



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE GURUPI
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**

THIAGO SOARES SILVA

**ESTUDO TEÓRICO DA ENERGIA DE COMBUSTÃO DE MOLÉCULAS
POTENCIALMENTE ENERGÉTICAS**

Gurupi, TO
2026

Thiago Soares Silva

Estudo teórico da energia de combustão de moléculas potencialmente energéticas

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Tocantins (UFT), como requisito à obtenção do grau de Mestre em Química.

Orientador: Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira

**Gurupi, TO
2026**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins

- S586e Silva, Thiago Soares.
Estudo teórico da energia de combustão de moléculas potencialmente energéticas. / Thiago Soares Silva. – Gurupi, TO, 2026.
54 f.
- Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal do Tocantins – Câmpus Universitário de Gurupi - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em Química, 2026.
Orientador: Douglas Henrique Pereira
1. Biocombustíveis. 2. Combustível Sustentável de Aviação. 3. DFT e Métodos G4. 4. Termodinâmica. I. Título

CDD 540

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte. A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184 do Código Penal.

Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Thiago Soares Silva

Estudo teórico da energia de combustão de moléculas potencialmente energéticas

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química foi avaliado para a obtenção do título de Mestre em Química e aprovado em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 13 / 02 / 2026

Banca Examinadora

Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira, ITA

Prof. Dr. Douglas Azevedo Castro, UFT

Prof. Dr. Luiz Fernando de Araújo Ferrão, ITA

“A experiência de viver nos torna o personagem que somos.”

Dedico esta conquista àqueles que me incentivaram a me tornar quem sou:

A Deus, por me erguer e dar forças em meio às adversidades;

aos meus pais, Maria Domingas e Paulo, por todo amor e apoio;

e aos meus irmãos, familiares, amigos e professores.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus pela vida, saúde e graça concedida, ao guiar meus passos nos momentos de maior desafio e incerteza.

Em especial sou grato aos meus pais, Maria Domingas Soares da Cruz Silva e Paulo da Silva Costa, por todo amor e paciência; aos meus irmãos, Tatiane, Leonardo e Nubia, pelo apoio fraternal incondicional e pela torcida constante em cada etapa desta caminhada; às minhas lembranças aos meus sobrinhos, Pietro, Théo, Lia e Cecília, que me motivam a ser exemplo, demonstrando a eles o poder do conhecimento, e que isso possa motivá-los a alcançar grandes conquistas.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Douglas Henrique Pereira, manifesto minha gratidão por seus conselhos, direcionamento e compartilhamento de conhecimentos fundamentais e avançados sobre química teórica e sobre a vida. Agradeço também a empatia, flexibilidade e compreensão quanto aos meus prazos particulares, bem como ao apoio incondicional relacionado ao meu neurodesenvolvimento, que foram essenciais para a conclusão desta etapa da melhor forma possível.

Aos colegas e amigos do Laboratório de Matemática Aplicada e Química Computacional (LABMAQC), em especial aos meus amigos mais próximos, Álefe, Nicolas e Murielly pela amizade e desenvolvimento de diversas atividades acadêmicas e extracurriculares. Estendo meus agradecimentos a todos os amigos, professores e funcionários da UFT e aos Amigos do Tênis de Mesa da AGAB, pelas inúmeras partidas animadas e momentos de genuína descontração.

À Universidade Federal do Tocantins pela estrutura fornecida para concluir mais este trabalho. Ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA) pelo espaço fornecido para meu aprendizado no laboratório ETER e ao Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ). Agradeço também o apoio da CAPES (Código 001), da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Grant #2023/17727-2), do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq, Grant # 304002/2024-0; #443317/2024); e do Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo (CENAPAD), pelos recursos computacionais.

RESUMO

A crescente demanda por combustíveis aeronáuticos e o esgotamento progressivo das fontes petrolíferas são desafios associados à logística de transporte, poluição e tecnologia o que torna necessário o desenvolvimento de Combustíveis Sustentáveis de Aviação (SAFs). Nesse contexto, as pesquisas surgem como ferramentas fundamentais para otimizar metodologias de produção e regulamentação de compostos com propriedades físico-químicas semelhantes às do querosene convencional. Neste contexto o presente estudo avalia o uso dos métodos B3LYP, M06-2X, M08-HX, G4 e G4-MP2, com o intuito de obter propriedades energéticas como a Entalpia de combustão de diferentes moléculas orgânicas com alto potencial para SAFs. Inicialmente foram analisadas estruturas de moléculas orgânicas contendo carbono, hidrogênio e oxigênio com valores da Entalpia de combustão experimental conhecida. Os resultados são complementados com cicloparafinas sintetizadas a partir de fonte vegetal, assim sendo candidatas promissoras a componentes de SAFs devido ao seu alto poder energético, níveis adequados de ponto de fulgor e congelamento. Os resultados demonstraram que os Erros Relativos Percentuais (ERP) tendem a se estabilizar em moléculas que liberam mais energia na combustão e quando aplicadas correções empíricas baseadas em dados experimentais e que o Erro Relativo Percentual Médio (ERPM) reduz-se em todas as teorias testadas. Observou-se também que a entalpia de combustão calculada com a método M08-HX apresenta ERPM comparável aos métodos G4-MP2, e quando aplicado a correção empírica obtido de dados experimentais de moléculas semelhante, o ERPM se aproxima do método composto G4. Os métodos B3LYP e M06-2X também apresentaram vantagem ao utilizar a correção empírica, isso indica a viabilidade dos métodos DFT para analisar estruturas complexas com um custo computacional significativamente menor que o exigido por métodos compostos. Portanto o estudo aprofundado desses métodos teóricos aplicados a moléculas de SAFs e querosene de aviação permite uma determinação mais exata das propriedades físico-químicas, resultando em análises mais confiáveis para a formulação de novos combustíveis.

Palavras-chaves: Biocombustíveis. Combustível Sustentável de Aviação. DFT. Métodos G4. Termodinâmica.

ABSTRACT

The growing demand for aviation fuels and the progressive depletion of petroleum resources pose challenges related to transport logistics, pollution, and technological development, making the advancement of Sustainable Aviation Fuels (SAFs) essential. In this context, research emerges as a fundamental tool for optimizing production methodologies and evaluating compounds with physicochemical properties similar to those of conventional kerosene. This study assesses the use of the B3LYP, M06-2X, M08-HX, G4, and G4-MP2 methods to determine energy-related properties, such as the enthalpy of combustion, of different organic molecules with high potential for SAF applications. Initially, the structures of organic molecules composed of carbon, hydrogen, and oxygen with known experimental enthalpy of combustion values were analyzed. The results are complemented by cycloparaffins synthesized from plant sources, which are promising candidates for SAF components due to their high energy content and suitable flash and freezing points. The results demonstrate that Percentage Relative Errors (PRE) tend to stabilize for molecules that release greater amounts of energy during combustion, and that the application of empirical corrections based on experimental data leads to a reduction in the Average Percentage Relative Error (APRE) across all tested theoretical methods. Additionally, the combustion enthalpy calculated using the M08-HX method shows an APRE comparable to that obtained with the G4-MP2 method, and when empirical corrections derived from experimental data of similar molecules are applied, the APRE approaches that of the composite G4 method. The B3LYP and M06-2X methods also show improved performance when empirical corrections are employed, indicating the viability of Density Functional Theory (DFT) methods for analyzing complex molecular structures at a significantly lower computational cost than that required by composite methods. Therefore, an in-depth investigation of these theoretical approaches applied to SAF molecules and aviation kerosene enables a more accurate determination of physicochemical properties, leading to more reliable analyses for the formulation of new fuels.

Key-words: Biofuels. Sustainable Aviation Fuels. DFT. G4 Methods. Thermochemistry.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - MODELO ESTRUTURAL (2D) DAS CICLOCETONAS FORMADO PELA CONDENSAÇÃO ALDÓLICA.	22
FIGURA 2 - MODELO ESTRUTURAL (2D) DOS CICLOPARAFINAS FORMADO APÓS A HIDRODESOXIGENAÇÃO.	23
FIGURA 3 - MODELO ESTRUTURAL (2D) DOS AROMÁTICOS FORMADOS NA CONDENSAÇÃO ALDÓLICA.	24
FIGURA 4 - GRÁFICO DOS ERROS RELATIVOS PERCENTUAIS PARA TODAS AS MOLÉCULAS CALCULADAS DO GRUPO TESTE.	34
FIGURA 5 - GRÁFICO DOS ERROS RELATIVOS PERCENTUAIS PARA TODAS AS MOLÉCULAS CALCULADAS DO GRUPO TESTE COM CORREÇÃO EMPÍRICA.	36
FIGURA 6 - GRÁFICO DOS ERROS RELATIVOS PERCENTUAIS PARA CICLOPARAFINAS CALCULADAS DO GRUPO TESTE.	37
FIGURA 7 - GRÁFICO DOS ERROS RELATIVOS PERCENTUAIS PARA CICLOPARAFINAS CALCULADAS DO GRUPO TESTE COM CORREÇÃO EMPÍRICA.	39

