Determinação de dados experimentais de temperatura normal de ebulição de acilglicerois parciais por análise termogravimétrica (TGA)

Evandro P. Jesus, Daniela S. Damaceno, Roberta Ceriani

Resumo

A temperatura normal de ebulição é uma propriedade termodinâmica importante para caracterizar biocombustíveis, como o biodiesel. Também é usada para estimar propriedades termofísicas, as quais são essenciais para etapas de separação, como a destilação. Este projeto de iniciação científica vai ao encontro deste cenário ao estudar a temperatura normal de ebulição de acilglicerois e diacilglicerois ainda não disponíveis na literatura. O estudo gerou dados experimentais a partir de análises TGA de 5 monoacilglicerois, monobutirina (A), monocaprina (B), monolaurina (C), monopalmitina (D) e monoestearina (E), e 3 diacilglicerois, dicaprina (F), dinonanoína (G) e dicaprilina (H), e os comparou com resultados teóricos obtidos por métodos preditivos como Marrero e Gani (MG), Joback e Reid (JR), Ceriani et al (CR) e Zong et al (ZN).

Palavras-chave:

Acilglicerois parciais, temperatura normal de ebulição, análise termogravimétrica..

Introdução

Atualmente há uma demanda alta pela substituição de combustíveis fósseis por combustíveis renováveis. O biodiesel é uma alternativa interessante frente ao diesel convencional por emitir menos poluentes a atmosfera (Thapa et al, 2018). Durante o processo de síntese de biodiesel através da reação de transesterificação também há formação de Monoacilglicerois (MAG) e Diacilglicerois (DAG), o que pode afetar as propriedades do biocombustível, como a viscosidade (ANP, 2017). A temperatura normal de ebulição é essencial para estimar as propriedades termofísicas dos MAG e DAG, as quais são utilizadas em etapas de separação/purificação

Resultados e Discussão

Os resultados experimentais (T_{exp}) foram obtidos pela análise termogravimétrica em triplicata a pressão ambiente, conforme metodologia definida por Santander et al (2012), de modo que uma tangente à curva de perda de massa permite a obtenção da temperatura de ebulição (temperatura onset). Os valores de T_{exp} foram corrigidos para pressão atmosférica para obtenção da temperatura normal de ebulição (T_{nb}), cujos valores estão na Figura 1.

Figura 1. Temperatura normal de ebulição (T_{nb}) dos MAG e DAG

A partir dos dados da Figura 1, é possível afirmar que para uma série homóloga de compostos os resultados estão coerentes (Damaceno et al, 2014). Há uma proporcionalidade entre a massa molar e a T_{nb} para todos os compostos analisados. Uma comparação entre os resultados experimentais obtidos e os valores teóricos

de T_{nb} calculados a partir de métodos preditivos de contribuição de grupos foi feita, como evidenciada na Tabela 1.

Tabela 1. T_{nb} experimental e teórica.

MAG ou DAG	CR (K)	DP (%) CR	MG (K)	DP (%) MG	JR (K)	DP (%) JR	ZN (K)	DP (%) ZN
A	541,9	0,6	541,6	0,7	601,7	10,4	547,2	0,3
B	597,2	1,5	612,6	1,1	738,9	22,3	601,3	0,8
B	597,2	3,9	612,6	1,4	738,9	19,7	601,3	3,3
C	616,3	4,9	632,0	2,5	784,7	22,2	616,4	4,9
C	616,3	5,4	632,0	2,9	784,7	21,6	616,4	5,4
D	654,4	2,6	666,4	0,9	876,3	31,2	642,2	4,5
E	672,9	0,7	681,7	0,6	922,0	36,3	652,1	3,8
F	637,0	6,5	656,6	9,7	842,3	38,3	620,1	3,6
G	657,5	2,5	672,6	4,9	888,1	37,5	-	-
H	677,8	3,1	687,6	4,6	933,8	40,8	657,9	0,1

Conclusões

Os resultados experimentais foram coerentes para todos os DAG e MAG. Ceriani e Marrero e Gani foram os métodos preditivos que apresentaram os menores desvios padrões em relação aos valores de T_{nb} obtidos por TGA e, portanto, foram os mais representativos.

Agradecimentos

Agradecimentos as agências CNPq (302146/2016-4), CAPES e FAPESP (2014/21252-0; 2016/18253-0) pelo suporte financeiro.

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Biodiesel. 2017. C.M.G. Santander, S.M.G.R. Rueda, N.L. da Silva, C.L. de Camargo, G. Theo, T.G. Kieckbusch, *et al.* Measurements of normal boiling points of fatty acid ethyl esters and triacylglycerols by thermogravimetric analysis. Fuel, 92 (2012), pp. 158-161
D.S. Damaceno, R.M. Matricarde Falleiro, M.A. Krähenhühl, A.J.A. Meirelles, R. Ceriani. Boiling points of short-chain partial acylglycerols and tocopherols at low pressures by the differential scanning calorimetry technique. J Chem Eng Data, 59 (2014), pp. 1515-1520
S. Thapa, N. Indrawan, P.R. Bhoi. An overview on fuel properties and prospects of Jatropha biodiesel as fuel for engines. Environ Technol Innovation, 9 (2018), pp. 210-219