-76,394950
ΔG	-228,419000	-354,172862	-582,691358	-62,434735
ΔS	67,378000	114,461000	134,924000	-29,439632
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-354,104874	-582,609764	-76,777104
ΔG	-228,436031	-354,202989	-582,727120	-55,283631
ΔS	74,927000	137,428000	164,380000	-30,104792
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-354,056874	-582,548224	-76,841110
ΔG	-228,481915	-354,293592	-582,836711	-38,406122
ΔS	88,873000	186,144000	226,853000	-30,223392
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₆CH₃	CH₃(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-267,666670	-314,830933	-582,627251	-81,355416
ΔG	-267,704159	-314,881852	-582,691358	-66,106296
ΔS	78,942000	107,222000	134,924000	-32,153612
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-314,818740	-582,609764	-81,832952
ΔG	-267,724280	-314,909959	-582,727120	-58,283756
ΔS	89,175000	127,770000	164,380000	-32,985063
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-314,775965	-582,548224	-82,003634
ΔG	-267,779687	-314,993664	-582,836711	-39,759034
ΔS	108,603000	171,188000	226,853000	-33,219124

Tabela 03. Energias dos álcoois gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₁

Álcoois				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉CH₃	•OH	CH₃(CH)₉H₂COH	Total
ΔH	-432,693676	-75,727274	-508,560908	-87,825045
ΔG	-432,754932	-75,747502	-508,623536	-75,992716
ΔS	128,990000	42,597000	131,810000	-24,960465
Temperatura=448 K				
ΔH	-432,677166	-75,725611	-508,543575	-88,352153
ΔG	-432,789112	-75,758047	-508,658518	-69,878886
ΔS	156,802000	45,432000	161,000000	-25,874747
Temperatura=798 K				
ΔH	-432,618710	-75,721710	-508,481768	-88,697283
ΔG	-432,893546	-75,784617	-508,766245	-55,272336
ΔS	216,118000	49,467000	223,699000	-26,283884
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉COOH	•OH	HOCH₂(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-581,969020	-75,727274	-657,837043	-88,321405
ΔG	-582,035580	-75,747502	-657,904372	-76,110688
ΔS	140,157000	42,597000	141,707000	-25,757403
Temperatura=448 K				
ΔH	-581,951411	-75,725611	-657,818587	-88,833453
ΔG	-582,072664	-75,758047	-657,941957	-69,807977
ΔS	169,837000	45,432000	172,803000	-26,647840
Temperatura=798 K				
ΔH	-581,890486	-75,721710	-657,754293	-89,167288
ΔG	-582,185180	-75,784617	-658,057088	-54,775975
ΔS	231,734000	49,467000	238,104000	-27,043798

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₁.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-189,082000	-542,680977	-731,903286	-88,045301
ΔG	-189,110000	-542,744484	-731,972638	-74,142817
ΔS	60,177000	133,730000	145,964000	-30,084712
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-542,664809	-731,884676	-88,395451
ΔG	-189,125000	-542,779741	-732,011276	-66,851778
ΔS	64,854000	160,985000	177,327000	-30,441765
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-542,609125	-731,820649	-88,180215
ΔG	-189,164000	-542,885806	-732,128909	-49,637924
ΔS	72,883000	217,568000	242,401000	-30,151856
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-228,387003	-503,393316	-731,903286	-77,163022
ΔG	-228,419000	-503,452778	-731,972638	-63,290659
ΔS	67,378000	125,212000	145,964000	-29,258281
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-503,378598	-731,884676	-77,522585
ΔG	-228,436031	-503,485707	-732,011276	-56,185990
ΔS	74,927000	150,026000	177,327000	-29,885791
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-503,328162	-731,820649	-77,554588
ΔG	-228,481915	-503,584139	-732,128909	-39,442141
ΔS	88,873000	201,289000	242,401000	-29,970505
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₆COOH	HOOC(CH₂)₉COOH	Total
ΔH	-267,666670	-464,106170	-731,903286	-81,856169
ΔG	-267,704159	-464,162106	-731,972638	-66,750121
ΔS	78,942000	117,786000	145,964000	-31,854918
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-464,092886	-731,884676	-82,313624
ΔG	-267,724280	-464,192970	-732,011276	-59,002255
ΔS	89,175000	140,187000	177,327000	-32,652483
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-464,047656	-731,820649	-82,464227
ΔG	-267,779687	-464,284409	-732,128909	-40,670806
ΔS	108,603000	186,172000	242,401000	-32,865209

Anexo XIII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₂**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₂.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₀CH₃	Total
ΔH	-39,813521	-432,693676	-472,638726	-82,535763
ΔG	-39,836258	-432,754932	-472,701567	-69,262671
ΔS	47,878000	128,990000	132,260000	-27,991966
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-432,677166	-472,620924	-83,208454
ΔG	-39,848207	-432,789112	-472,736744	-62,390182
ΔS	51,895000	156,802000	162,228000	-29,159762
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-432,618710	-472,556643	-83,624493
ΔG	-39,879122	-432,893546	-472,845825	-45,906749
ΔS	58,547000	216,118000	227,399000	-29,659888
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₀CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-393,406101	-472,638726	-79,508655
ΔG	-79,135088	-393,463965	-472,701567	-64,328560
ΔS	61,421000	121,846000	132,260000	-32,007403
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-393,391029	-472,620924	-80,035763
ΔG	-79,150511	-393,496148	-472,736744	-56,529238
ΔS	67,459000	147,240000	162,228000	-32,926077
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-393,337797	-472,556643	-80,259784
ΔG	-79,191503	-393,593737	-472,845825	-38,017693
ΔS	79,075000	201,259000	227,399000	-33,217242
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₀CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-354,118505	-472,638726	-80,030743
ΔG	-118,426415	-354,172862	-472,701567	-64,187998
ΔS	71,030000	114,461000	132,260000	-33,402985
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-354,104874	-472,620924	-80,543419
ΔG	-118,444419	-354,202989	-472,736744	-56,059233
ΔS	79,452000	137,428000	162,228000	-34,294677
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-354,056874	-472,556643	-80,757399
ΔG	-118,493609	-354,293592	-472,845825	-36,787146
ΔS	96,355000	186,144000	227,399000	-34,575801

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₂.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₉ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	Total
ΔH	-39,813521	-581,969020	-621,914847	-83,023338
ΔG	-39,836258	-582,035580	-621,982429	-69,396958
ΔS	47,878000	140,157000	142,237000	-28,738703
Temperatura=448 K				
ΔH	-39,811157	-581,951411	-621,895921	-83,680341
ΔG	-39,848207	-582,072664	-622,020228	-62,347511
ΔS	51,895000	169,837000	174,116000	-29,879516
Temperatura=798 K				
ΔH	-39,804669	-581,890486	-621,829150	-84,083202
ΔG	-39,879122	-582,185180	-622,136761	-45,468747
ΔS	58,547000	231,734000	241,891000	-30,365209
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₈ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	Total
ΔH	-79,105920	-542,680977	-621,914847	-80,289905
ΔG	-79,135088	-542,744484	-621,982429	-64,543796
ΔS	61,421000	133,730000	142,237000	-33,204064
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-542,664809	-621,895921	-80,799443
ΔG	-79,150511	-542,779741	-622,020228	-56,460840
ΔS	67,459000	160,985000	174,116000	-34,091363
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-542,609125	-621,829150	-80,999618
ΔG	-79,191503	-542,885806	-622,136761	-37,306725
ΔS	79,075000	217,568000	241,891000	-34,357428
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH ₂ CH ₂ CH ₃	•CH ₂ (CH ₂) ₇ COOH	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH	Total
ΔH	-118,392684	-503,393316	-621,914847	-80,852781
ΔG	-118,426415	-503,452778	-621,982429	-64,781622
ΔS	71,030000	125,212000	142,237000	-33,888678
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-503,378598	-621,895921	-81,342239
ΔG	-118,444419	-503,485707	-622,020228	-56,539906
ΔS	79,452000	150,026000	174,116000	-34,740209
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-503,328162	-621,829150	-81,522334
ΔG	-118,493609	-503,584139	-622,136761	-37,031248
ΔS	96,355000	201,289000	241,891000	-34,985565

Tabela 03. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₂.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₀COOH	Total
ΔH	-189,082000	-581,969020	-771,190955	-87,810612
ΔG	-189,110000	-582,035580	-771,263611	-74,065633
ΔS	60,177000	140,157000	152,918000	-29,754014
Temperatura=448 K				
ΔH	-189,079000	-581,951411	-771,170908	-88,163272
ΔG	-189,125000	-582,072664	-771,304199	-66,851778
ΔS	64,854000	169,837000	186,699000	-30,115460
Temperatura=798 K				
ΔH	-189,071000	-581,890486	-771,101652	-87,955567
ΔG	-189,164000	-582,185180	-771,428571	-49,818646
ΔS	72,883000	231,734000	257,074000	-29,833708
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₀COOH	Total
ΔH	-228,387003	-542,680977	-771,190955	-77,168042
ΔG	-228,419000	-542,744484	-771,263611	-62,830694
ΔS	67,378000	133,730000	152,918000	-30,239707
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-542,664809	-771,170908	-77,535763
ΔG	-228,436031	-542,779741	-771,304199	-55,488827
ΔS	74,927000	160,985000	186,699000	-30,881650
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-542,609125	-771,101652	-77,579689
ΔG	-228,481915	-542,885806	-771,428571	-38,183984
ΔS	88,873000	217,568000	257,074000	-30,978286
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₀COOH	Total
ΔH	-267,666670	-503,393316	-771,190955	-82,184357
ΔG	-267,704159	-503,452778	-771,263611	-66,939002
ΔS	78,942000	125,212000	152,918000	-32,151102
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-503,378598	-771,170908	-82,639929
ΔG	-267,724280	-503,485707	-771,304199	-59,118972
ΔS	89,175000	150,026000	186,699000	-32,945530
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-503,328162	-771,101652	-82,776099
ΔG	-267,779687	-503,584139	-771,428571	-40,628135
ΔS	108,603000	201,289000	257,074000	-33,143823