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – COMPOSIÇÃO E PROPRIEDADES TÍPICAS DOS QUEROSENES DE AVIAÇÃO.....	20
TABELA 2 - ENTALPIAS DE COMBUSTÃO TEÓRICO DO GRUPO TESTE.	31
TABELA 3 - ERROS PERCENTUAL RELATIVO MÉDIO E PERCENTIL OBTIDO PARA AS TEORIAS CALCULADAS.	34
TABELA 4 - ERROS PERCENTUAL RELATIVO E PERCENTIL OBTIDO PARA AS METODOLOGIAS CALCULADAS COM CORREÇÃO EMPÍRICA.	36
TABELA 5 - ERROS PERCENTUAL RELATIVO E PERCENTIL OBTIDO PARA AS METODOLOGIAS CALCULADAS PARA CICLOPARAFINAS CALCULADAS DO GRUPO TESTE.	38
TABELA 6 - ERROS RELATIVOS PERCENTUAIS MÉDIO OBTIDOS PARA AS METODOLOGIAS COM CORREÇÃO EMPÍRICA PARA CICLOPARAFINAS CALCULADAS DO GRUPO TESTE.....	39
TABELA 7 - TEMPO DE PROCESSAMENTOS (EM HORAS) DOS MÉTODOS ESTUDADOS.	40
TABELA 8 - ENTALPIAS DE COMBUSTÃO TEÓRICO DO CICLPARAFINAS-A.	41
TABELA 9 - ENTALPIAS DE COMBUSTÃO TEÓRICO DOS ISÔMEROS DAS CICLOPARAFINAS.....	44

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANP	Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
ATJ	<i>Alcohol-to-Jet</i>
CAEP	<i>Committee on Aviation Environmental Protection</i>
CC	<i>Coupled Cluster</i>
CE	Correção Empírica
CHJ	<i>Catalytic hydrothermolysis to Jet</i>
CI	<i>Configuration Interaction</i>
CSF	configuration state function
CORSIA	Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
ERP	Erros Relativos Percentuais
ERPM	Erros Relativos Percentuais Médio
FT	Fischer-Tropsch
GGA	<i>Generalized Gradient Approximation</i>
HEFA	<i>Hydroprocessed Esters and Fatty Acids</i>
HF	Hartree-Fock
H-GGA	<i>Hybrid Generalized Gradient Approximation</i>
HM-GGA	<i>Hybrid Meta Generalized Gradient Approximation</i>
ICAO	<i>International Civil Aviation Organization</i>
LDA	<i>Local Density Approximation</i>
LTAG	<i>Long-Term Aspirational Goal</i>
MCCSF	Multiconfigurational CSF
M-GGA	<i>Meta Generalized Gradient Approximation</i>
MME	Ministério de Minas e Energia
MPn	Møller-Plesset
MPOR	Ministério de Portos e Aeroportos
NDC	<i>Nationally Determined Contributions</i>
PM	Material Particulado
QAV	Querosene de Aviação
SAF	Sustainable Aviation Fuels
SIP	<i>Synthesized Iso-paraffins</i>
SPK	<i>Synthesized Paraffinic Kerosene</i>
WFT	<i>Wave Function Theories</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

E	<i>Energia</i>
$E_c[\rho(r)]$	<i>Funcional de correlação</i>
$E_x[\rho(r)]$	<i>Funcional de troca</i>
$E_{xc}[\rho(r)]$	<i>Funcional de troca-correlação</i>
H	<i>Operador Hamiltoniano</i>
H_{corr}	<i>Energia de correção térmica para entalpia</i>
$\Delta_c H^\circ$	<i>Variação de Entalpia padrão de combustão</i>
$\Delta_f H^\circ$	<i>Variação de Entalpia padrão de formação</i>
$\Delta_r H^\circ$	<i>Variação de Entalpia padrão de reação</i>
ϵ_0	<i>Energia eletrônica</i>
ϵ_{ZPE}	<i>Energia do ponto zero</i>
Ψ	<i>Função de onda</i>
$\rho(r)$	<i>Densidade eletrônica na posição r</i>

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	14
2. OBJETIVO	16
2.1 OBJETIVO GERAL	16
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	16
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
3.1 TRANSPORTE AÉREO.	17
3.2 COMBUSTÍVEIS PARA AVIAÇÃO.	18
3.2.1 <i>Biocombustíveis</i>	21
3.2.1.1 <i>Biocombustível de Condensados de Trímeros Cíclicos</i>	22
3.3 TERMOQUÍMICA.....	24
3.3.1 <i>Entalpia teórica (ΔH°_{teo})</i>	25
3.4 QUÍMICA QUÂNTICA	26
3.4.1 <i>Métodos ab initio</i>	27
3.4.2 <i>Teoria do Funcional de Densidade (DFT)</i>	27
3.4.3 <i>Trabalhos teóricos no estudo de moléculas energéticas</i>	29
4. DETALHES COMPUTACIONAIS.....	30
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	31
5.1 ENTALPIAS DE COMBUSTÃO DO GRUPO TESTE	31
5.2 ENTALPIAS DE COMBUSTÃO PARA PROVÁVEIS SAFs.	37
5.2.1 ENTALPIAS DE COMBUSTÃO PARA AS CICLPARAFINAS-A	41
6. CONCLUSÃO.....	45
7. PUBLICAÇÕES	46
8. REFERÊNCIAS.....	47

1. INTRODUÇÃO

A demanda global por moléculas energéticas cresce anualmente em função das necessidades dos setores industriais, transporte de cargas e passageiros e processos de geração de energia elétrica (Li; Fan; Wu, 2017; Raji *et al.*, 2025). Atualmente, esses compostos são obtidos predominantemente a partir de fontes fósseis (petróleo, gás natural e carvão mineral), e sua combustão gera uma diversidade de poluentes atmosféricos, como dióxido de carbono (CO₂), monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não queimados (HC), óxidos de nitrogênio (NO_x), dióxido de enxofre (SO₂) e material particulado (PM) (Alabaş; Albayrak Çeper, 2023; Li; Fan; Wu, 2017; Brasil, 2025a).

O transporte aéreo tem crescido continuamente devido à sua eficiência logística e custo operacional competitivo (Raji *et al.*, 2025; *Confederação Nacional do Transporte*, 2025), no entanto, os combustíveis de aviação como os querosene de aviação “JET-A” e “RP-3”, possuem suas produções predominantemente obtidos da extração petrolífera, representando um dos principais emissores de poluentes (Magalhães; Domingues, 2014; Brasil, 2025b). Diante desses impactos, a Organização da Aviação Civil Internacional (ICAO, do inglês — *International Civil Aviation Organization*) tem promovido acordos multilaterais entre países, por meio de protocolos e medidas de alcance nacional e internacional, com o objetivo de reduzir progressivamente as emissões de gases poluentes gerados pela aviação civil (Brasil, 2025a; *International Civil Aviation Organization*, 2023).

Uma forma de reduzir a poluição no setor da aviação é o uso de Combustíveis Sustentáveis de Aviação (SAF, do inglês *Sustainable Aviation Fuels*) (*Confederação Nacional do Transporte*, 2025; Watson *et al.*, 2024), que são combustíveis líquidos para aviação produzidos a partir de fontes renováveis ou de baixo impacto de carbono, projetados para substituir parcial ou totalmente o querosene fóssil de aviação (*Confederação Nacional do Transporte*, 2025), mantendo compatibilidade técnica com aeronaves, motores e infraestrutura existentes. Para produção dos SAF as metodologias devem seguir os parâmetros definidas pela norma ASTM D7566 (ASTM *International*, 2024b), que define métodos de produção, parâmetros da qualidade e segurança dos Querosene Sintetizados (*Confederação Nacional do Transporte*, 2025).

Os principais produtos obtidos das metodologias SAF são hidrocarbonetos lineares, cíclicos e aromáticos podendo conter diferentes ramificações nas estruturas moleculares, que alteram o ponto de fusão e fulgor, além da densidade energética volumétrica e cinética de reação

(Sacia *et al.*, 2015; LI, Jian *et al.*, 2026). Para otimizar as características físico-químicas dos SAF, é possível utilizar misturas de diversas moléculas produzidas de forma sintética, além da aditivação com anticongelantes, anticorrosivos e estabilizantes oxidativos, mantendo as características necessárias para segurança e eficiência dos motores a jato (Moraes, 2018; Talibi; Hellier; Ladommatos, 2018; Vasquez-Aguirre *et al.*, 2022; Waluyo *et al.*, 2021).

A investigação dessas moléculas dentro de composições contendo grande variedade de estruturas demanda alto custo, portanto, estudos recentes vem aprimorando metodologias teóricas para avaliar a estabilidade estrutural molecular, as características de combustão e as tendências na formação de poluentes de biocombustíveis para aplicação prática em motores reais (Dandu *et al.*, 2023; WANG, Hongyan *et al.*, 2025). Os cálculos teóricos ou químico quânticos são obtidos por métodos que inserem composições de uma ou mais funções de onda (métodos *ab initio* e compostos), métodos baseados na Teoria do Funcional de Densidade (DFT), e métodos de funcionais híbridos que mistura parte do funcional de troca Hartree-Fock com funcionais de troca e correlação dos métodos da DFT (Dandu *et al.*, 2022; Karton *et al.*, 2025).

O desempenho dos métodos da DFT depende da propriedade analisada, que pode ser relacionada com os parâmetros utilizados em cada método. O Funcional B3LYP foi bastante utilizado devido seu tempo de uso e precisão para cálculos de geometrias moleculares (Sousa; Fernandes; Ramos, 2007). Atualmente métodos mais sofisticados como M06-2X, M08-HX são alternativas que abrange múltiplos parâmetros que melhora a acurácia para entalpias, energia de reação, cinética e interações não covalentes (Zhao; Truhlar, 2008ab).

Neste contexto, a química teórica por meio dos métodos computacionais podem ser usados para demonstrar o comportamento prévio das energias de combustão, com nível de acurácia próximas ao experimental e assim fornecer informações importantes para aplicações em combustíveis de aviação (Miao *et al.*, 2020; Amorim da Silva *et al.*, 2024; Grotto *et al.*, 2020).

2. OBJETIVO

2.1 Objetivo geral

Realizar cálculos teóricos das propriedades termoquímicas dos Querosenes de Aviação (QAV) e Combustíveis Sustentáveis de Aviação (SAF), utilizando os métodos B3LYP, M06-2X, M08-HX, G4 e G4-MP2, para avaliação comparativa de desempenho energético.

