

UTILIZAÇÃO DE REAÇÕES HIPOTÉTICAS NA AVALIAÇÃO DA POTÊNCIA TÉRMICA E CINÉTICA DA MOLÉCULA DE BUTANAL: UM ESTUDO TEÓRICO COMPUTACIONAL DE DFT

USE OF HYPOTHETICAL REACTIONS IN THE EVALUATION OF THE THERMAL AND KINETIC POTENTIAL OF BUTANAL MOLECULE: A THEORETICAL DFT-BASED COMPUTATIONAL STUDY

Rafaela G. Faustino¹, José de B. M. Neto², Guilherme R. Araújo³, Anna B. V. Pavão⁴,
Aparecida H. M. do Carmo⁵, Raquel M. T. Fernandes⁶, Alamgir Khan⁷

1 - Graduanda em Licenciatura em Química, Universidade Estadual do Maranhão (UEMA). Itapecuru-Mirim, MA, Brasil.

2 - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Aeroespacial - PPGEA, Universidade Estadual do Maranhão, (UEMA). São Luís, MA, Brasil

3 - Graduando em Licenciatura em Química, Universidade Estadual do Maranhão (UEMA). Itapecuru-Mirim, MA, Brasil.

4 - Graduanda em Licenciatura em Química, Universidade Estadual do Maranhão (UEMA). São Luís, MA, Brasil.

5 - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Aeroespacial - PPGEA, Universidade Estadual do Maranhão, (UEMA). São Luís, MA, Brasil

6 - Núcleo de Estudos em Química Teórica e Aplicada – NEQTA, Universidade Estadual do Maranhão (UEMA). São Luís, MA, Brasil.

7 - Núcleo de Estudos em Química Teórica e Aplicada – NEQTA, Universidade Estadual do Maranhão (UEMA). São Luís, MA, Brasil.

rafaela.faustino27@gmail.com

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo teórico-computacional da molécula de butanal (C_4H_8O), com o objetivo de avaliar sua potência térmica e cinética como possível combustível alternativo, por meio de reações isodésmicas e cálculos computacionais baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT). A modelagem foi realizada no software GaussView 6 [1], e os cálculos foram efetuados no Gaussian 09W [2] utilizando o funcional B3LYP [3] com a base cc-pVDZ [4]. Empregaram-se três reações hipotéticas, denominadas ButanI ($C_4H_8O \rightarrow C_3H_6 + CH_2O$), ButanII ($C_4H_8O \rightarrow C_3H_6O + C_2H_2$) e ButanIII ($C_4H_8O \rightarrow C_4H_6 + H_2O$), para simular diferentes formas de decomposição térmica da molécula. A partir dessas reações, foram analisadas individualmente as propriedades termoquímicas envolvidas, como variação de entalpia (ΔH), energia livre de Gibbs (ΔG), entropia (ΔS) e constante de equilíbrio (k), em diferentes temperaturas (5 K a 1500 K). Os resultados indicaram aumento expressivo de entropia e entalpia com a elevação da temperatura, enquanto os valores de energia livre de Gibbs diminuíram, favorecendo a espontaneidade das reações em altas temperaturas. Cada reação apresentou um comportamento

distinto: ButanI tornou-se espontânea a partir de 298 K, enquanto ButanII e ButanIII exigiram temperaturas mais elevadas. A reação ButanII destacou-se pelo maior valor da constante de equilíbrio, sugerindo maior rendimento de produtos. Esses achados evidenciam o potencial energético do butanal e sua aplicabilidade como combustível alternativo. O estudo reforça a importância de métodos teóricos na predição de propriedades moleculares e no avanço da química sustentável.

Palavras-chave: *Química Computacional, Termodinâmica, DFT, Reações Isodésmicas, Butanal.*

ABSTRACT

This study presents a theoretical-computational analysis of the butanal molecule (C_4H_8O), aiming to evaluate its thermal and kinetic potential as a possible alternative fuel through isodesmic reactions and computational calculations based on Density Functional Theory (DFT). Molecular modeling was performed using GaussView 6 software [1], and calculations were carried out in Gaussian 09W [2], employing the B3LYP functional [3] with the cc-pVDZ basis set [4]. Three hypothetical reactions, named ButanI ($C_4H_8O \rightarrow C_3H_6 + CH_2O$), ButanII ($C_4H_8O \rightarrow C_3H_6O + C_2H_2$), and ButanIII ($C_4H_8O \rightarrow C_4H_6 + H_2O$), were used to simulate different thermal decomposition pathways of the molecule. From these reactions, the thermochemical properties involved—such as enthalpy variation (ΔH), Gibbs free energy (ΔG), entropy (ΔS), and equilibrium constant (k)—were individually analyzed at different temperatures (from 5 K to 1500 K). The results indicated a significant increase in entropy and enthalpy with rising temperature, while Gibbs free energy values decreased, favoring the spontaneity of the reactions at higher temperatures. Each reaction exhibited distinct behavior: ButanI became spontaneous from 298 K, while ButanII and ButanIII required higher temperatures. ButanII stood out with the highest equilibrium constant value, suggesting greater product yield. These findings highlight the energetic potential of butanal and its applicability as an alternative fuel. The study reinforces the importance of theoretical methods in predicting molecular properties and in advancing sustainable chemistry.

Keywords: *Computational Chemistry, Thermodynamics, DFT, Isodesmic Reactions, Butanal.*

REFERÊNCIAS

- [1] GAUSSVIEW, Version 6. DENNINGTON, Roy; KEITH, Todd A.; MILLAM, John M. Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, 2016.
- [2] FRISCH, M. J. et al. Gaussian~16 Revision C.01. Wallingford, CT: Gaussian Inc., 2016.
- [3] BECKE, A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. The Journal of Chemical Physics, v. 98, n. 7, p. 5648-5652, 1993.
- [4] DUDEK, R. W.; POPL, J. A. Molecular orbital theory of the electronic structure of organic compounds. Journal of Chemical Physics, v. 56, n. 9, p. 4187-4195, 1972.