Anexo XIV: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₃**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₃.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₁CH₃	Total
ΔH	-79,105920	-432,693676	-511,926301	-79,508655
ΔG	-79,135088	-432,754932	-511,992522	-64,321030
ΔS	61,421000	128,990000	139,374000	-32,026228
Temperatura=448 K				
ΔH	-79,102350	-432,677166	-511,907062	-80,036390
ΔG	-79,150511	-432,789112	-512,029686	-56,515433
ΔS	67,459000	156,802000	171,758000	-32,946158
Temperatura=798 K				
ΔH	-79,090944	-432,618710	-511,837556	-80,259784
ΔG	-79,191503	-432,893546	-512,145594	-37,992593
ΔS	79,075000	216,118000	242,227000	-33,236695
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₁CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-393,406101	-511,926301	-80,017565
ΔG	-118,426415	-393,463965	-511,992522	-64,095126
ΔS	71,030000	121,846000	139,374000	-33,573040
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-393,391029	-511,907062	-80,532751
ΔG	-118,444419	-393,496148	-512,029686	-55,923064
ΔS	79,452000	147,240000	171,758000	-34,471634
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-393,337797	-511,837556	-80,751124
ΔG	-118,493609	-393,593737	-512,145594	-36,551202
ΔS	96,355000	201,259000	242,227000	-34,755896
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₁CH₃	Total
ΔH	-157,680598	-354,118505	-511,926301	-79,818017
ΔG	-157,717406	-354,172862	-511,992522	-64,165408
ΔS	77,509000	114,461000	139,374000	-33,004516
Temperatura=448 K				
ΔH	-157,674163	-354,104874	-511,907062	-80,336968
ΔG	-157,737249	-354,202989	-512,029686	-56,129514
ΔS	88,364000	137,428000	171,758000	-33,906875
Temperatura=798 K				
ΔH	-157,652297	-354,056874	-511,837556	-80,562871
ΔG	-157,792928	-354,293592	-512,145594	-37,069526
ΔS	11,058500	186,144000	242,227000	28,253324

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₃.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₁COOH	Total
ΔH	-228,387003	-432,693676	-661,202414	-76,389930
ΔG	-228,419000	-432,754932	-661,273383	-62,406497
ΔS	67,378000	128,990000	149,367000	-29,493598
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-432,677166	-661,182051	-76,773966
ΔG	-228,436031	-432,789112	-661,313174	-55,240333
ΔS	74,927000	156,802000	183,662000	-30,162523
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-432,618710	-661,110055	-76,837972
ΔG	-228,481915	-432,893546	-661,436543	-38,329566
ΔS	88,873000	216,118000	256,735000	-30,281123
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₁COOH	Total
ΔH	-267,666670	-393,406101	-661,202414	-81,352279
ΔG	-267,704159	-393,463965	-661,273383	-66,051075
ΔS	78,942000	121,846000	149,367000	-32,267192
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-393,391029	-661,182051	-81,831697
ΔG	-267,724280	-393,496148	-661,313174	-58,199042
ΔS	89,175000	147,240000	183,662000	-33,103035
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-393,337797	-661,110055	-82,003007
ΔG	-267,779687	-393,593737	-661,436543	-39,607804
ΔS	108,603000	201,259000	256,735000	-33,337724
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₁COOH	Total
ΔH	-306,955103	-354,118505	-661,202414	-80,827053
ΔG	-306,996752	-354,172862	-661,273383	-65,116085
ΔS	87,702000	114,461000	149,367000	-33,130018
Temperatura=448 K				
ΔH	-306,947582	-354,104874	-661,182051	-81,322158
ΔG	-307,019263	-354,202989	-661,313174	-57,054464
ΔS	100,403000	137,428000	183,662000	-33,991589
Temperatura=798 K				
ΔH	-306,923271	-354,056874	-661,110055	-81,519824
ΔG	-307,082461	-354,293592	-661,436543	-37,958080
ΔS	125,179000	186,144000	256,735000	-34,254516

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₃.

Cetonas				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COCH ₃	Total
ΔH	-546,023699	-39,813521	-585,960570	-77,403358
ΔG	-546,087592	-39,836258	-586,030377	-66,846758
ΔS	134,544000	47,878000	146,922000	-22,276605
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-39,811157	-585,940926	-77,486817
ΔG	-546,123281	-39,848207	-586,069440	-61,465860
ΔS	163,874000	51,895000	180,008000	-22,440385
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-39,804669	-585,871365	-76,699292
ΔG	-546,232629	-39,879122	-586,190045	-49,130268
ΔS	226,596000	58,547000	250,595000	-21,679215

Tabela 04. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₃.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOCH ₃	Total
ΔH	-621,250713	-39,813521	-661,189184	-78,407374
ΔG	-621,320754	-39,836258	-661,260786	-65,119223
ΔS	147,488000	47,878000	150,698000	-28,029617
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,232071	-39,811157	-661,168821	-78,810863
ΔG	-621,359792	-39,848207	-661,300899	-58,295679
ΔS	178,897000	51,895000	185,001000	-28,734310
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,166577	-39,804669	-661,096981	-78,899970
ΔG	-621,478632	-39,879122	-661,424966	-42,176202
ΔS	245,385000	58,547000	257,911000	-28,878638

Tabela 05. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₃.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₁COOH	Total
ΔH	-228,387003	-581,969020	-810,478487	-76,847385
ΔG	-228,419000	-582,035580	-810,554658	-62,799946
ΔS	67,378000	140,157000	160,315000	-29,631022
Temperatura=448 K				
ΔH	-228,382538	-581,951411	-810,457004	-77,218243
ΔG	-228,436031	-582,072664	-810,597301	-55,601151
ΔS	74,927000	169,837000	196,514000	-30,277358
Temperatura=798 K				
ΔH	-228,368896	-581,890486	-810,382522	-77,271581
ΔG	-228,481915	-582,185180	-810,728660	-38,632653
ΔS	88,873000	231,734000	272,186000	-30,384662
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₁COOH	Total
ΔH	-267,666670	-542,680977	-810,478487	-82,103408
ΔG	-267,704159	-542,744484	-810,554658	-66,525473
ΔS	78,942000	133,730000	160,315000	-32,854541
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-542,664809	-810,457004	-82,567766
ΔG	-267,724280	-542,779741	-810,597301	-58,534133
ΔS	89,175000	160,985000	196,514000	-33,663401
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-542,609125	-810,382522	-82,717741
ΔG	-267,779687	-542,885806	-810,728660	-39,637924
ΔS	108,603000	217,568000	272,186000	-33,876127
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₁COOH	Total
ΔH	-306,955103	-503,393316	-810,478487	-81,618971
ΔG	-306,996752	-503,452778	-810,554658	-65,968871
ΔS	87,702000	125,212000	160,315000	-33,006398
Temperatura=448 K				
ΔH	-306,947582	-503,378598	-810,457004	-82,093368
ΔG	-307,019263	-503,485707	-810,597301	-57,938626
ΔS	100,403000	150,026000	196,514000	-33,832202
Temperatura=798 K				
ΔH	-306,923271	-503,328162	-810,382522	-82,259658
ΔG	-307,082461	-503,584139	-810,728660	-38,943271
ΔS	125,179000	201,289000	272,186000	-34,062498

Anexo XV :Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₄**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₄.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₂CH₃	Total
ΔH	-118,392684	-432,693676	-551,213891	-80,026978
ΔG	-118,426415	-432,754932	-551,283542	-64,128384
ΔS	71,030000	128,990000	146,593000	-33,525977
Temperatura=448 K				
ΔH	-118,387696	-432,677166	-551,193214	-80,542164
ΔG	-118,444419	-432,789112	-551,322720	-55,966989
ΔS	79,452000	156,802000	181,398000	-34,422689
Temperatura=798 K				
ΔH	-118,371074	-432,618710	-551,118478	-80,756772
ΔG	-118,493609	-432,893546	-551,445517	-36,622739
ΔS	96,355000	216,118000	257,168000	-34,704441
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₂CH₃	Total
ΔH	-157,680598	-393,406101	-551,213891	-79,814252
ΔG	-157,717406	-393,463965	-551,283542	-64,113324
ΔS	77,509000	121,846000	146,593000	-33,108683
Temperatura=448 K				
ΔH	-157,674163	-393,391029	-551,193214	-80,335085
ΔG	-157,737249	-393,496148	-551,322720	-56,051076
ΔS	88,364000	147,240000	181,398000	-34,014807
Temperatura=798 K				
ΔH	-157,652297	-393,337797	-551,118478	-80,562244
ΔG	-157,792928	-393,593737	-551,445517	-36,930219
ΔS	11,058500	201,259000	257,168000	28,144137
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₂CH₃	Total
ΔH	-196,968154	-354,118505	-551,213891	-79,839352
ΔG	-197,008460	-354,172862	-551,283542	-64,144072
ΔS	84,872000	114,461000	146,593000	-33,094877
Temperatura=448 K				
ΔH	-196,960285	-354,104874	-551,193214	-80,355793
ΔG	-197,030352	-354,202989	-551,322720	-56,086216
ΔS	98,143000	137,428000	181,398000	-33,994099
Temperatura=798 K				
ΔH	-196,933203	-354,056874	-551,118478	-80,572912
ΔG	-197,092993	-354,293592	-551,445517	-36,980419
ΔS	125,651000	186,144000	257,168000	-34,278989

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₄.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₂COOH	Total
ΔH	-267,666670	-432,693676	-700,490001	-81,359809
ΔG	-267,704159	-432,754932	-700,564465	-66,123239
ΔS	78,942000	128,990000	156,722000	-32,134787
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-432,677166	-700,468197	-81,837344
ΔG	-267,724280	-432,789112	-700,606302	-58,301954
ΔS	89,175000	156,802000	193,443000	-32,965610
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-432,618710	-700,390968	-82,003007
ΔG	-267,779687	-432,893546	-700,736641	-39,789154
ΔS	108,603000	216,118000	271,821000	-33,195279
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₂COOH	Total
ΔH	-306,955103	-393,406101	-700,490001	-80,821405
ΔG	-306,996752	-393,463965	-700,564465	-65,102907
ΔS	87,702000	121,846000	156,722000	-33,148843
Temperatura=448 K				
ΔH	-306,947582	-393,391029	-700,468197	-81,316511
ΔG	-307,019263	-393,496148	-700,606302	-57,035011
ΔS	100,403000	147,240000	193,443000	-34,011042
Temperatura=798 K				
ΔH	-306,923271	-393,337797	-700,390968	-81,513549
ΔG	-307,082461	-393,593737	-700,736641	-37,928587
ΔS	125,179000	201,259000	271,821000	-34,272714
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₂COOH	Total
ΔH	-346,243075	-354,118505	-700,490001	-80,585462
ΔG	-346,288522	-354,172862	-700,564465	-64,684358
ΔS	95,699000	114,461000	156,722000	-33,532879
Temperatura=448 K				
ΔH	-346,234112	-354,104874	-700,468197	-81,081195
ΔG	-346,313235	-354,202989	-700,606302	-56,524846
ΔS	110,827000	137,428000	193,443000	-34,395078
Temperatura=798 K				
ΔH	-346,204569	-354,056874	-700,390968	-81,278233
ΔG	-346,383761	-354,293592	-700,736641	-37,203813
ΔS	140,908000	186,144000	271,821000	-34,658005

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₄.