2.2 Objetivos Específicos

- I. Levantar dados sobre a composição molecular dos QAV e SAF, identificando as semelhanças para aplicação como combustíveis para jatos;
- II. Executar cálculos teóricos das moléculas selecionadas, determinando propriedades termodinâmicas e energéticas relacionadas à combustão;
- III. Comparar o desempenho dos métodos para diferentes grupos orgânicos, avaliando a precisão e viabilidade computacional.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Tendo em vista as metas estabelecidas pela Organização da Aviação Civil Internacional (ICAO, do inglês — *International Civil Aviation Organization*) para redução da emissão de poluentes e desenvolvimento sustentável de combustíveis alternativos (*International Civil Aviation Organization*, 2023) são apresentados na fundamentação teórica, tópicos relacionados à importância da utilização dos biocombustíveis aeronáuticos, assim como a composição molecular, reações de combustão e propriedades físico-químicas (Sacia *et al.*, 2015; Moraes, 2018). Também é apresentada uma breve descrição de métodos da química teórica que foram utilizados para a previsão das propriedades termoquímicas (Mardirossian; Head-Gordon, 2017; Karton, 2025; Ochterski, 2000).

3.1 Transporte Aéreo.

O transporte aéreo civil está em constante crescimento devido a agilidade e redução do custo de operação em comparação aos demais meios de transporte (Raji *et al.*, 2025; Li; Fan; Wu, 2017). Entretanto, o aumento da demanda por voos nacionais e internacionais eleva o consumo de combustíveis (Liu *et al.*, 2020; Raji *et al.*, 2025; *Confederação Nacional do Transporte*, 2025) e emissão de poluentes como o dióxido de carbono (CO₂), resultante da combustão completa da matéria orgânica; os monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não queimados (HC) e os materiais particulados (PM), formados devidos a diversas condições na câmara de combustão; dentre outros gases como os óxidos de nitrogênio (NO_x) formado pela reação entre o nitrogênio e oxigênio do ar sob altas temperaturas (Alabaş; Albayrak Çeper, 2023; Li; Fan; Wu, 2017; Brasil, 2025a).

Nesse contexto, a ICAO foi criada com o objetivo de promover acordos entre os países, que por meio de protocolos e medidas nacionais e internacionais garantam a redução progressiva das taxas dessas emissões ao meio ambiente (*International Civil Aviation Organization*, 2025a; Brasil, 2023). Após o Protocolo de Kyoto (1997) e o Acordo de Paris (2016), foi designado pelo Comitê de Proteção Ambiental da Aviação (CAEP, do inglês — *Committee on Aviation Environmental Protection*) as Contribuições Nacionalmente Determinadas (NDC, do inglês — *Nationally Determined Contributions*), incentivando os países envolvidos a se comprometerem a utilizar diretrizes específicas para aviação doméstica, que são medidas que visam limitar o aquecimento global a menos de 2 graus Celsius acima dos

níveis pré-industriais (Brasil, 2002; *International Civil Aviation Organization*, 1944; *International Civil Aviation Organization*, 2025b,c; Brasil, 2025c).

A OACI também adotou o mecanismo conhecido como Esquema de Compensação e Redução de Carbono para Aviação Internacional (CORSIA, do inglês — *Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation*), estabelecendo a compensação da emissão de poluentes por meio dos créditos de carbono (*International Civil Aviation Organization*, 2025a; Brasil, 2024) e a Meta Aspiracional De Longo Prazo (LTAG, do inglês — *Long-Term Aspirational Goal*) que tem como objetivo zerar as emissões líquidas de carbono da aviação civil internacional até 2050 (*International Civil Aviation Organization*, 2025d). Esses acordos estimulam tecnologias sofisticadas que melhoram a eficiência das aeronaves além da produção de Combustíveis Sustentáveis de Aviação (SAF, do inglês — *Sustainable Aviation Fuel*) (Brasil, 2025; *Confederação Nacional do Transporte*, 2025; Jin *et al.*, 2025; Timko *et al.*, 2011).

No Brasil o CORSIA foi internalizado por meio da Resolução Anac nº 743 de 15 de maio de 2024, que a partir de 2027 incluirá dentro do grupo de rotas internacionais que tenham como origem ou destino aeroportos brasileiros a obrigação da compensação do esquema (Brasil, 2024; Brasil, 2024). Junto a Lei nº 14.993, de 8 de outubro de 2024 (Brasil, 2024), que instituiu o Programa Nacional de Combustível Sustentável de Aviação, este normativo estabelece obrigações a partir de 2027 para a redução de gases do efeito estufa nas operações aéreas domésticas com o uso de SAF. Essas medidas estimularam esforços de diversos órgãos como a Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), Ministério de Minas e Energia (MME) e o Ministério de Portos e Aeroportos (MPOR) (Brasil, 2023; *Confederação Nacional do Transporte*, 2025).

As indústrias brasileiras possuem vantagens competitivas nessa área por apresentar conhecimento científico obtido em órgãos de Pesquisa, o que favorece a implementação de tecnologias para produção de insumos e biocombustíveis (Barreto *et al.*, 2025; Moreira; Pasa, 2020). Além de conter diversas matrizes energéticas sustentáveis e renováveis distribuídas no país (Barreto *et al.*, 2025; Moreira; Rezende; Pasa, 2020), o setor está sendo estimulado a aumentar a produção de combustíveis alternativos para jatos a partir de 2027, sendo estipulada a produção em torno de 900 mil toneladas por ano (Queiroz, 2025).

3.2 Combustíveis para Aviação.

Os combustíveis aeroespaciais são fontes de energia química gerada a partir da explosão controlada em motores de propulsão, resultando no movimento de aeronaves, foguetes ou mísseis (Li; Fan; Wu, 2017; Mikalsen; Roskilly, 2007; Bayramoğlu; Nuran, 2024). Na aviação é utilizado principalmente a gasolina de aviação (GAV) e querosene de aviação (QAV), que são misturas contendo principalmente hidrocarbonetos incluindo n-parafinas, iso-parafinas, cicloparafinas, aromáticos e olefinas (*Confederação Nacional do Transporte*, 2025, 2025; Wang *et al.*, 2021; Brasil, 2022). Além dessas moléculas são encontrados aditivos como anticogelantes, antioxidantes, lubrificantes, biocidas, estabilizantes e corantes (Modereger *et al.*, 2021; *Agency for Toxic Substances and Disease Registry*, 2017; Huang *et al.*, 2025; *ASTM International*, 2022).

A aviação civil mundial depende quase exclusivamente dos querosenes derivados do petróleo, sendo os combustíveis mais utilizados os JET-A e JET-A1 (*Agency for Toxic Substances and Disease Registry*, 2017; *ASTM International*, 2022), além desses pode-se citar o RP-3 predominante utilizado na China, tornando sua composição e combustão amplamente investigadas (Wang *et al.*, 2024; China, 2022). Em voos militares que apresentam missões com maiores riscos operacionais devido as condições aéreas, temperaturas extremas e atividades complexas como o abastecimento a bordo de porta-aviões, são utilizados aditivos que melhoram as características térmicas e corrosivas, dentre os exemplos mais comum dos querosenes estão os JP-5 e JP-8 (Moraes, 2018; *Agency for Toxic Substances and Disease Registry*, 2017; Lamprecht, 2007).

A composição molecular dos combustíveis de aviação está sujeita a variações significativas devido fatores como a origem do petróleo, processamento refinário e a degradação durante o armazenamento (Modereger *et al.*, 2021). Para garantir qualidade, desempenho e segurança operacional, as características químicas e físico-químicas dos combustíveis de aviação são regulamentadas por agências normativas internacionais (Brasil, 2025; *ASTM International*, 2024; Brasil, 2021; China, 2022), sendo ASTM referência mundial para as normas de diversos produtos. Em destaque as especificações dos querosenes de aviação convencionais derivada do petróleo (JET-A e JET-A1) é obtido na normativa ASTM D1655 (*ASTM International*, 2024a); para a aprovação dos SAFs, assim como as misturas permitidas junto ao querosene é utilizado as especificações da ASTM D7566 (*ASTM International*, 2024b) e para a qualificação de aditivos a ASTM D4054 (*ASTM International*, 2023).

O controle de qualidade e a certificação dos combustíveis de aviação baseiam-se na avaliação de um conjunto crítico de propriedades físico-químicas, que estão diretamente relacionadas ao desempenho e à segurança operacional, dentre as principais, destacam-se o ponto de fusão, ponto de fulgor, curva de destilação, densidade, viscosidade, poder calorífico, estabilidade térmica e velocidade de combustão (Brasil, 2022; Modereger *et al.*, 2021; Agency for Toxic Substances and Disease Registry, 2017; ASTM International, 2022). A Tabela 1 evidencia algumas propriedades e porcentagens de QAV dos combustíveis de aviação.

Tabela 1 – Composição e propriedades típicas dos querosenes de aviação.

QAV	RP-3	Jet-A	JP-4	JP-5	JP-7	JP-8	RG-1
Parafinas (vol%)	67	57	59	45	3	60	8
Cicloparafinas (vol%)	17	20	29	34	32	20	86
Aromáticos (vol%)	14	20	10	19	65	18	5
Olefinas (vol%)	–	–	2	2	–	2	–
Estequiometria	C ₁₂ H ₂₃	C ₁₀ H ₂₀	C ₈ H ₁₇	C ₁₂ H ₂₂	C ₁₂ H ₂₅	C ₁₁ H ₂₁	C ₁₂ H ₂₃
Ponto de fulgor (°C)	45	47	-23	64	60	41	71
Ponto de congelamento (°C)	-58	-49	-62	-49	-44	-51	-47
Início da destilação (°C)	167	158	24	<195	<208	152	195
50 % vol. (°C)	201	213	131	213	218	198	235
90 % vol. (°C)	235	248	208	–	239	239	260

Fonte: Adaptado de Wang (2021).

As temperaturas utilizadas nas curvas de destilação afetam a concentração dos componentes no combustível, alterando as propriedades termoquímicas do querosene, exemplo desse processo é o JP4 (Tabela 01) que resulta em temperatura de fulgor próximos de -23 °C, portanto é crucial a obtenção ideal das temperaturas desse processo (Wang *et al.*, 2021). O ponto de fulgor é um parâmetro fundamental de segurança, definido como a temperatura mínima na qual os vapores do combustível se tornam inflamáveis na presença de uma fonte de ignição, portanto, seu controle rigoroso é crucial para prevenir riscos de incêndio durante o manuseio, armazenamento e operação (Modereger *et al.*, 2021; Wang *et al.*, 2021). Já o ponto

de fusão fora do padrão, possibilitando à formação de cristais de gelo ou aumento excessivo da viscosidade, prejudicando o escoamento do tanque para o motor e dificultando a atomização e vaporização do combustível, resultando em atrasos na ignição e combustão incompleta (ASTM International, 2024a; Zhao *et al.*, 2022).

3.2.1 Biocombustíveis.

Os biocombustíveis são moléculas energéticas obtidas pela biotransformação ou conversão sintética da biomassa, formando moléculas com reatividade otimizada para utilização em motores de combustão (Barreto *et al.*, 2025; Moreira; Rezende; Pasa, 2020). Esses compostos são comumente classificados em cinco gerações que refletem diretamente a complexidade tecnológica dos processos de produção e o tipo de matéria-prima associada. Os biocombustíveis de primeira geração são produzidos a partir de cultivos alimentares convencionais; de segunda geração utiliza biomassa lignocelulósica, enquanto as de terceira, quarta e quinta gerações empregam matérias-primas mais avançadas, como microalgas e microrganismos geneticamente modificados (Padder *et al.*, 2024).

A biomassa lignocelulósica se destaca como matéria-prima promissora para a produção de Combustíveis Sustentáveis, devido ao grande volume obtido em cultivo, além de poder ser gerado do subproduto de resíduos alimentícios, agrícolas e florestais (Watson *et al.*, 2024; Confederação Nacional do Transporte, 2025). Sua composição é estruturalmente complexa, sendo formada principalmente pelos polissacarídeos celulose e hemicelulose, e pelos polímeros de lignina (Wagle *et al.*, 2022). Para viabilizar sua conversão, é necessária uma combinação de processos físicos, químicos, físico-químicos e bioquímicos, capazes de desconstruir essa matriz recalcitrante, liberando estruturas reduzidas ou intermediários termoquímicos, que servem como precursores para rotas químicas ou bioquímicas específicas na síntese de diferentes SAF (Sacia *et al.*, 2015; Wagle *et al.*, 2022). Os principais desafios nesse processo residem no alto custo operacional dos tratamentos iniciais das diversas composições da biomassa, que varia significativamente entre espécies vegetais, exigindo processos adaptativos e robustos para garantir eficiência e viabilidade econômica (Wagle *et al.*, 2022; Padder *et al.*, 2024).

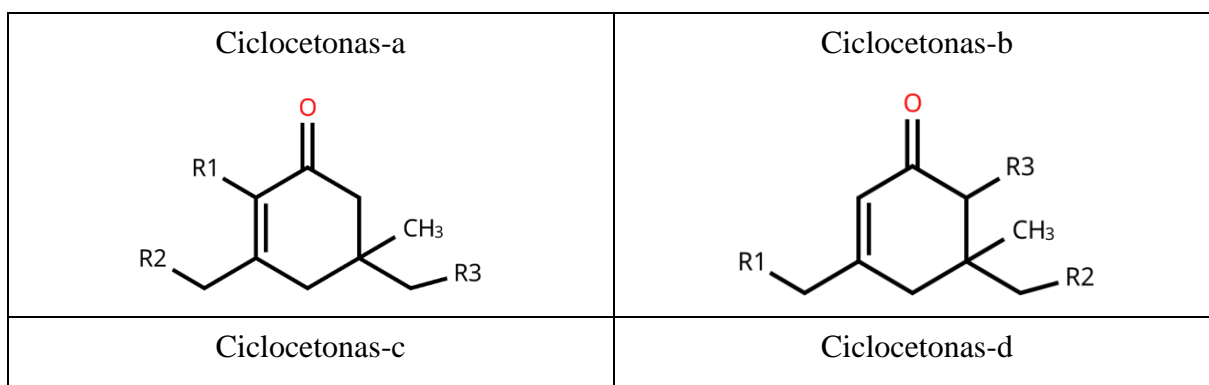
A normativa ASTM D7566 determina os padrões das composições e propriedades físico-químicas para produção de SAF, dentre eles é citado o Querosene Parafínico Sintetizado de Ésteres e Ácidos Graxos Hidroprocessados (SPK/HEFA), produzido a partir do hidroprocessamento que remove o oxigênio de triglicerídeos em hidrocarbonetos parafínicos

lineares; Querosene Parafínico Sintetizado HEFA com Hidrocarbonetos (SPK/HC-HEFA), variação do processo HEFA que permite o processamento de matérias-primas oleaginosas com hidrocarbonetos, visando aumentar a flexibilidade e a escala de produção; Querosene Parafínico Sintetizado Fischer-Tropsch (SPK/FT), processo que converte gás de síntese em hidrocarbonetos de cadeia longa; Querosene Parafínico Sintetizado Fischer-Tropsch com Aromático (SPK/FT-A), obtido a partir do processo Fischer-Tropsch com adição de aromáticos; Querosene Parafínico Sintetizado de Álcool Para Aviação (SPK-ATJ), obtido a partir da desidratação do etanol ou butanol, passando por oligomerização, hidrogenação e fracionamento; Querosene de Isoparafinas Sintetizadas (SIP), converte açúcares em hidrocarbonetos com ramificações; Querosene de Hidrotermólise Catalítica para Jato (CHJ), utiliza processo água em alta pressão e temperatura para transformar biomassa em parafinas ou cicloparafinas e aromáticos (Confederação Nacional do Transporte, 2025; ASTM *International*, 2022; Yohannes; Gates, 2026).

3.2.1.1 Biocombustível de Condensados de Trímeros Cíclicos.

Diversas metodologias foram desenvolvidas objetivando a obtenção de bioquerosenes com menor custo e maior eficiência. Um exemplo dessas pesquisas é a Condensação altamente seletiva de cetonas derivadas de biomassa, desenvolvido por Sacia *et al.* (2015) que possibilita a produção de diferentes parafinas, cicloparafinas e aromáticos de 12 até 21 carbonos (Sacia *et al.*, 2015), Figura 1.

Figura 1 - Modelo estrutural (2D) das ciclocetonas formado pela condensação aldólica.





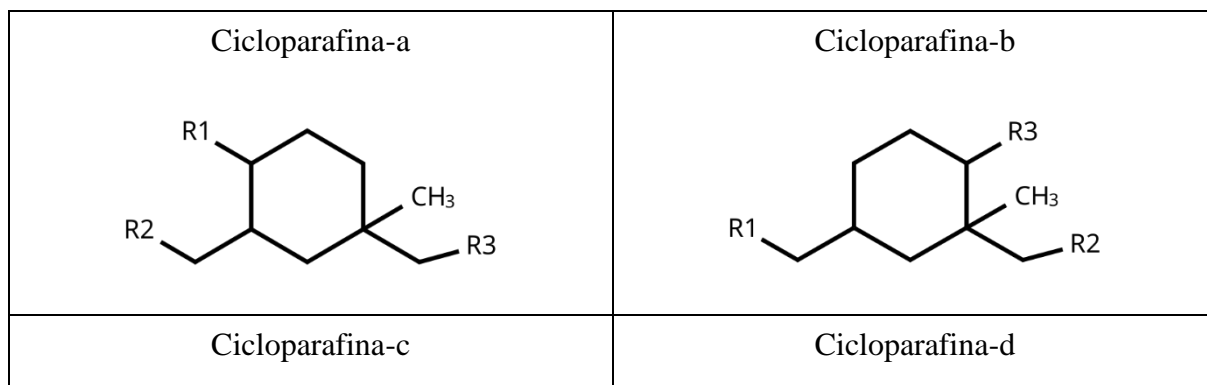
Fonte: Adaptado de Sacia *et al.* (2015).

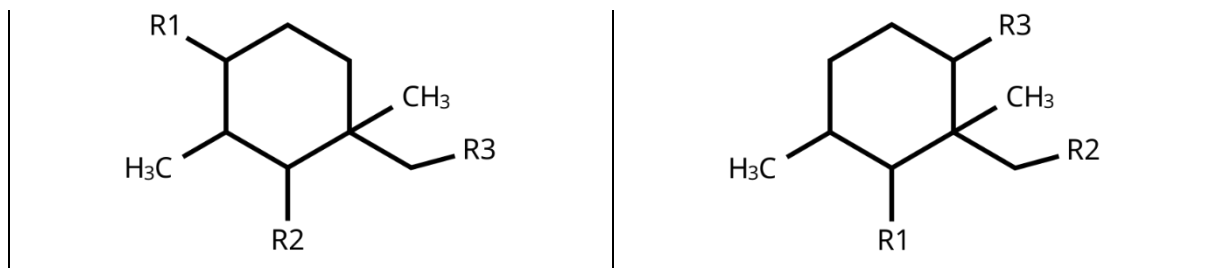
Esses biocombustíveis são formados pela sequência de vias químicas e bioquímicas, que transforma a celulose ou hemicelulose em 2-butanona, 2-pentanona, 2-hexanona e 2-heptanona, que são precursores da condensação aldólica catalisada por Hidrotalcita Calcificada (Mg-Al-O), que após a ciclização forma cetonas semelhantes a isoforona (Figura 1), apresentando 3 grupos R em locais distintos dos carbonos do anel principal (Sacia *et al.*, 2015).