Cetonas				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ COCH ₃	Total
ΔH	-546,023699	-79,105920	-625,248138	-74,371858
ΔG	-546,087592	-79,135088	-625,321329	-61,903234
ΔS	134,544000	61,421000	154,044000	-26,305847
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-79,102350	-625,227058	-74,310989
ΔG	-546,123281	-79,150511	-625,362381	-55,590483
ΔS	163,874000	67,459000	189,546000	-26,221760
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-79,090944	-625,152272	-73,330819
ΔG	-546,232629	-79,191503	-625,489818	-41,218622
ΔS	226,596000	79,075000	265,431000	-25,251002

Tabela 04. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₄.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOCH ₂ CH ₃	Total
ΔH	-621,250713	-79,105920	-700,482060	-78,706697
ΔG	-621,320754	-79,135088	-700,557342	-63,692265
ΔS	147,488000	61,421000	158,444000	-31,667292
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,232071	-79,102350	-700,460221	-78,940758
ΔG	-621,359792	-79,150511	-700,599602	-56,036015
ΔS	178,897000	67,459000	195,230000	-32,082076
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,166577	-79,090944	-700,383064	-78,779488
ΔG	-621,478632	-79,191503	-700,730916	-38,140685
ΔS	245,385000	79,075000	273,534000	-31,956574

Tabela 05. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₄.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂CH₂COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₂COOH	Total
ΔH	-267,666670	-581,969020	-849,766122	-81,847384
ΔG	-267,704159	-582,035580	-849,845702	-66,492842
ΔS	78,942000	140,157000	167,489000	-32,385791
Temperatura=448 K				
ΔH	-267,660615	-581,951411	-849,743196	-82,310487
ΔG	-267,724280	-582,072664	-849,890349	-58,612572
ΔS	89,175000	169,837000	206,116000	-33,192769
Temperatura=798 K				
ΔH	-267,641578	-581,890486	-849,663481	-82,465482
ΔG	-267,779687	-582,185180	-850,028578	-39,979290
ΔS	108,603000	231,734000	287,095000	-33,409887
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₂COOH	Total
ΔH	-306,955103	-542,680977	-849,766122	-81,602655
ΔG	-306,996752	-542,744484	-849,845702	-65,553460
ΔS	87,702000	133,730000	167,489000	-33,849772
Temperatura=448 K				
ΔH	-306,947582	-542,664809	-849,743196	-82,081446
ΔG	-307,019263	-542,779741	-849,890349	-57,319901
ΔS	100,403000	160,985000	206,116000	-34,683733
Temperatura=798 K				
ΔH	-306,923271	-542,609125	-849,663481	-82,257148
ΔG	-307,082461	-542,885806	-850,028578	-37,845756
ΔS	125,179000	217,568000	287,095000	-34,922187
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₂COOH	Total
ΔH	-346,243075	-503,393316	-849,766122	-81,407500
ΔG	-346,288522	-503,452778	-849,845702	-65,513299
ΔS	95,699000	125,212000	167,489000	-33,522839
Temperatura=448 K				
ΔH	-346,234112	-503,378598	-849,743196	-81,881270
ΔG	-346,313235	-503,485707	-849,890349	-57,358807
ΔS	110,827000	150,026000	206,116000	-34,348015
Temperatura=798 K				
ΔH	-346,204569	-503,328162	-849,663481	-82,046933
ΔG	-346,383761	-503,584139	-850,028578	-38,076052
ΔS	140,908000	201,289000	287,095000	-34,577056

Anexo XVI: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₅**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₃CH₃	Total
ΔH	-157,680598	-432,693676	-590,501458	-79,809232
ΔG	-157,717406	-432,754932	-590,574527	-64,124619
ΔS	77,509000	128,990000	153,787000	-33,077307
Temperatura=448 K				
ΔH	-157,674163	-432,677166	-590,479341	-80,328810
ΔG	-157,737249	-432,789112	-590,615713	-56,069274
ΔS	88,364000	156,802000	191,015000	-33,980294
Temperatura=798 K				
ΔH	-157,652297	-432,618710	-590,399376	-80,552831
ΔG	-157,792928	-432,893546	-590,745386	-36,967869
ΔS	11,058500	216,118000	272,086000	28,181160
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₃CH₃	Total
ΔH	-196,968154	-393,406101	-590,501458	-79,821155
ΔG	-197,008460	-393,463965	-590,574527	-64,070026
ΔS	84,872000	121,846000	153,787000	-33,214732
Temperatura=448 K				
ΔH	-196,960285	-393,391029	-590,479341	-80,338223
ΔG	-197,030352	-393,496148	-590,615713	-55,982050
ΔS	98,143000	147,240000	191,015000	-34,116464
Temperatura=798 K				
ΔH	-196,933203	-393,337797	-590,399376	-80,557224
ΔG	-197,092993	-393,593737	-590,745386	-36,807227
ΔS	125,651000	201,259000	272,086000	-34,402608
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₃CH₃	Total
ΔH	-236,255758	-354,118505	-590,501458	-79,816134
ΔG	-236,299708	-354,172862	-590,574527	-63,979037
ΔS	92,546000	114,461000	153,787000	-33,396082
Temperatura=448 K				
ΔH	-236,246445	-354,104874	-590,479341	-80,335085
ΔG	-236,323726	-354,202989	-590,615713	-55,847135
ΔS	108,247000	137,428000	191,015000	-34,299697
Temperatura=798 K				
ΔH	-236,214127	-354,056874	-590,399376	-80,556596
ΔG	-236,393517	-354,293592	-590,745386	-36,569400
ΔS	141,064000	186,144000	272,086000	-34,589606

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₃COOH	Total
ΔH	-306,955103	-432,693676	-739,777572	-80,818895
ΔG	-306,996752	-432,754932	-739,855419	-65,094750
ΔS	87,702000	128,990000	163,842000	-33,163904
Temperatura=448 K				
ΔH	-306,947582	-432,677166	-739,754331	-81,314628
ΔG	-307,019263	-432,789112	-739,899245	-57,021834
ΔS	100,403000	156,802000	202,981000	-34,026102
Temperatura=798 K				
ΔH	-306,923271	-432,618710	-739,671876	-81,510411
ΔG	-307,082461	-432,893546	-740,036415	-37,906624
ΔS	125,179000	216,118000	286,657000	-34,287146
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₃COOH	Total
ΔH	-346,243075	-393,406101	-739,777572	-80,569774
ΔG	-346,288522	-393,463965	-739,855419	-64,590859
ΔS	95,699000	121,846000	163,842000	-33,699170
Temperatura=448 K				
ΔH	-346,234112	-393,391029	-739,754331	-81,068017
ΔG	-346,313235	-393,496148	-739,899245	-56,389304
ΔS	110,827000	147,240000	202,981000	-34,567016
Temperatura=798 K				
ΔH	-346,204569	-393,337797	-739,671876	-81,268820
ΔG	-346,383761	-393,593737	-740,036415	-36,971007
ΔS	140,908000	201,259000	286,657000	-34,833080
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₃COOH	Total
ΔH	-385,530842	-354,118505	-739,777572	-80,462470
ΔG	-385,579821	-354,172862	-739,855419	-64,467867
ΔS	103,136000	114,461000	163,842000	-33,731800
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,520439	-354,104874	-739,754331	-80,960085
ΔG	-385,606602	-354,202989	-739,899245	-56,258782
ΔS	120,688000	137,428000	202,981000	-34,597764
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,485664	-354,056874	-739,671876	-81,160888
ΔG	-385,684141	-354,293592	-740,036415	-36,823542
ΔS	156,073000	186,144000	286,657000	-34,864456

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅.