O resultado das diferentes rotas químicas da condensação, são cetonas cíclicas que em ensaios de cromatografia gasosa indicaram a formação principalmente da Ciclocetonas-a (formação de 53% até 84% dependendo da metil cetona utilizada) seguido da Ciclocetonas-b (produção de 10% até 33%). As Ciclocetonas-c obtiveram produtos apenas da reação com 2-butanona (produção de 6%) e as Ciclocetonas-d não obtiveram quantidade significativos de produtos.

Para remover a insaturação e o grupo carbonila da molécula de ciclocetona, foi empregado um processo de hidredesoxigenação utilizando o catalisador bifuncional platina suportada em fosfato de nióbio oxigenado (Pt/NbOPO₄) em que a reação converteu o substrato oxigenado em cicloparafinas (Figura 2).

Figura 2 - Modelo estrutural (2D) dos cicloparafinas formado após a hidredesoxigenação.

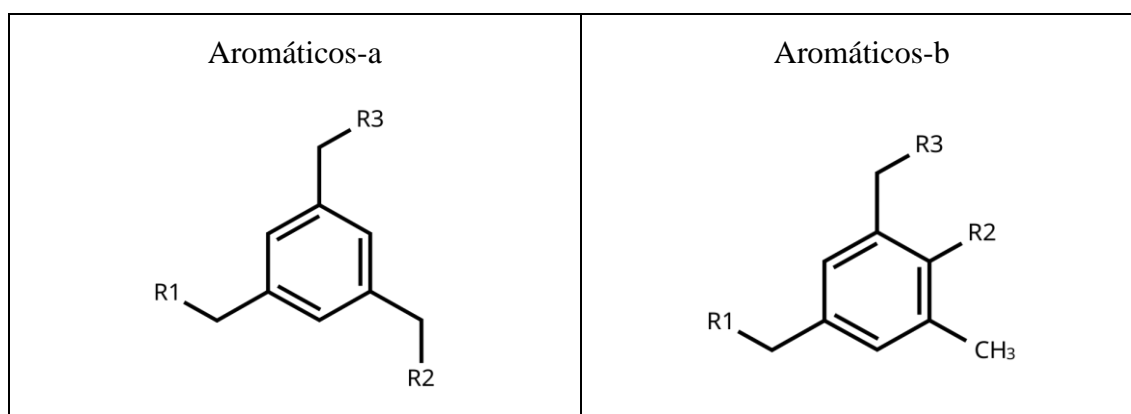




Fonte: Adaptado de Sacia *et al.* (2015).

Dentre cada produto de Cicloparafinas ocorre a modificação do grupos R em metil, etil, propil ou butil, possibilitando a formação de 64 moléculas diferentes, além dessas é possível formar compostos aromáticos (Figura 3) via reação catalisada por ácidos (Sacia *et al.*, 2015). Essas moléculas reduzem a temperatura de congelamento, reduzem o impacto corrosivo das demais moléculas, porém são relacionadas a questões de aumento de fuligem na combustão (Voigt *et al.*, 2021; Xu *et al.*, 2025).

Figura 3 - Modelo estrutural (2D) dos aromáticos formados na condensação aldólica.



Fonte: Adaptado de Sacia *et al.* (2015).

Os produtos obtidos apresentaram propriedades adequadas para uso como componente de combustível de aviação, destacando uma densidade energética de 47 MJ kg^{-1} e um ponto de fusão inferior a $-100 \text{ }^\circ\text{C}$, além de outras propriedades estabelecidos pela normativa ASTM D7566 (Sacia *et al.*, 2015).

3.3 Termoquímica

Termoquímica é uma subárea da físico-química que estuda a transferência de calor em sistemas químicos, esses valores podem ser obtidos de forma experimental por determinações

calorimétricas, onde se conhece os componentes do sistema; esses experimentos podem determinar a energia absorvida ou liberada dentro das reação químicas (Castellan, 1986).

Uma forma de analisar os calores obtidos desses experimentos, é aplicar a Lei de Hess, sendo a variação de entalpia do processo igual à soma das variações de entalpia das etapas, portanto, a variação da Entalpia de reação ($\Delta_r H^\circ$) em um sistema com condições físicas padrão (geralmente com 1 bar de pressão e soluções com concentração de 1 molar e temperatura de 298,15 K) pode ser descrito na Equação 1:

$$\Delta_r H^\circ = \sum_{\text{produtos}} \Delta_f H^\circ - \sum_{\text{reagentes}} \Delta_f H^\circ , \quad \text{Eq.1.}$$

em que a $\Delta_r H^\circ$ é a diferença energética das entalpias de formação em condições padrão ($\Delta_f H^\circ$) dos produtos pelos reagentes. As entalpias de formação são obtidas a partir da soma da energias dos elementos livres em seus estados mais estáveis, esses valores são registrados em livros, artigos e bancos de dados, o que possibilita estudos das propriedades químicas de substâncias (Karton, 2025; Atkins; De Paula, 2018; Yaws, 1997). Essa equação é útil no estudo de reações químicas, como mecanismo de reação, energia de dissociação de ligação e entalpia de combustão.

3.3.1 Entalpia teórica ($\Delta H^\circ_{\text{teo}}$).

Embora experimentalmente só seja possível medir diferenças de energias entre estados, teoricamente é possível calcular a energia absoluta de moléculas em um dado estado. Dessa forma, as entalpias de cada substância podem ser obtidas teoricamente ao aplicar resultados dos cálculos químicos computacionais (Mardirossian; Head-Gordon, 2017; Karton, 2025; Ochterski, 2000). As Entalpias de reação Teóricas ($\Delta_r H^\circ_{\text{teo}}$) podem ser calculadas utilizando a Equação 2:

$$\Delta_r H^\circ(298 \text{ K}) = \sum_{\text{produtos}} (H_{298}) - \sum_{\text{reagentes}} (H_{298}) ,$$

$$\Delta_r H^\circ(298 \text{ K}) = \sum_{\text{produtos}} (\epsilon_0 + H_{\text{corr}}) - \sum_{\text{reagentes}} (\epsilon_0 + H_{\text{corr}}) , \quad \text{(Eq.2)}$$

Em que a entalpia de cada produto ou reagente (H_{298}) é dada pela soma da energia eletrônica (ε_0) com a correção térmica para entalpia (H_{corr}) (Ochterski, 2000).

Como as entalpias são funções de estado, pode-se utilizar diferentes rotas, que tenham o mesmo estado inicial (reagente) e final (produto), para obter variações de entalpia de interesse. Uma forma prática de se obter a entalpia de formação teórica de moléculas é através da entalpia de atomização dessas espécies subtraídas da entalpia de atomização dos elementos no estado padrão, sendo que essa última contribuição é dada por valores experimentais. As Entalpias de formação Teórica $\Delta_f H^\circ_{teo}$ (0 K) são calculadas a partir da Equação 3:

$$\Delta_f H^\circ(M, 0 \text{ K}) = \varepsilon_0(M) + \varepsilon_{ZPE}(M) - \sum_X x \varepsilon_0(X) + \sum_X x \Delta_f H^\circ(X, 0K), \quad (\text{Eq.3})$$

em que (M) representa os valores para molécula, (X) os valores das espécies atômicas, (ε_{ZPE}) a energia do ponto zero da molécula e $\Delta_f H^\circ(X, 0K)$ são os valores experimentais recomendados para os calores de formação dos elementos atômicos.

E as $\Delta_f H^\circ_{teo}$ (298 K) são obtidas pela Equação 5:

$$\Delta_f H^\circ(M, 298 \text{ K}) = \Delta_f H^\circ(M, 0 \text{ K}) + H_{corr}(M) - \sum_X x (H^\circ_X(298K) - H^\circ_X(0K)), \quad (\text{Eq.5})$$

o termo $(H^\circ_X(298K) - H^\circ_X(0K))$ é o valor utilizada para corrigir a diferença de temperatura (Ochterski, 2000).

3.4 Química quântica

A química quântica é fundamentada na investigação das estruturas eletrônicas dos elementos químicos, moléculas e sólidos, portanto se baseia na mecânica quântica para descrever a distribuição eletrônica, e assim entender as propriedades químicas (Piela, 2007; Hargittai, 2025; Karton, 2022). Os estudos de Erwin Schrödinger sobre a mecânica ondulatória, possibilitou a descrição da equação generalista ($H\Psi = E\Psi$), que deu início ao desenvolvimento de métodos teóricos (Piela, 2007; Hargittai, 2025; Karton, 2022).

O desenvolvimento dos cálculos teóricos em computadores foi um passo crucial na aplicação desses métodos. Um exemplo foi o desenvolvimento do programa Gaussian, pelo

grupo de John Pople, que implementou de forma padronizada diversos métodos semiempíricos e *ab initio*, utilizando funções de base gaussianas. Essa abordagem permitiu reduzir o custo computacional e aumentar a quantidade de átomos dos sistemas estudados, tornando o programa amplamente utilizado por químicos em diversas áreas de atuação (Karton, 2025; Hargittai, 2025; Karton, 2022).

3.4.1 Métodos *ab initio*

Os métodos teóricos têm origem no método proposto por Douglas Hartree (Semidalas; Boese; Martin, 2025; Hartree, 1928), posteriormente aprimorado por Fock e Slater (1930) (Pratt, 1956), resultando na teoria Hartree–Fock (HF). A partir desse método, foram desenvolvidos diversos métodos pós-Hartree–Fock, como as de Perturbação de Møller–Plesset (MPn), *Configuration Interaction* (CI), métodos Coupled Cluster (CC), e os métodos multiconfiguration-SCF (CASSCF) (Karton, 2022; Castagnola *et al.*, 2025; Sousa; Fernandes; Ramos, 2007). Esses métodos permitem aproximar a solução da equação de Schrödinger eletrônica de forma sistemática.