Cetonas				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₁₀CO]•	•CH₂CH₂CH₃	CH₃(CH₂)₁₀COCH₂CH₂CH₃	Total
ΔH	-546,023699	-118,392684	-664,533540	-73,517189
ΔG	-546,087592	-118,426415	-664,610087	-60,291161
ΔS	134,544000	71,030000	161,108000	-27,902860
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-118,387696	-664,511043	-73,456948
ΔG	-546,123281	-118,444419	-664,653111	-53,596257
ΔS	163,874000	79,452000	198,992000	-27,820028
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-118,371074	-664,431060	-72,488700
ΔG	-546,232629	-118,493609	-664,787317	-38,327683
ΔS	226,596000	96,355000	280,144000	-26,861821

Tabela 04. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₁₀COO]•	•CH₂CH₂CH₃	CH₃(CH₂)₁₀COOCH₂CH₂CH₃	Total
ΔH	-621,250713	-118,392684	-739,769368	-79,048062
ΔG	-621,320754	-118,426415	-739,847900	-63,209710
ΔS	147,488000	71,030000	165,286000	-33,403612
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,232071	-118,387696	-739,746093	-79,270828
ΔG	-621,359792	-118,444419	-739,892083	-55,140559
ΔS	178,897000	79,452000	204,487000	-33,798944
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,166577	-118,371074	-739,663717	-79,107676
ΔG	-621,478632	-118,493609	-740,030071	-36,288903
ΔS	245,385000	96,355000	288,083000	-33,670304

Tabela 05. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₅.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₂COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₃COOH	Total
ΔH	-306,95510	-581,96902	-889,05367	-81,29141
ΔG	-306,99675	-582,03558	-889,13673	-65,51267
ΔS	87,70200	140,15700	174,82400	-33,27999
Temperatura=448 K				
ΔH	-306,94758	-581,95141	-889,02931	-81,77208
ΔG	-307,01926	-582,07266	-889,18342	-57,41340
ΔS	100,40300	169,83700	215,86900	-34,11835
Temperatura=798 K				
ΔH	-306,92327	-581,89049	-888,94436	-81,95720
ΔG	-307,08246	-582,18518	-889,32860	-38,25301
ΔS	125,17900	231,73400	302,14600	-34,36684
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₃COOH	Total
ΔH	-346,24308	-542,68098	-889,05367	-81,33596
ΔG	-346,28852	-542,74448	-889,13673	-65,08973
ΔS	95,69900	133,73000	174,82400	-34,26518
Temperatura=448 K				
ΔH	-346,23411	-542,66481	-889,02931	-81,81726
ΔG	-346,31324	-542,77974	-889,18342	-56,75514
ΔS	110,82700	160,98500	215,86900	-35,10479
Temperatura=798 K				
ΔH	-346,20457	-542,60913	-888,94436	-81,99673
ΔG	-346,38376	-542,88581	-889,32860	-37,04443
ΔS	140,90800	217,56800	302,14600	-35,34764
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₃COOH	Total
ΔH	-385,53084	-503,39332	-889,05367	-81,26945
ΔG	-385,57982	-503,45278	-889,13673	-65,34513
ΔS	103,13600	125,21200	174,82400	-33,58685
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,52044	-503,37860	-889,02931	-81,74447
ΔG	-385,60660	-503,48571	-889,18342	-57,17369
ΔS	120,68800	150,02600	215,86900	-34,41579
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,48566	-503,32816	-888,94436	-81,91390
ΔG	-385,68414	-503,58414	-889,32860	-37,85203
ΔS	156,07300	201,28900	302,14600	-34,64859

Anexo XVII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₆**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₆.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₄CH₃	Total
ΔH	-196,968154	-432,693676	-629,789028	-79,818017
ΔG	-197,008460	-432,754932	-629,865613	-64,144700
ΔS	84,872000	128,990000	161,187000	-33,054089
Temperatura=448 K				
ΔH	-196,960285	-432,677166	-629,765469	-80,332575
ΔG	-197,030352	-432,789112	-629,908855	-56,093746
ΔS	98,143000	156,802000	200,840000	-33,951429
Temperatura=798 K				
ΔH	-196,933203	-432,618710	-629,680272	-80,546556
ΔG	-197,092993	-432,893546	-630,045523	-37,013050
ΔS	125,651000	216,118000	287,216000	-34,232553
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₄CH₃	Total
ΔH	-236,255758	-393,406101	-629,789028	-79,799819
ΔG	-236,299708	-393,463965	-629,865613	-63,968369
ΔS	92,546000	121,846000	161,187000	-33,386670
Temperatura=448 K				
ΔH	-236,246445	-393,391029	-629,765469	-80,318142
ΔG	-236,323726	-393,496148	-629,908855	-55,836467
ΔS	108,247000	147,240000	200,840000	-34,291539
Temperatura=798 K				
ΔH	-236,214127	-393,337797	-629,680272	-80,539653
ΔG	-236,393517	-393,593737	-630,045523	-36,564380
ΔS	141,064000	201,259000	287,216000	-34,580194
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₄CH₃	Total
ΔH	-275,543325	-354,118505	-629,789028	-79,818017
ΔG	-275,590719	-354,172862	-629,865613	-64,026100
ΔS	99,800000	114,461000	161,187000	-33,304466
Temperatura=448 K				
ΔH	-275,532573	-354,104874	-629,765469	-80,335085
ΔG	-275,616761	-354,202989	-629,908855	-55,914279
ΔS	117,921000	137,428000	200,840000	-34,204943
Temperatura=798 K				
ΔH	-275,495031	-354,056874	-629,680272	-80,551576
ΔG	-275,693460	-354,293592	-630,045523	-36,691137
ΔS	156,035000	186,144000	287,216000	-34,489832

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₆.

Ácido Carboxílico				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₄COOH	Total
ΔH	-346,243075	-432,693676	-779,065161	-80,578559
ΔG	-346,288522	-432,754932	-779,146438	-64,623490
ΔS	95,699000	128,990000	171,061000	-33,652106
Temperatura=448 K				
ΔH	-346,234112	-432,677166	-779,040481	-81,076175
ΔG	-346,313235	-432,789112	-779,192278	-56,432602
ΔS	110,827000	156,802000	212,620000	-34,518698
Temperatura=798 K				
ΔH	-346,204569	-432,618710	-778,952797	-81,273840
ΔG	-346,383761	-432,893546	-779,336336	-37,041288
ΔS	140,908000	216,118000	301,597000	-34,782252
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₄COOH	Total
ΔH	-385,530842	-393,406101	-779,065161	-80,458077
ΔG	-385,579821	-393,463965	-779,146438	-64,415157
ΔS	103,136000	121,846000	171,061000	-33,835967
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,520439	-393,391029	-779,040481	-80,956948
ΔG	-385,606602	-393,496148	-779,192278	-56,179715
ΔS	120,688000	147,240000	212,620000	-34,706323
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,485664	-393,337797	-778,952797	-81,159633
ΔG	-385,684141	-393,593737	-779,336336	-36,682980
ΔS	156,073000	201,259000	301,597000	-34,974270
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₄COOH	Total
ΔH	-424,818509	-354,118505	-779,065161	-80,413524
ΔG	-424,870823	-354,172862	-779,146438	-64,478535
ΔS	110,159000	114,461000	171,061000	-33,608808
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-354,104874	-779,040481	-80,911139
ΔG	-424,899574	-354,202989	-779,192278	-56,297060
ΔS	130,133000	137,428000	212,620000	-34,476027
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-354,056874	-778,952797	-81,108805
ΔG	-424,983892	-354,293592	-779,336336	-36,930219
ΔS	170,814000	186,144000	301,597000	-34,739581

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₆.

Cetona				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₃ CH ₃	Total
ΔH	-546,023699	-157,680598	-703,821263	-73,397335
ΔG	-546,087592	-157,717406	-703,902512	-61,191010
ΔS	134,544000	77,509000	171,003000	-25,759286
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-157,674163	-703,797318	-73,336466
ΔG	-546,123281	-157,737249	-703,948190	-55,007527
ΔS	163,874000	88,364000	211,325000	-25,673317
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-157,652297	-703,712089	-72,366963
ΔG	-546,232629	-157,792928	-704,090794	-40,936870
ΔS	226,596000	11,058500	297,796000	37,739393

Tabela 04. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₆.

Éster				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₃ CH ₃	Total
ΔH	-621,250713	-157,680598	-779,056832	-78,765683
ΔG	-621,320754	-157,717406	-779,139265	-63,444399
ΔS	147,488000	77,509000	173,495000	-32,318020
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,232071	-157,674163	-779,032107	-78,986566
ΔG	-621,359792	-157,737249	-779,185701	-55,635037
ΔS	178,897000	88,364000	215,137000	-32,708331
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,166577	-157,652297	-778,944488	-78,824041
ΔG	-621,478632	-157,792928	-779,331147	-37,391438
ΔS	245,385000	11,058500	304,050000	29,873555

Tabela 05. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₆.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₃COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOCC(CH₂)₁₄COOH	Total
ΔH	-346,243075	-581,969020	-928,341287	-81,069272
ΔG	-346,288522	-582,035580	-928,427683	-64,998113
ΔS	95,699000	140,157000	181,835000	-33,898718
Temperatura=448 K				
ΔH	-346,234112	-581,951411	-928,315486	-81,553082
ΔG	-346,313235	-582,072664	-928,476335	-56,749494
ΔS	110,827000	169,837000	225,300000	-34,741464
Temperatura=798 K				
ΔH	-346,204569	-581,890486	-928,225316	-81,740080
ΔG	-346,383761	-582,185180	-928,628287	-37,240208
ΔS	140,908000	231,734000	316,878000	-34,992468
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOCC(CH₂)₁₄COOH	Total
ΔH	-385,530842	-542,680977	-928,341287	-81,242465
ΔG	-385,579821	-542,744484	-928,427683	-64,870729
ΔS	103,136000	133,730000	181,835000	-34,532503
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,520439	-542,664809	-928,315486	-81,725647
ΔG	-385,606602	-542,779741	-928,476335	-56,470880
ΔS	120,688000	160,985000	225,300000	-35,374621
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,485664	-542,609125	-928,225316	-81,906998
ΔG	-385,684141	-542,885806	-928,628287	-36,608933
ΔS	156,073000	217,568000	316,878000	-35,619350
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₄COOH	Total
ΔH	-424,818509	-503,393316	-928,341287	-81,238700
ΔG	-424,870823	-503,452778	-928,427683	-65,312496
ΔS	110,159000	125,212000	181,835000	-33,594375
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-503,378598	-928,315486	-81,714980
ΔG	-424,899574	-503,485707	-928,476335	-57,137296
ΔS	130,133000	150,026000	225,300000	-34,424571
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-503,328162	-928,225316	-81,881270
ΔG	-424,983892	-503,584139	-928,628287	-37,811243
ΔS	170,814000	201,289000	316,878000	-34,654240

Anexo XVIII :Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₇**Tabela 01.** Energias dos ácidos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₇.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₅CH₃	Total
ΔH	-236,255758	-432,693676	-669,076604	-79,800447
ΔG	-236,299708	-432,754932	-669,156541	-63,943897
ΔS	92,546000	128,990000	168,240000	-33,443773
Temperatura=448 K				
ΔH	-236,246445	-432,677166	-669,051609	-80,320025
ΔG	-236,323726	-432,789112	-669,201757	-55,797562
ΔS	108,247000	156,802000	210,311000	-34,348642
Temperatura=798 K				
ΔH	-236,214127	-432,618710	-668,961186	-80,540281
ΔG	-236,393517	-432,893546	-669,345218	-36,492844
ΔS	141,064000	216,118000	301,985000	-34,636669
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₅CH₃	Total
ΔH	-275,543325	-393,406101	-669,076604	-79,805467
ΔG	-275,590719	-393,463965	-669,156541	-63,916286
ΔS	99,800000	121,846000	168,240000	-33,512799
Temperatura=448 K				
ΔH	-275,532573	-393,391029	-669,051609	-80,325673
ΔG	-275,616761	-393,496148	-669,201757	-55,753008
ΔS	117,921000	147,240000	210,311000	-34,418924
Temperatura=798 K				
ΔH	-275,495031	-393,337797	-668,961186	-80,545929
ΔG	-275,693460	-393,593737	-669,345218	-36,408758
ΔS	156,035000	201,259000	301,985000	-34,706951
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₅CH₃	Total
ΔH	-314,830933	-354,118505	-669,076604	-79,797937
ΔG	-314,881852	-354,172862	-669,156541	-63,897461
ΔS	107,222000	114,461000	168,240000	-33,536017
Temperatura=448 K				
ΔH	-314,818740	-354,104874	-669,051609	-80,318142
ΔG	-314,909959	-354,202989	-669,201757	-55,728536
ΔS	127,770000	137,428000	210,311000	-34,442141
Temperatura=798 K				
ΔH	-314,775965	-354,056874	-668,961186	-80,539026
ΔG	-314,993664	-354,293592	-669,345218	-36,371735
ΔS	171,188000	186,144000	301,985000	-34,730796

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₇.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₅COOH	Total
ΔH	-385,530842	-432,693676	-818,352732	-80,455567
ΔG	-385,579821	-432,754932	-818,437370	-64,393194
ΔS	103,136000	128,990000	178,137000	-33,878637
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,520439	-432,677166	-818,326615	-80,955065
ΔG	-385,606602	-432,789112	-818,485189	-56,146457
ΔS	120,688000	156,802000	222,113000	-34,749621
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,485664	-432,618710	-818,233705	-81,156496
ΔG	-385,684141	-432,893546	-818,636054	-36,625876
ΔS	156,073000	216,118000	316,388000	-35,016941
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₅COOH	Total
ΔH	-424,818509	-393,406101	-818,352732	-80,397836
ΔG	-424,870823	-393,463965	-818,437370	-64,371231
ΔS	110,159000	121,846000	178,137000	-33,802709
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-393,391029	-818,326615	-80,897962
ΔG	-424,899574	-393,496148	-818,485189	-56,141437
ΔS	130,133000	147,240000	222,113000	-34,676203
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-393,337797	-818,233705	-81,099392
ΔG	-424,983892	-393,593737	-818,636054	-36,662272
ΔS	170,814000	201,259000	316,388000	-34,942894
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₅COOH	Total
ΔH	-464,106170	-354,118505	-818,352732	-80,357048
ΔG	-464,162106	-354,172862	-818,437370	-64,258279
ΔS	117,786000	114,461000	178,137000	-33,954566
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-354,104874	-818,326615	-80,857801
ΔG	-464,192970	-354,202989	-818,485189	-55,992717
ΔS	140,187000	137,428000	222,113000	-34,828060
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-354,056874	-818,233705	-81,058604
ΔG	-464,284409	-354,293592	-818,636054	-36,428838
ΔS	186,172000	186,144000	316,388000	-35,095379

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₇.

Cetona				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₁₀CO]•	•CH₂(CH₂C)₃CH₃	CH₃(CH₂)₁₀CO(CH₂)₄CH₃	Total
ΔH	-546,023699	-196,968154	-743,108761	-73,360939
ΔG	-546,087592	-197,008460	-743,192369	-60,439881
ΔS	134,544000	84,872000	175,968000	-27,264054
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-196,960285	-743,083391	-73,305718
ΔG	-546,123281	-197,030352	-743,239519	-53,894324
ΔS	163,874000	98,143000	218,688000	-27,189381
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-196,933203	-742,992962	-72,346255
ΔG	-546,232629	-197,092993	-743,387733	-38,975274
ΔS	226,596000	125,651000	310,429000	-26,241213

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₇.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₄COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₅COOH	Total
ΔH	-385,530842	-581,969020	-967,628839	-80,934357
ΔG	-385,579821	-582,035580	-967,718663	-64,797938
ΔS	103,136000	140,157000	189,052000	-34,036770
Temperatura=448 K				
ΔH	-385,520439	-581,951411	-967,601601	-81,420050
ΔG	-385,606602	-582,072664	-967,769328	-56,514806
ΔS	120,688000	169,837000	234,934000	-34,883908
Temperatura=798 K				
ΔH	-385,485664	-581,890486	-967,506205	-81,610813
ΔG	-385,684141	-582,185180	-967,928164	-36,924571
ΔS	156,073000	231,734000	331,809000	-35,139305
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₅COOH	Total
ΔH	-424,818509	-542,680977	-967,628839	-81,170301
ΔG	-424,870823	-542,744484	-967,718663	-64,856924
ΔS	110,159000	133,730000	189,052000	-34,410766
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-542,664809	-967,601601	-81,654739
ΔG	-424,899574	-542,779741	-967,769328	-56,484058
ΔS	130,133000	160,985000	234,934000	-35,256022
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-542,609125	-967,506205	-81,834834
ΔG	-424,983892	-542,885806	-967,928164	-36,688000
ΔS	170,814000	217,568000	331,809000	-35,500123
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₅COOH	Total
ΔH	-464,106170	-503,393316	-967,628839	-81,170301
ΔG	-464,162106	-503,452778	-967,718663	-65,122360
ΔS	117,786000	125,212000	189,052000	-33,851654
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-503,378598	-967,601601	-81,649719
ΔG	-464,192970	-503,485707	-967,769328	-56,884409
ΔS	140,187000	150,026000	234,934000	-34,688125
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-503,328162	-967,506205	-81,819146
ΔG	-464,284409	-503,584139	-967,928164	-37,409636
ΔS	186,172000	201,289000	331,809000	-34,922187

Anexo XIX: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₈**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₆CH₃	Total
ΔH	-275,543325	-432,693676	-708,364185	-79,809232
ΔG	-275,590719	-432,754932	-708,447539	-63,935739
ΔS	99,800000	128,990000	175,433000	-33,482051
Temperatura=448 K				
ΔH	-275,532573	-432,677166	-708,337751	-80,328810
ΔG	-275,616761	-432,789112	-708,494762	-55,778736
ΔS	117,921000	156,802000	219,923000	-34,387548
Temperatura=798 K				
ΔH	-275,495031	-432,618710	-708,242100	-80,546556
ΔG	-275,693460	-432,893546	-708,645097	-36,452683
ΔS	156,035000	216,118000	316,898000	-34,673065
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₆CH₃	Total
ΔH	-314,830933	-393,406101	-708,364185	-79,788524
ΔG	-314,881852	-393,463965	-708,447539	-63,831572
ΔS	107,222000	121,846000	175,433000	-33,656499
Temperatura=448 K				
ΔH	-314,818740	-393,391029	-708,337751	-80,309985
ΔG	-314,909959	-393,496148	-708,494762	-55,631899
ΔS	127,770000	147,240000	219,923000	-34,567643
Temperatura=798 K				
ΔH	-314,775965	-393,337797	-708,242100	-80,533378
ΔG	-314,993664	-393,593737	-708,645097	-36,204817
ΔS	171,188000	201,259000	316,898000	-34,857553
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₆CH₃	Total
ΔH	-354,118505	-354,118505	-708,364185	-79,803584
ΔG	-354,172862	-354,172862	-708,447539	-63,889931
ΔS	114,461000	114,461000	175,433000	-33,564882
Temperatura=448 K				
ΔH	-354,104874	-354,104874	-708,337751	-80,323163
ΔG	-354,202989	-354,202989	-708,494762	-55,712848
ΔS	137,428000	137,428000	219,923000	-34,471007
Temperatura=798 K				
ΔH	-354,056874	-354,056874	-708,242100	-80,542164
ΔG	-354,293592	-354,293592	-708,645097	-36,340987
ΔS	186,144000	186,144000	316,898000	-34,757779

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈.

Ácido Carboxílico				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₆COOH	Total
ΔH	-424,818509	-432,693676	-857,640317	-80,404111
ΔG	-424,870823	-432,754932	-857,728359	-64,385036
ΔS	110,159000	128,990000	185,299000	-33,791414
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-432,677166	-857,612763	-80,904864
ΔG	-424,899574	-432,789112	-857,778177	-56,156497
ΔS	130,133000	156,802000	231,694000	-34,664280
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-432,618710	-857,514625	-81,103785
ΔG	-424,983892	-432,893546	-857,935898	-36,684235
ΔS	170,814000	216,118000	331,269000	-34,929089
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₆COOH	Total
ΔH	-464,106170	-393,406101	-857,640317	-80,350145
ΔG	-464,162106	-393,463965	-857,728359	-64,186743
ΔS	117,786000	121,846000	185,299000	-34,094501
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-393,391029	-857,612763	-80,853408
ΔG	-464,192970	-393,496148	-857,778177	-55,885413
ΔS	140,187000	147,240000	231,694000	-34,973015
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-393,337797	-857,514625	-81,056722
ΔG	-464,284409	-393,593737	-857,935898	-36,239958
ΔS	186,172000	201,259000	331,269000	-35,242217
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇COOH	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₆COOH	Total
ΔH	-503,393316	-354,118505	-857,640317	-80,632525
ΔG	-503,452778	-354,172862	-857,728359	-64,457200
ΔS	125,212000	114,461000	185,299000	-34,120229
Temperatura=448 K				
ΔH	-503,378598	-354,104874	-857,612763	-81,131395
ΔG	-503,485707	-354,202989	-857,778177	-56,150222
ΔS	150,026000	137,428000	231,694000	-34,989958
Temperatura=798 K				
ΔH	-503,328162	-354,056874	-857,514625	-81,318393
ΔG	-503,584139	-354,293592	-857,935898	-36,500374
ΔS	201,289000	186,144000	331,269000	-35,243472

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈.