Os métodos compostos usam cálculos de várias etapas para realizar correções sucessivas, de forma aditivas nas propriedades do sistema. Tiveram origem com o desenvolvimento dos métodos compostos Gaussian (Gn) (Curtiss; Redfern; Raghavachari, 2011), que combinam níveis das teorias *ab initio* para obter propriedades químicas precisas, em que seu custo depende da combinação dos níveis teóricos (Karton, 2025). A partir dessa ideia surgiram outros exemplos, dentre elas as Teorias W_n ganham destaque por apresentar alta precisão, porém seu uso é restrito a pequenos grupos moleculares (Karton, 2025; Karton *et al.*, 2006; Silva *et al.*, 2022).

Os métodos *ab initio* podem alcançar acurácia próxima à experimental, sua restrição pode ser relacionada ao custo do processamento, pois as funções de onda são baseadas na quantidade de interações entre elétrons em sua estrutura molecular (Karton, 2025; Hargittai, 2025; Karton, 2022). Essa questão está sendo minimizada com o desenvolvimento de métodos teóricos aprimorados, evolução das unidades de processamento (CPU, GPU e QPU) além da aplicação de metodologias empregando inteligência artificial (Karton, 2025; Piela, 2007; Luise *et al.*, 2025).

3.4.2 Teoria do Funcional de Densidade (DFT)

A Teoria do Funcional de Densidade (DFT) foi fundamentada por Hohenberg e Kohn (Kohn; Hohenberg, 1964), que demonstraram que a energia do sistema (estado fundamental) é um funcional universal de densidade. Kohn e Sham (Kohn; Sham, 1965) propuseram um sistema de equações que introduz elétrons não interagentes para reproduzir a densidade eletrônica real, o que possibilitou a obtenção de soluções práticas usando aproximações para os termos desconhecidos do funcional densidade, com a possibilidade de tratar sistemas moleculares com maior quantidade de átomos e elétrons. No entanto, como a acurácia depende dos funcionais utilizados, não existe uma forma sistemática geral para aprimorar tais funcionais, os resultados obtidos por DFT podem levar a erros maiores quando comparados aos métodos *ab initio* (Karton, 2025; Sousa; Fernandes; Ramos, 2007).

A diversificação de métodos DFT está relacionado a definição dos funcionais de troca-correlação ($E_{XC}[\rho(r)]$). Estes podem ser divididos em puros, que contém apenas um funcional de troca ($E_X[\rho(r)]$) e um funcional de correlação ($E_C[\rho(r)]$), e híbridos, que adicionam uma porcentagem da energia de troca HF. Também podem ser classificados em termos da expansão em série do funcional densidade, existindo a aproximação de densidade local (LDA), Aproximação de Gradiente Generalizado (GGA) e Meta Gradiente Generalizado (M-GGA) (Mardirossian; Head-Gordon, 2017; Sousa; Fernandes; Ramos, 2007).

Dentre a diversidade de métodos DFT, é necessário a análise criteriosa, pois sua eficiência depende da propriedade química analisada. O funcional B3LYP (H-GGA) se destacou no final dos anos 90 por apresentar boa descrição de variações de energia de sistemas em equilíbrio. Nos primeiros anos do século XXI os funcionais do grupo de D.G. Truhlar se destacaram, dentre eles os Meta-GGA híbridos M06-2X e M08-HX, que oferecerem descrições precisas para diversas propriedades, incluindo interações não-covalentes e calores de reação (Mardirossian; Head-Gordon, 2017; Piela, 2007; Sousa; Fernandes; Ramos, 2007; Luise *et al.*, 2025).

Recentemente vêm sendo desenvolvidos funcionais utilizando *Deep Learning* para treinar modelos e prever componentes de troca-correlação ou energias a partir de dados de referência, esses funcionais construídos usando tais procedimentos, podem contribuir para o desenvolvimento de aproximações com maior acurácia e precisão. Tais funcionais, como o Skala (Luise *et al.*, 2025) utiliza essa abordagem de desenvolvimento, apresentando resultados que podem ser otimizados conforme a coleta de dados para o aprendizado, esses resultados podem auxiliar em estudos mais precisos de sistemas moleculares e materiais.

3.4.3 Trabalhos teóricos no estudo de moléculas energéticas.

Dentre os estudos sobre propriedades energéticas de materiais para combustão pode-se citar o realizado por Lopes Grotto (2022), que utilizou o funcional híbrido B3LYP com o conjunto de base 6-31+G (d,p) para análise de cálculos estruturais e energéticos da biomassa de arroz geneticamente modificado na qual obteve a entalpia de combustão para a estrutura estudada (Grotto *et al.*, 2020). Zongcheng Miao estudou a energia de explosão e estabilidade cinética de diversos compostos semelhantes ao Trinitrotolueno (TNT), por métodos DFT B3LYP e M06-2X com conjunto de base 6-311G++ (d,p) (Miao *et al.*, 2020).

Hudzik e Bozzelli (2012) compararam métodos compostos (CBS-QB3 e G3MP2B3) com os DFT (B3LYP/6-31G(d,p), B3LYP/6-311G(2d,2p)), utilizando reações isodésmicas para minimizar erros de cálculo da investigação da entalpia de formação ($\Delta_f H^\circ$) e energia de dissociação de ligação (BDE) de cetonas, obtendo desvios teóricos inferiores a 1 Kcal mol⁻¹ (Hudzik; Bozzelli, 2012). Oyeyemi, Keith e Carter (2014) estudaram a energia de dissociação de ligação (BDE) da ligação (C1-C4) referentes a álcoois e aldeídos, utilizando métodos DFT-B3LYP e CCSD(T), em que a energia de dissociação é mais fraca nas ligações C-H e C-C alfa dos álcoois, e as ligações mais fracas dos aldeídos ocorrem no C-H e C-C beta (Oyeyemi; Keith; Carter, 2014).

Recentemente, observa-se a proliferação de bancos de dados contendo resultados teóricos e experimentais para conjuntos de estruturas moleculares, Dandu *et. al* (2022) por meio de análises dos métodos compostos G4 e G4MP2, utilizaram parâmetros atômicos para melhorar os resultados da entalpia de formação dos grupos de moléculas analisados. A integração sistemática desses dados com técnicas de *machine learning* tem o potencial de acelerar significativamente o estudo de bibliotecas moleculares, permitindo a descrição mais precisa de propriedades relevantes para diversas áreas, como medicina, meio ambiente, indústria, agronomia e energia (Karton, 2025; Goldsmith; Magoon; Green, 2012; Luise *et al.*, 2025).

4. DETALHES COMPUTACIONAIS

As geometrias moleculares dos biocombustíveis e Grupo Teste do estudo foram construídas no programa GaussView (GAUSSVIEW, 2009). Os cálculos de estrutura eletrônica incluindo minimização de energia e frequências vibracionais foram realizados no programa Gaussian 16 (Frisch *et al.*, 2016). Foram empregados os métodos baseados na Teoria do Funcional de Densidade (DFT – *Density Functional Theory*), B3LYP (Pielka, 2007), M06-2X (Zhao; Truhlar, 2008b) e M08-HX (Zhao; Truhlar, 2008a), com o conjunto de função de base 6-311++G(d,p). Os métodos compostos G4 (Curtiss; Redfern; Raghavachari, 2007) e G4MP2 (Dandu *et al.*, 2022) também foram utilizados devido sua alta acurácia.

Todos os cálculos foram realizados em um único nó contendo 4 núcleos do cluster, equipado com Processador Intel® Xeon® E5-2609 com 64 GB RAM.

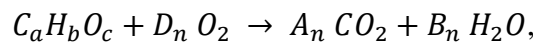
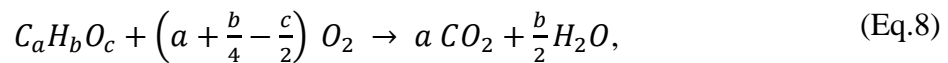
As Entalpias de combustão teórica ($\Delta_c H^\circ_{\text{teo}}$) foram obtidas da Equação 2 descrito na fundamentação teórica, em que as Entalpias dos produtos da combustão completa (H_2O e CO_2) são escritos na Equação 6:

$$\sum_{\text{produtos}} (H_{298}) = A_n (\epsilon_{0(CO_2)} + H_{\text{corr}(CO_2)}) + B_n (\epsilon_{0(H_2O)} + H_{\text{corr}(H_2O)}), \quad (\text{Eq.6})$$

e para os reagentes ($C_a H_b O_c$ e O_2) são escritos na Equação 7:

$$\sum_{\text{reagentes}} (H_{298}) = (\epsilon_{0(C_a H_b O_c)} + H_{\text{corr}(C_a H_b O_c)}) + D_n (\epsilon_{0(O_2)} + H_{\text{corr}(O_2)}), \quad (\text{Eq.7})$$

os valores A_n , B_n e D_n correspondem ao número de mols obtidos na estequiometria da combustão completa escritos na Equação 8.



em que “a”, “b” e “c” representam a quantidade de carbonos (C), hidrogênios (H) e oxigênios (O) presentes na molécula.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para validar os métodos teóricos empregados no estudo foram analisadas inicialmente entalpias de combustão experimentais ($\Delta_c H_{exp}$) para montar um Grupo Teste. As $\Delta_c H_{exp}$ do Grupo Teste foram obtidos a partir de 89 moléculas orgânicas disponíveis na literatura (Yaws, 1997), sendo 20 parafinas, 32 cicloparafinas, 18 álcoois, 13 aldeídos e 6 cetonas. As entalpias de combustão foram calculadas pelos métodos B3LYP, M06-2X, M08-HX, G4-MP2 e G4 e, após a validação das metodologias, as 64 moléculas obtidas das "Cicloparafina-a" (Figura 2) dos Condensados Trímeros Cíclicos proposto por Sacia *et al.* (2015) também foram calculadas para análises de SAFs. É importante enfatizar que alguns sistemas não estão representados nos resultados devido ao tamanho da molécula que não permitiu a convergência do cálculo.