Cetona				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₅ CH ₃	Total
ΔH	-546,023699	-236,255758	-782,398346	-74,604036
ΔG	-546,087592	-236,299708	-782,484557	-61,029740
ΔS	134,544000	92,546000	181,446000	-28,642066
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-236,246445	-782,371518	-74,540030
ΔG	-546,123281	-236,323726	-782,533310	-54,155996
ΔS	163,874000	108,247000	226,621000	-28,551705
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-236,214127	-782,275831	-73,566762
ΔG	-546,232629	-236,393517	-782,687470	-38,481423
ΔS	226,596000	141,064000	323,694000	-27,589105

Tabela 04. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₅ CH ₃	Total
ΔH	-621,250713	-236,255758	-857,630538	-77,853283
ΔG	-621,320754	-236,299708	-857,719644	-62,237697
ΔS	147,488000	92,546000	187,540000	-32,940510
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,232071	-236,246445	-857,602954	-78,086089
ΔG	-621,359792	-236,323726	-857,770008	-54,273340
ΔS	178,897000	108,247000	233,991000	-33,354039
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,166577	-236,214127	-857,504893	-77,929839
ΔG	-621,478632	-236,393517	-857,928989	-35,667668
ΔS	245,385000	141,064000	333,489000	-33,232930

Tabela 05. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₈.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₅COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₆COOH	Total
ΔH	-424,818509	-581,969020	-1006,916444	-80,895452
ΔG	-424,870823	-582,035580	-1007,009600	-64,757149
ΔS	110,159000	140,157000	196,062000	-34,044928
Temperatura=448 K				
ΔH	-424,806667	-581,951411	-1006,887769	-81,382399
ΔG	-424,899574	-582,072664	-1007,062227	-56,468997
ΔS	130,133000	169,837000	244,362000	-34,894576
Temperatura=798 K				
ΔH	-424,766668	-581,890486	-1006,787145	-81,570652
ΔG	-424,983892	-582,185180	-1007,227835	-36,874370
ΔS	170,814000	231,734000	346,537000	-35,147463
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₆COOH	Total
ΔH	-464,106170	-542,680977	-1006,916444	-81,135160
ΔG	-464,162106	-542,744484	-1007,009600	-64,639805
ΔS	117,786000	133,730000	196,062000	-34,797940
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-542,664809	-1006,887769	-81,622736
ΔG	-464,192970	-542,779741	-1007,062227	-56,172185
ΔS	140,187000	160,985000	244,362000	-35,648843
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-542,609125	-1006,787145	-81,804714
ΔG	-464,284409	-542,885806	-1007,227835	-36,157126
ΔS	186,172000	217,568000	346,537000	-35,895455
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₆COOH	Total
ΔH	-503,393316	-503,393316	-1006,916444	-81,458328
ΔG	-503,452778	-503,452778	-1007,009600	-65,288650
ΔS	125,212000	125,212000	196,062000	-34,112699
Temperatura=448 K				
ΔH	-503,378598	-503,378598	-1006,887769	-81,935863
ΔG	-503,485707	-503,485707	-1007,062227	-56,986066
ΔS	150,026000	150,026000	244,362000	-34,946032
Temperatura=798 K				
ΔH	-503,328162	-503,328162	-1006,787145	-82,091486
ΔG	-503,584139	-503,584139	-1007,227835	-37,372613
ΔS	201,289000	201,289000	346,537000	-35,166288

Anexo XX: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₁₉**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₉.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₇CH₃	Total
ΔH	-314,830933	-432,693676	-747,651759	-79,787896
ΔG	-314,881852	-432,754932	-747,738449	-63,795804
ΔS	107,222000	128,990000	182,455000	-33,733055
Temperatura=448 K				
ΔH	-314,818740	-432,677166	-747,623889	-80,310612
ΔG	-314,909959	-432,789112	-747,787638	-55,576678
ΔS	127,770000	156,802000	229,362000	-34,644827
Temperatura=798 K				
ΔH	-314,775965	-432,618710	-747,523012	-80,532751
ΔG	-314,993664	-432,893546	-747,944749	-36,106298
ΔS	171,188000	216,118000	331,634000	-34,934737
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₇CH₃	Total
ΔH	-354,118505	-393,406101	-747,651759	-79,789779
ΔG	-354,172862	-393,463965	-747,738449	-63,768821
ΔS	114,461000	121,846000	182,455000	-33,792669
Temperatura=448 K				
ΔH	-354,104874	-393,391029	-747,623889	-80,312495
ΔG	-354,202989	-393,496148	-747,787638	-55,535263
ΔS	137,428000	147,240000	229,362000	-34,705068
Temperatura=798 K				
ΔH	-354,056874	-393,337797	-747,523012	-80,535261
ΔG	-354,293592	-393,593737	-747,944749	-36,031624
ΔS	186,144000	201,259000	331,634000	-34,995605
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉CH₃	•CH₂(CH₂)₆CH₃	CH₃(CH₂)₁₇CH₃	Total
ΔH	-432,693676	-314,830933	-747,651759	-79,787896
ΔG	-432,754932	-314,881852	-747,738449	-63,795804
ΔS	128,990000	107,222000	182,455000	-33,733055
Temperatura=448 K				
ΔH	-432,677166	-314,818740	-747,623889	-80,310612
ΔG	-432,789112	-314,909959	-747,787638	-55,576678
ΔS	156,802000	127,770000	229,362000	-34,644827
Temperatura=798 K				
ΔH	-432,618710	-314,775965	-747,523012	-80,532751
ΔG	-432,893546	-314,993664	-747,944749	-36,106298
ΔS	216,118000	171,188000	331,634000	-34,934737

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₉.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₇COOH	Total
ΔH	-464,106170	-432,693676	-896,927887	-80,347008
ΔG	-464,162106	-432,754932	-897,019270	-64,151602
ΔS	117,786000	128,990000	192,331000	-34,164782
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-432,677166	-896,898897	-80,851526
ΔG	-464,192970	-432,789112	-897,071056	-55,832075
ΔS	140,187000	156,802000	241,142000	-35,044551
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-432,618710	-896,795534	-81,054212
ΔG	-464,284409	-432,893546	-897,235558	-36,146459
ΔS	186,172000	216,118000	346,014000	-35,313753
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇COOH	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₇COOH	Total
ΔH	-503,393316	-393,406101	-896,927887	-80,616210
ΔG	-503,452778	-393,463965	-897,019270	-64,336718
ΔS	125,212000	121,846000	192,331000	-34,341740
Temperatura=448 K				
ΔH	-503,378598	-393,391029	-896,898897	-81,118218
ΔG	-503,485707	-393,496148	-897,071056	-55,974520
ΔS	150,026000	147,240000	241,142000	-35,218371
Temperatura=798 K				
ΔH	-503,328162	-393,337797	-896,795534	-81,309608
ΔG	-503,584139	-393,593737	-897,235558	-36,196032
ΔS	201,289000	201,259000	346,014000	-35,475650

Tabela 03. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₉.

Cetonas				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₆ CH ₃	Total
ΔH	-546,023699	-275,543325	-821,686014	-74,667415
ΔG	-546,087592	-275,590719	-821,775790	-61,169047
ΔS	134,544000	99,800000	188,950000	-28,485189
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-275,532573	-821,657743	-74,600899
ΔG	-546,123281	-275,616761	-821,826626	-54,332326
ΔS	163,874000	117,921000	236,552000	-28,390435
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-275,495031	-821,556817	-73,618218
ΔG	-546,232629	-275,693460	-821,987841	-38,749998
ΔS	226,596000	156,035000	338,937000	-27,418422

Tabela 04. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₉.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₅ CH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COO(CH ₂) ₆ CH ₃	Total
ΔH	-621,250713	-275,543325	-896,919724	-78,869222
ΔG	-621,320754	-275,590719	-897,012558	-63,431848
ΔS	147,488000	99,800000	195,387000	-32,568397
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,232071	-275,532573	-896,890680	-79,088850
ΔG	-621,359792	-275,616761	-897,065091	-55,558480
ΔS	178,897000	117,921000	244,296000	-32,958080
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,166577	-275,495031	-896,787369	-78,916285
ΔG	-621,478632	-275,693460	-897,231339	-37,178085
ΔS	245,385000	156,035000	349,116000	-32,821283

Tabela 05. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₁₉.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₆COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₇COOH	Total
ΔH	-464,106170	-581,969020	-1046,203998	-80,828308
ΔG	-464,162106	-582,035580	-1046,300544	-64,544424
ΔS	117,786000	140,157000	203,199000	-34,352407
Temperatura=448 K				
ΔH	-464,092886	-581,951411	-1046,173887	-81,319021
ΔG	-464,192970	-582,072664	-1046,355165	-56,181598
ΔS	140,187000	169,837000	253,914000	-35,209586
Temperatura=798 K				
ΔH	-464,047656	-581,890486	-1046,068039	-81,511666
ΔG	-464,284409	-582,185180	-1046,527611	-36,409385
ΔS	186,172000	231,734000	361,386000	-35,466865
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₇COOH	Total
ΔH	-503,393316	-542,680977	-1046,203998	-81,391185
ΔG	-503,452778	-542,744484	-1046,300544	-64,810488
ΔS	125,212000	133,730000	203,199000	-34,979290
Temperatura=448 K				
ΔH	-503,378598	-542,664809	-1046,173887	-81,877505
ΔG	-503,485707	-542,779741	-1046,355165	-56,298315
ΔS	150,026000	160,985000	253,914000	-35,828938
Temperatura=798 K				
ΔH	-503,328162	-542,609125	-1046,068039	-82,048188
ΔG	-503,584139	-542,885806	-1046,527611	-36,185992
ΔS	201,289000	217,568000	361,386000	-36,063627
Reação 3				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₈COOH	•CH₂(CH₂)₇COOH	HOOC(CH₂)₁₇COOH	Total
ΔH	-542,680977	-503,393316	-1046,203998	-81,391185
ΔG	-542,744484	-503,452778	-1046,300544	-64,810488
ΔS	133,730000	125,212000	203,199000	-34,979290
Temperatura=448 K				
ΔH	-542,664809	-503,378598	-1046,173887	-81,877505
ΔG	-542,779741	-503,485707	-1046,355165	-56,298315
ΔS	160,985000	150,026000	253,914000	-35,828938
Temperatura=798 K				
ΔH	-542,609125	-503,328162	-1046,068039	-82,048188
ΔG	-542,885806	-503,584139	-1046,527611	-36,185992
ΔS	217,568000	201,289000	361,386000	-36,063627