5.1 Entalpias de combustão do Grupo Teste

As $\Delta_c H_{exp}^{\circ}$ Entalpias de combustão teóricas ($\Delta_c H_{teo}^{\circ}$) estão apresentadas na Tabela 2:

Tabela 2 - Entalpias de combustão teórico do Grupo Teste.

Molécula	Exper.	B3LYP	M06-2X	M08-HX	G4-MP2	G4
Metano	-191,7	-179,6	-188,1	-190,1	-194,6	-192,3
Etano	-341,2	-322,5	-334,6	-337,2	-346,5	-342,9
Propano	-488,5	-463,8	-478,5	-481,9	-495,6	-490,7
Butano	-635,0	-605,2	-622,4	-626,6	-644,6	-638,3
Pentano	-782,0	-746,6	-766,4	-771,4	-793,6	-786,0
Hexano	-928,9	-888,0	-910,4	-916,1	-942,6	-933,6
Heptano	-1075,8	-1029,5	-1054,5	-1061,0	-1091,5	-1081,2
Octano	-1222,7	-1170,9	-1198,5	-1205,7	-1240,5	-1228,8
Nonano	-1369,6	-1312,3	-1342,5	-1350,5	-1389,4	-1376,4
Decano	-1516,5	-1453,8	-1486,5	-1495,3	-1538,4	-1523,9
Undecano	-1663,4	-1595,2	-1630,5	-1640,0	-1687,3	-1671,5
Dodecano	-1810,4	-1736,6	-1774,5	-1784,8	-1836,3	-1819,1
Tridecano	-1957,3	-1878,0	-1918,5	-1929,6	—	—
Tetradecano	-2104,2	-2019,5	-2062,5	-2074,4	—	—
Pentadecano	-2251,1	-2160,9	-2206,5	-2219,1	—	—
Hexadecano	-2398,0	-2302,3	-2350,5	-2363,9	—	—
Heptadecano	-2544,9	-2443,7	-2494,5	-2508,7	—	—
Octadecano	-2691,8	-2585,2	-2638,5	-2653,4	—	—
Nonadecano	-2838,8	-2726,6	-2782,5	-2798,2	—	—
Eicosano	-2985,7	-2868,0	-2926,5	-2943,0	—	—
Ciclopropano	-468,3	-448,3	-457,8	-461,3	-475,2	-471,0

Ciclobutano	-614,1	-588,9	-603,6	-606,7	-624,0	-618,6
Ciclopentano	-740,9	-712,0	-727,9	-731,2	-752,8	-746,1
Ciclohexano	-881,5	-848,1	-865,2	-869,3	-895,4	-887,2
Cicloheptano	-1034,7	-996,3	-1015,0	-1019,8	-1050,6	-1041,2
Ciclooctano	-1182,6	-1150,4	-1171,5	-1176,3	-1211,9	-1201,2
Ciclodecano	-1478,4	-1430,3	-1455,6	-1461,4	-1504,0	-1490,6
Metilciclopropano	-614,3	-587,7	-600,0	-604,1	-622,3	-616,7
Metilciclobutano	-754,7	-727,7	-744,7	-748,6	-769,1	-762,3
Metilciclopentano	-882,1	-852,0	-869,9	-873,3	-899,4	-891,2
Etilciclopentano	-1028,8	-995,6	-1015,0	-1019,3	-1049,9	-1040,4
n-Propilciclopentano	-1174,8	-1137,2	-1159,0	-1164,2	-1198,9	-1188,0
Isopropilciclopentano	-1173,6	-1137,0	-1157,7	-1162,9	-1196,9	-1186,0
Metilciclohexano	-1025,9	-990,5	-1008,6	-1013,3	-1043,6	-1034,1
Etilciclohexano	-1172,4	-1133,0	-1153,1	-1158,3	-1192,9	-1182,1
n-Propilciclohexano	-1318,2	-1274,5	-1297,1	-1303,0	-1341,8	-1329,6
Isopropilciclohexano	-1317,0	-1275,9	-1296,5	-1302,2	-1340,9	-1328,7
cis-1,2-Dimetilciclohexano	-1170,9	-1132,0	-1151,1	-1156,3	-1190,6	-1179,8
trans-1,2-Dimetilciclohexano	-1171,4	-1133,1	-1152,1	-1157,2	-1191,5	-1180,7
cis-1,3-Dimetilciclohexano	-1170,7	-1134,5	-1153,9	-1159,2	-1193,5	-1182,7
trans-1,3-Dimetilciclohexano	-1171,2	-1130,7	-1150,4	-1155,7	-1189,8	-1180,9
cis-1,4-Dimetilciclohexano	-1170,6	-1130,6	-1150,3	-1155,7	-1189,8	-1179,0
trans-1,4-Dimetilciclohexano	-1171,2	-1133,0	-1152,2	-1157,3	-1191,8	-1180,9
1-Etil-3-metilciclohexano	-1321,9	-1273,1	-1294,9	-1300,8	-1339,1	-1326,9
1,2,3-Trimetilciclohexano	-1318,0	-1274,8	-1294,8	-1300,4	-1338,8	-1326,6
1,2,4-Trimetilciclohexano	-1318,3	-1273,2	-1293,9	-1299,6	-1337,8	-1325,5
1,3,5-Trimetilciclohexano	-1318,8	-1270,9	-1292,2	-1298,2	-1336,0	-1323,8
Butilciclohexano	-1471,3	-1416,8	-1441,4	-1448,0	-1491,2	-1477,6
Biciclo[2,2,2]octano	-1140,3	-1098,2	-1114,4	-1117,9	-1151,3	-1141,2
Adamantano	-1382,3	-1332,4	-1347,4	-1350,6	-1390,1	-1378,0
Decalina (cis)	-1423,5	-1380,6	-1400,0	-1404,8	-1447,0	-1434,2
Decalina (trans)	-1423,1	-1371,0	-1391,2	-1396,7	-1437,9	-1425,1
Propanona	-403,5	-384,7	-395,6	-397,9	-410,2	-406,2
2-Butanona	-550,4	-527,3	-540,4	-543,3	-560,3	-555,0
2-Pentanona	-697,4	-668,6	-684,4	-688,1	-708,2	-701,5
2-Hexanona	-844,2	-809,9	-828,3	-832,7	-857,2	-849,1
2-Heptanona	-991,1	-951,4	-972,3	-977,5	-1006,1	-996,7
2-Octanona	-1137,9	-1092,8	-1116,3	-1122,3	-1155,0	-1144,3
Metanol	-161,6	-153,0	-157,0	-159,0	-163,8	-162,0
Etanol	-305,4	-290,7	-297,8	-300,5	-310,0	-306,7
Propanol	-451,8	-432,2	-441,9	-445,3	-459,3	-454,7
Butanol	-599,6	-573,7	-586,0	-590,2	-608,4	-602,5

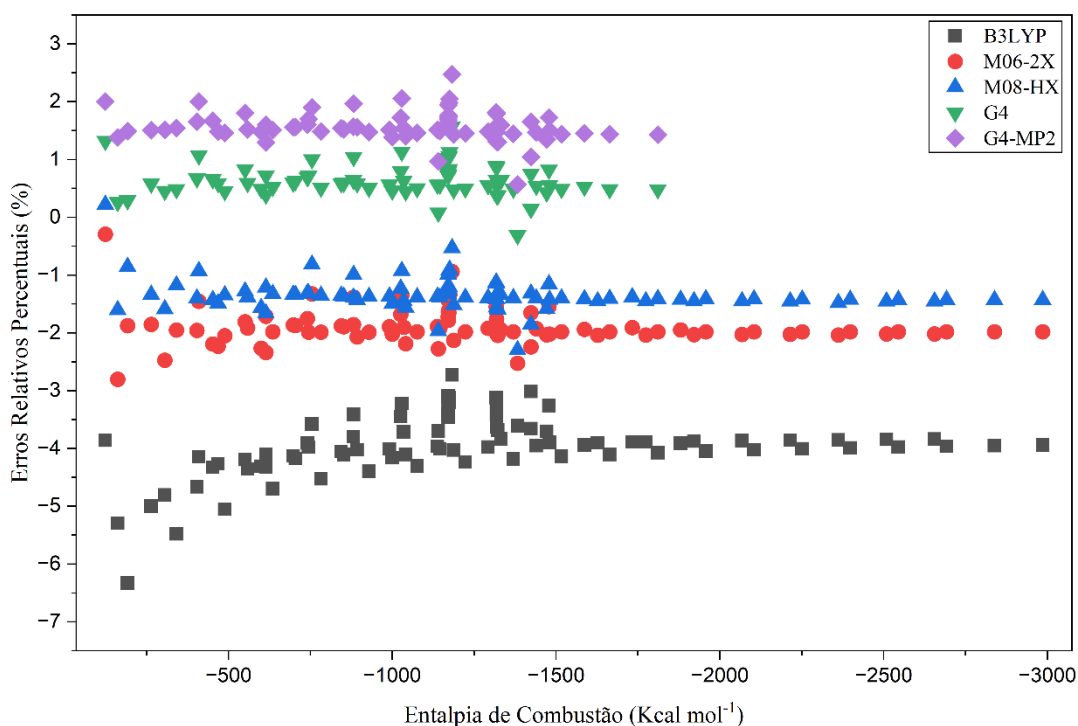
Pentanol	-744,7	-715,1	-729,9	-734,9	-757,4	-750,1
Hexanol	-892,4	-856,5	-874,0	-879,7	-906,3	-897,7
Heptanol	-1040,6	-997,9	-1017,9	-1024,4	-1055,3	-1045,3
Octanol	-1187,2	-1139,4	-1161,9	-1169,2	-1204,2	-1192,9
Nonanol	-1331,9	-1280,8	-1305,9	-1314,0	-1353,2	-1340,4
Decanol	-1479,8	-1422,2	-1449,9	-1458,7	-1502,1	-1488,0
Undecanol	-1627,1	-1563,6	-1593,9	-1603,5	-1651,1	—
Dodecanol	-1774,0	-1705,1	-1737,9	-1748,3	-1800,0	—
Tridecanol	-1920,9	-1846,5	-1881,9	-1893,1	-1949,0	—
Tetradecanol	-2067,9	-1987,9	-2025,9	-2037,8	-2097,9	—
Pentadecanol	-2214,8	-2129,3	-2169,9	-2182,6	—	—
Hexadecanol	-2361,7	-2270,7	-2313,6	-2326,8	—	—
Heptadecanol	-2508,6	-2412,2	-2457,9	-2472,2	—	—
Octadecanol	-2655,5	-2553,6	-2601,9	-2616,9	—	—
Metanal	-124,1	-119,3	-123,8	-124,4	-126,6	-125,8
Etanal	-263,9	-250,7	-259,0	-260,4	-267,9	-265,5
Propanal	-409,6	-392,7	-403,7	-405,8	-417,8	-414,0
Butanal	-558,4	-534,0	-547,7	-550,6	-566,9	-561,7
Pentanal	-704,8	-675,3	-691,6	-695,3	-715,7	-709,2
Hexanal	-851,7	-816,8	-835,6	-840,1	-864,7	-856,8
Heptanal	-999,8	-958,2	-979,6	-984,8	-1013,7	-1004,4
Octanal	-1145,5	-1099,6	-1123,6	-1129,6	-1162,6	-1152,0
Nonanal	-1292,4	-1241,0	-1267,6	-1274,4	-1311,5	-1299,6
Decanal	-1439,3	-1382,4	-1411,6	-1419,2	-1460,5	-1447,1
Undecanal	-1586,4	-1523,9	-1555,6	-1563,9	-1609,4	-1594,7
Dodecanal	-1732,6	-1665,3	-1699,6	-1708,7	-1758,4	—
Tridecanal	-1880,2	-1806,7	-1843,6	-1853,5	-1907,4	—