Anexo XXI: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₀**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₀.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₈CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₈CH₃	Total
ΔH	-393,406101	-393,406101	-786,939339	-79,779739
ΔG	-393,463965	-393,463965	-787,029409	-63,679087
ΔS	121,846000	121,846000	189,569000	-33,962724
Temperatura=448 K				
ΔH	-393,391029	-393,391029	-786,910033	-80,305592
ΔG	-393,496148	-393,496148	-787,080587	-55,403485
ΔS	147,240000	147,240000	238,893000	-34,881398
Temperatura=798 K				
ΔH	-393,337797	-393,337797	-786,803928	-80,530868
ΔG	-393,593737	-393,593737	-787,244525	-35,800073
ΔS	201,259000	201,259000	346,464000	-35,174446
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉CH₃	•CH₂(CH₂)₇CH₃	CH₃(CH₂)₁₈CH₃	Total
ΔH	-432,693676	-354,118505	-786,939339	-79,792917
ΔG	-432,754932	-354,172862	-787,029409	-63,764429
ΔS	128,990000	114,461000	189,569000	-33,811494
Temperatura=448 K				
ΔH	-432,677166	-354,104874	-786,910033	-80,316887
ΔG	-432,789112	-354,202989	-787,080587	-55,525850
ΔS	156,802000	137,428000	238,893000	-34,724521
Temperatura=798 K				
ΔH	-432,618710	-354,056874	-786,803928	-80,537143
ΔG	-432,893546	-354,293592	-787,244525	-36,010916
ΔS	216,118000	186,144000	346,464000	-35,013803

Tabela 02. Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₀.

Cetonas				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO]•	•CH ₂ (CH ₂) ₆ CH ₃	[CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CO(CH ₂) ₇ CH ₃]	Total
ΔH	-546,023699	-314,830933	-860,973504	-74,593369
ΔG	-546,087592	-314,881852	-861,066369	-60,821407
ΔS	134,544000	107,222000	195,451000	-29,063126
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-314,818740	-860,943801	-74,532500
ΔG	-546,123281	-314,909959	-861,119045	-53,843496
ΔS	163,874000	127,770000	245,462000	-28,979667
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-314,775965	-860,837660	-73,561115
ΔG	-546,232629	-314,993664	-861,286737	-37,929214
ΔS	226,596000	171,188000	353,134000	-28,018322

Tabela 03. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₀.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₇COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₁₈COOH	Total
ΔH	-503,393316	-581,969020	-1085,491594	-81,110688
ΔG	-503,452778	-582,035580	-1085,591462	-64,698791
ΔS	125,212000	140,157000	210,190000	-34,625374
Temperatura=448 K				
ΔH	-503,378598	-581,951411	-1085,460047	-81,600145
ΔG	-503,485707	-582,072664	-1085,648041	-56,268822
ΔS	150,026000	169,837000	263,321000	-35,480670
Temperatura=798 K				
ΔH	-503,328162	-581,890486	-1085,348971	-81,778986
ΔG	-503,584139	-582,185180	-1085,827245	-36,349144
ΔS	201,289000	231,734000	376,092000	-35,724772
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₈COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₁₈COOH	Total
ΔH	-542,680977	-542,680977	-1085,491594	-81,350396
ΔG	-542,744484	-542,744484	-1085,591462	-64,316010
ΔS	133,730000	133,730000	210,190000	-35,937498
Temperatura=448 K				
ΔH	-542,664809	-542,664809	-1085,460047	-81,845502
ΔG	-542,779741	-542,779741	-1085,648041	-55,571658
ΔS	160,985000	160,985000	263,321000	-36,802834
Temperatura=798 K				
ΔH	-542,609125	-542,609125	-1085,348971	-82,028735
ΔG	-542,885806	-542,885806	-1085,827245	-34,910264
ΔS	217,568000	217,568000	376,092000	-37,050700

Anexo XXII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₁**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₁.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉CH₃	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₁₉CH₃	Total
ΔH	-432,693676	-393,406101	-826,226940	-79,796054
ΔG	-432,754932	-393,463965	-826,320157	-63,541663
ΔS	128,990000	121,846000	196,193000	-34,289029
Temperatura=448 K				
ΔH	-432,677166	-393,391029	-826,196203	-80,326300
ΔG	-432,789112	-393,496148	-826,373204	-55,185739
ΔS	156,802000	147,240000	247,925000	-35,213979
Temperatura=798 K				
ΔH	-432,618710	-393,337797	-826,084878	-80,554086
ΔG	-432,893546	-393,593737	-826,543689	-35,395329
ΔS	216,118000	201,259000	360,788000	-35,510163

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₁.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₈COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₉COOH	Total
ΔH	-542,680977	-432,693676	-975,503033	-80,559734
ΔG	-542,744484	-432,754932	-975,601161	-63,846005
ΔS	133,730000	128,990000	206,528000	-35,261042
Temperatura=448 K				
ΔH	-542,664809	-432,677166	-975,471168	-81,069899
ΔG	-542,779741	-432,789112	-975,656916	-55,260413
ΔS	160,985000	156,802000	260,176000	-36,151479
Temperatura=798 K				
ΔH	-542,609125	-432,618710	-975,357350	-81,271958
ΔG	-542,885806	-432,893546	-975,835058	-34,956072
ΔS	217,568000	216,118000	375,647000	-36,420053

Tabela 03. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₁.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₉COO]•	•CH₂(CH₂)₈CH₃	CH₃(CH₂)₉COO((CH₂)₉CH₃)	Total
ΔH	-581,963126	-393,406101	-975,494833	-78,819021
ΔG	-582,030442	-393,463965	-975,595520	-63,449419
ΔS	141,749000	121,846000	211,914000	-32,430344
Temperatura=448 K				
ΔH	-581,945924	-393,391029	-975,462897	-79,031119
ΔG	-582,067818	-393,496148	-975,652583	-55,608054
ΔS	170,735000	147,240000	265,691000	-32,808733
Temperatura=798 K				
ΔH	-581,885658	-393,337797	-975,349100	-78,843494
ΔG	-582,180593	-393,593737	-975,833798	-37,316765
ΔS	231,923000	201,259000	381,144000	-32,654365

Anexo XXIII: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₂**Tabela 01.** Energias dos hidrocarbonetos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₂.

Hidrocarbonetos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉CH₃	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₂₀CH₃	Total
ΔH	-432,693676	-432,693676	-865,514485	-79,777229
ΔG	-432,754932	-432,754932	-865,611282	-63,640809
ΔS	128,990000	128,990000	203,727000	-34,044300
Temperatura=448 K				
ΔH	-432,677166	-432,677166	-865,482304	-80,303710
ΔG	-432,789112	-432,789112	-865,666419	-55,343244
ΔS	156,802000	156,802000	257,888000	-34,962347
Temperatura=798 K				
ΔH	-432,618710	-432,618710	-865,365745	-80,525221
ΔG	-432,893546	-432,893546	-865,843976	-35,695279
ΔS	216,118000	216,118000	376,058000	-35,252257

Tabela 02. Energias dos ácidos carboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₂.

Ácidos Carboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉COOH	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₂₀COOH	Total
ΔH	-581,969020	-432,693676	-1014,790612	-80,268569
ΔG	-582,035580	-432,754932	-1014,892125	-63,763174
ΔS	140,157000	128,990000	213,653000	-34,823040
Temperatura=448 K				
ΔH	-581,951411	-432,677166	-1014,757310	-80,781245
ΔG	-582,072664	-432,789112	-1014,949872	-55,281121
ΔS	169,837000	156,802000	269,719000	-35,717869
Temperatura=798 K				
ΔH	-581,890486	-432,618710	-1014,638265	-80,992088
ΔG	-582,185180	-432,893546	-1015,134847	-35,216489
ΔS	231,734000	216,118000	390,489000	-35,995856

Tabela 03. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₂.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₉COO]•	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₉COO (CH₂)₁₀CH₃	Total
ΔH	-581,963126	-432,693676	-1014,782534	-78,898087
ΔG	-582,030442	-432,754932	-1014,885255	-62,676326
ΔS	141,749000	128,990000	216,195000	-34,226905
Temperatura=448 K				
ΔH	-581,945924	-432,677166	-1014,749171	-79,117088
ΔG	-582,067818	-432,789112	-1014,943627	-54,403234
ΔS	170,735000	156,802000	272,373000	-34,615962
Temperatura=798 K				
ΔH	-581,885658	-432,618710	-1014,630167	-78,940130
ΔG	-582,180593	-432,893546	-1015,130074	-35,099772
ΔS	231,923000	216,118000	393,103000	-34,474144

Tabela 04. Energias dos ácidos dicarboxílicos gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₂.

Ácidos dicarboxílicos				
Reação 1				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₉COOH	•CH₂(CH₂)₉COOH	HOOC(CH₂)₂₀COOH	Total
ΔH	-581,969020	-581,969020	-1164,066739	-80,759909
ΔG	-582,035580	-582,035580	-1164,173372	-64,139052
ΔS	140,157000	140,157000	224,430000	-35,067769
Temperatura=448 K				
ΔH	-581,951411	-581,951411	-1164,032317	-81,259407
ΔG	-582,072664	-582,072664	-1164,233931	-55,599269
ΔS	169,837000	169,837000	282,399000	-35,940635
Temperatura=798 K				
ΔH	-581,890486	-581,890486	-1163,910786	-81,459583
ΔG	-582,185180	-582,185180	-1164,426800	-35,416664
ΔS	231,734000	231,734000	405,769000	-36,206699
Reação 2				
Temperatura=298 K	•CH₂(CH₂)₁₀COOH	•CH₂(CH₂)₈COOH	HOOC(CH₂)₂₀COOH	Total
ΔH	-621,257384	-542,680977	-1164,066739	-80,558479
ΔG	-621,326824	-542,744484	-1164,173372	-64,046181
ΔS	146,224000	133,730000	224,430000	-34,841865
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,238312	-542,664809	-1164,032317	-81,071782
ΔG	-621,365654	-542,779741	-1164,233931	-55,557225
ΔS	178,367000	160,985000	282,399000	-35,738577
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,172139	-542,609125	-1163,910786	-81,276350
ΔG	-621,484449	-542,885806	-1164,426800	-35,482553
ΔS	245,585000	217,568000	405,769000	-36,009034

Anexo XXIV: Energias dos compostos gerados na pirólise do ácido láurico com C₂₃**Tabela 01.** Energias das cetonas gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₃.

Cetonas				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₁₀CO]•	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₀CO(CH₂)₁₀CH₃	Total
ΔH	-546,023699	-432,693676	-978,834416	-73,444398
ΔG	-546,087592	-432,754932	-978,939242	-60,691512
ΔS	134,544000	128,990000	220,624000	-26,926454
Temperatura=448 K				
ΔH	-546,006286	-432,677166	-978,800387	-73,377882
ΔG	-546,123281	-432,789112	-978,998800	-54,221257
ΔS	163,874000	156,802000	277,916000	-26,832328
Temperatura=798 K				
ΔH	-545,944468	-432,618710	-978,678533	-72,386416
ΔG	-546,232629	-432,893546	-979,189140	-39,511167
ΔS	226,596000	216,118000	401,517000	-25,851529

Tabela 02. Energias dos ésteres gerados na pirólise do ácido láurico do óleo de babaçu, C₂₃.

Ésteres				
Reação 1				
Temperatura=298 K	[CH₃(CH₂)₁₀COO]•	•CH₂(CH₂)₉CH₃	CH₃(CH₂)₁₀COO(CH₂)₁₀CH₃	Total
ΔH	-621,2507130	-432,6936760	-1054,0443190	-62,7070743
ΔG	-621,3207540	-432,7549320	-1054,1461930	-44,2438476
ΔS	147,4880000	128,9900000	214,4130000	-38,9464082
Temperatura=448 K				
ΔH	-621,2320710	-432,6771660	-1054,0097550	-63,0760502
ΔG	-621,3597920	-432,7891120	-1054,2043620	-34,8004496
ΔS	178,8970000	156,8020000	272,5840000	-39,6052937
Temperatura=798 K				
ΔH	-621,1665770	-432,6187100	-1053,8856070	-62,9518032
ΔG	-621,4786320	-432,8935460	-1054,3924050	-12,6926448
ΔS	245,3850000	216,1180000	398,5220000	-39,5212073

Anexo XXV: Carta de submissão do artigo “Theoretical and Experimental Study of Babassu Oil Pyrolysis (*Orbignya phalerata*)”

Elsevier Editorial System(tm) for
Bioresource Technology
Manuscript Draft

Manuscript Number:

Title: Theoretical and Experimental Study of Babassu Oil Pyrolysis
(*Orbignya phalerata*)

Article Type: Original research paper

Keywords: Biofuel, babassu oil, lauric acid, pyrolysis, DFT calculations

Corresponding Author: Professor Francisco das Chagas Alves Lima, Ph.D

Corresponding Author's Institution: UESPI

First Author: Cícero O Costa Neto

Order of Authors: Cícero O Costa Neto; Antônio R Oliveira, Graduation student; Geraldo E Luz Jr; Francisco das Chagas Alves Lima, Ph.D

Abstract: The pyrolysis of babassu oil was used to obtain alternative biofuels. The characterization of the organic liquid (LO) was made by infrared spectroscopy (FTIR) and the acidity by direct estimation of the amount of free acids. Gas chromatography of the organic liquids showed C6 to C23 peaks indicating the presence of high amounts of substances in the samples. The electronic properties, thermodynamic profiles and mechanisms of beta hydrogen elimination and gamma hydrogen transfer were calculated with DFT theory in the pyrolysis of the lauric acid. The routes of the thermal decomposition reactions of lauric acid were investigated through the geometric parameters, lengths of bonds, energies involved in the breaks of bonds and formation of radicals. The energies profiles of reactions were investigated in the formation of the possible compounds obtained in the pyrolysis of lauric acid. The mechanism of elimination of the beta hydrogen show that more favorable energetically.

Anexo XXVI: E-mail de submissão do artigo “Thermo-catalytic cracking of babassu oil on bauxite protonated ”

This message was sent automatically. Please do not reply.

Ref: FUPROC_2017_736

Title: Thermo-catalytic cracking of babassu oil on bauxite protonated

Journal: Fuel Processing Technology

Dear Dr. Lima,

Thank you for submitting your manuscript for consideration for publication in Fuel Processing Technology. Your submission was received in good order.

To track the status of your manuscript, please log into

EVISE® at: http://www.evise.com/evise/faces/pages/navigation/NavController.jspx?JRNL_ACR=FUPROC and locate your submission under the header 'My Submissions with Journal' on your 'My Author Tasks' view.

Thank you for submitting your work to this journal.

Kind regards,

Fuel Processing Technology

Have questions or need assistance?

For further assistance, please visit our [Customer Support](#) site. Here you can search for solutions on a range of topics, find answers to frequently asked questions, and learn more about EVISE® via interactive tutorials. You can also talk 24/5 to our customer support team by phone and 24/7 by live chat and email.

Copyright © 2017 Elsevier B.V. | [Privacy Policy](#)

Elsevier B.V., Radarweg 29, 1043 NX Amsterdam, The Netherlands, Reg. No. 33156677.

Anexo XXVII: Publicação do livro “Avanços Científicos e Biotecnológicos”

Gustavo Cardoso da Silva
Constantino Augusto Dias Neto
Gabriela Dantas Carvalho
Cícero Oliveira Costa Neto
Ana Amélia de Carvalho Melo Cavalcante
Paulo Michel Pinheiro Ferreira

Avanços Científicos e Biotecnológicos

1ª Edição - 2016
Vila Velha - ES

ABOVE
Editora e Publicações

Gerente Editorial
Daiane Benedet

Capa
Jônatas Rabello

Organizadora
Juliana Nadielle Barbosa Cunha

Cordenador
Gustavo Cardoso da Silva

Diagramação
Jairo Bonellá

*Todos os direitos reservados
pelos autores.
É proibida a reprodução parcial ou
total sem a permissão escrita dos
autores.*

*Editora Above
(27) 4105-3374
www.aboveonline.com.br*

Ficha catalográfica

S5861b

Silva, Gustavo Cardoso da, 1986 -
Avanços Científicos e biotecnológicos / Gustavo Cardoso
da Silva, [et al.]. – Vila Velha : Above publicações, 2016.
128 p. ; 14x21 cm.

S5861b

Silva, Gustavo Cardoso da, 1986 -
Avanços Científicos e biotecnológicos / Gustavo Cardoso
da Silva, [et al.]. – Vila Velha : Above publicações, 2016.
128 p. ; 14x21 cm.

ISBN 978-85-8219-234-4

1. Biomoduladores. 2. Células-tronco. 3. Combustíveis
de Biomassa. 4. Sistemas Computacionais. I. Título

CDD 572.8

Catálogo na publicação:

Bibliotecária: Andréa da Silva Barboza – CRB7/6354

Capítulo 1

Autores colaboradores deste capítulo

Aldeídia Pereira de Oliveira e Pedro Simão

Farmacodinâmica do controle do tônus vascular...

Capítulo 2

Biomoduladores endógenos vasorrelaxamento

Capítulo 3

Biotecnologia e o Uso de Sistemas Computaciona
Agropecuária

Capítulo 4

Autores colaboradores deste capítulo

Douglas Santiago Kridi e Carlos Giovanni Nune

Proposta de Sistema para Monitoramento de Col
Sensores Sem Fio

Autores colaboradores deste capítulo

Douglas Santiago Kridi e Carlos Giovanni Nune

Proposta de Sistema para Monitoramento de Col
Sensores Sem Fio

Capítulo 5

Autores colaboradores deste capítulo

Hammayana Costa Boavista e Anderson Cu

Células-tronco hematopoiéticas.....

Anexo XXVIII: Publicação do artigo “Catalytic deoxygenation of fatty acids over HA1MCM-41 molecular sieve




pp 1–9 | [Cite as](#)

Catalytic deoxygenation of C18 fatty acids over HA1MCM-41 molecular sieve

Authors

[Authors and affiliations](#)

F. C. M. Silva, M. S. Lima, C. O. Costa Neto, J. L. S. Sá, L. D. Souza, V. P. S. Caldeira, A. G. D. Santos, G. E. Luz Jr 

Original Article

First Online: 13 May 2017

114

Downloads

Abstract

The large demand for energy combined with ecological, economic, and social reasons encouraged the studies for alternative sources of fuel. The deoxygenation process of oils and fatty acids has emerged as a promising resource in obtaining fuels. This paper studied the deoxygenation process of oleic and stearic acids carried out in a distillation system, under the temperature of 450 °C over MCM-41, AlMCM-41-41, and HA1MCM-41 molecular sieves, which were synthesized by direct hydrothermal synthesis method and characterized by X-ray

Anexo XXIX: Publicação do artigo “Determination of SBA-15 acidity through *n*-butyl amine TPD: a theoretical and experimental study



[Journal of Materials Science](#)

October 2013, Volume 48, [Issue 20](#), pp 6885–6890 | [Cite as](#)

Determination of SBA-15 acidity through *n*-butyl amine TPD: a theoretical and experimental study

Authors

[Authors and affiliations](#)

Geraldo E. Luz Jr. , Francisco C. A. Lima, Cicero O. Costa Neto, Gizeuda L. Paz, Edjane F. B. Silva, Marcela N. Barbosa

Article

First Online: 07 June 2013

335

Downloads

3

Citations

Abstract

In this study, the interaction ways between *n*-butyl amine and SBA-15 molecular sieve were evaluated when the TPD technique is carried out to determine the total acidity of that solid. Experimental results (FTIR, TG/DTG, total acid, and catalytic activity) and theoretical calculations demonstrated that the *n*-butyl amine, used as probe molecule to total acidity determined by TPD, can act as acid or base depending on the nature and force of the active sites