Analisando os resultados da Tabela 2 é possível observar que os métodos compostos (G4 e G4-MP2) apresentarem maior dificuldade para convergir cálculos das estruturas formadas com mais de 10 átomos de carbono, devido a necessidade de alto uso de memória.

Os Erros Relativos Percentuais (ERP) dos métodos teóricos B3LYP, M06-2X, M08-HX, G4 e G4-MP2, analisados foram calculados pela Equação 9 e estão representados na Figura 4.

$$ERP = \frac{\Delta_c H_{teo} - \Delta_c H_{exp}}{\Delta_c H_{exp}} \times 100\% . \quad (\text{Eq.9})$$

Figura 4 - Gráfico dos Erros Relativos Percentuais para todas as moléculas calculadas do Grupo Teste.



O Gráfico da Figura 4 mostra todos os pontos de ERP das moléculas calculadas para os métodos e os valores mais próximo 0% indica maior acurácia. Os métodos compostos (G4 e G4-MP2) apresentam erros positivos, com poucos desvios entre os valores percentuais, já os métodos baseados na DFT tem em sua maioria erros negativos, com maior amplitude entre os erros percentuais.

Os Erro Percentual Relativo Médio (ERPM) são valores da média dos ERP em módulo (Equação 10) e foram calculados para os sistemas e os resultados obtidos estão representados na Tabela 3.

$$ERPM = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |ERP|. \quad (\text{Eq.10})$$

Tabela 3 - Erros Percentual Relativo Médio e Percentil obtido para as teorias calculadas.

Método	B3LYP	M06-2X	M08-HX	G4-MP2	G4
ERPM	3,95	1,96	1,39	1,52	0,59
Menor ERP	2,73	0,29	0,22	0,57	0,08
10° Percentil	3,12	0,94	0,53	1,30	0,31
20° Percentil	3,33	1,34	0,92	1,43	0,45

30° Percentil	3,41	1,38	1,12	1,47	0,49
40° Percentil	3,45	1,55	1,23	1,51	0,56
50° Percentil	3,70	1,71	1,31	1,56	0,60
60° Percentil	3,80	1,85	1,34	1,60	0,65
70° Percentil	4,00	1,96	1,39	1,67	0,71
80° Percentil	4,19	2,04	1,43	1,80	0,83
90° Percentil	4,66	2,28	1,59	1,98	1,04
Maior ERP	6,33	2,80	2,30	2,47	1,57

Analisando os resultados da Tabela 3 é observado que o método composto G4 apresentou um EPRM = 0,62% se mostrando superior a todos os demais analisados. Entre os métodos da DFT o M06-2X (EPRM = 1,89%) e M08-HX (EPRM = 1,39%) são as mais acuradas que a B3LYP (EPRM = 3,95%), em destaque o M08-HX que obteve resultado superior ao método composto G4-MP2 (EPRM = 1,57%).

Os valores de percentis dos |ERP| analisados na Tabela 3, indicam os erros máximo para os graus de porcentagem molecular. Os métodos apresentam alta precisão ao desconsiderar os percentis inferiores e superior do conjunto testado, sendo os métodos compostos os mais precisos, seguido dos M06-2X e M08-HX. Para todos os métodos, os maiores desvios estão mais próximos das moléculas com menor liberação de energia na reação de combustão.

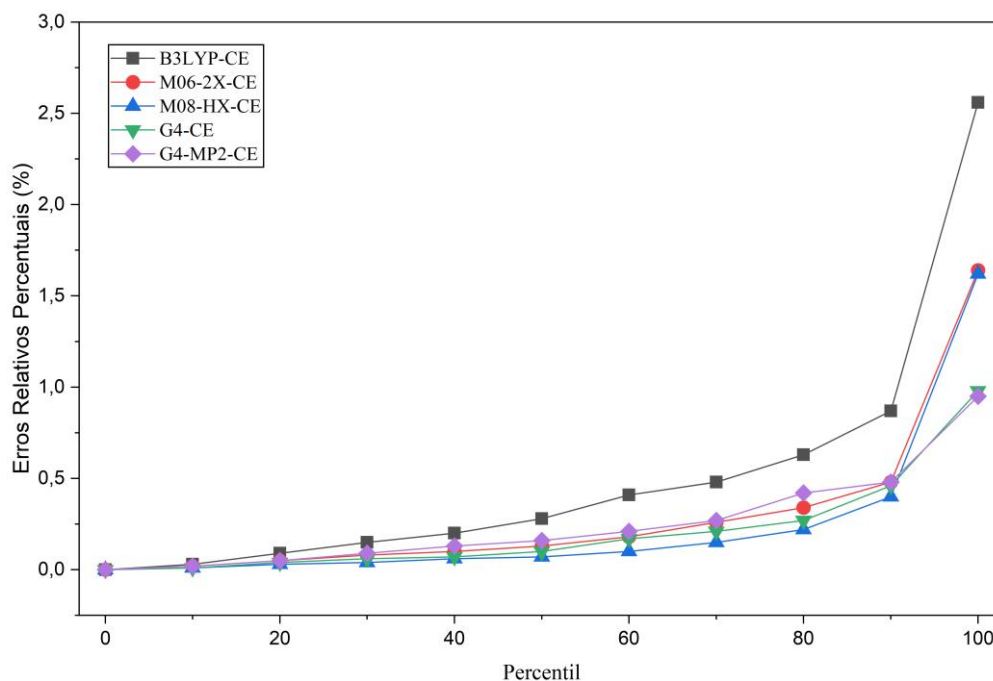
Ao dividir o valor experimental pelo teórico é obtido o fator de correção empírica (CE) para a teoria (Equação 11).

$$CE = \frac{\Delta_c H_{exp}}{\Delta_c H_{teo}} \quad (\text{Eq.11})$$

Devido a amplitude do ERP ser baixo, principalmente em moléculas que liberam mais energia, foi aplicado a média das correções empíricas ao valor final da entalpia de combustão com o intuito de aumentar a acurácia dos métodos investigados.

Após a correção empírica nos métodos teóricos, os novos valores podem ser observados no Gráfico da Figura 5, em que todos os métodos obtiveram redução significativa do erro ao aproximar os valores do ERP em 0%.

Figura 5 - Gráfico dos Erros Relativos Percentuais para todas as moléculas calculadas do Grupo Teste com correção empírica.



A tendência da CE é melhorar a exatidão e precisão teórica, logo que os desvios estão mais próximos do erro 0. Na Tabela 4 estão representados o fator de correção empírica, os Erros Percentual Relativo, bem como os |ERP| Percentil para todas as teorias com correção empírica.

Tabela 4 - Erros Percentual Relativo e Percentil obtido para as metodologias calculadas com correção empírica.

Método	B3LYP	M06-2X	M08-HX	G4-MP2	G4
CE	1,0411	1,0200	1,0141	0,9851	0,9942
ERPM	0,24	0,08	0,06	0,08	0,12
Menor ERP	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
10° Percentil	0,03	0,02	0,01	0,02	0,01
20° Percentil	0,09	0,05	0,03	0,05	0,04
30° Percentil	0,15	0,08	0,04	0,09	0,06
40° Percentil	0,20	0,10	0,06	0,13	0,07
50° Percentil	0,28	0,13	0,07	0,16	0,10
60° Percentil	0,41	0,18	0,10	0,21	0,17

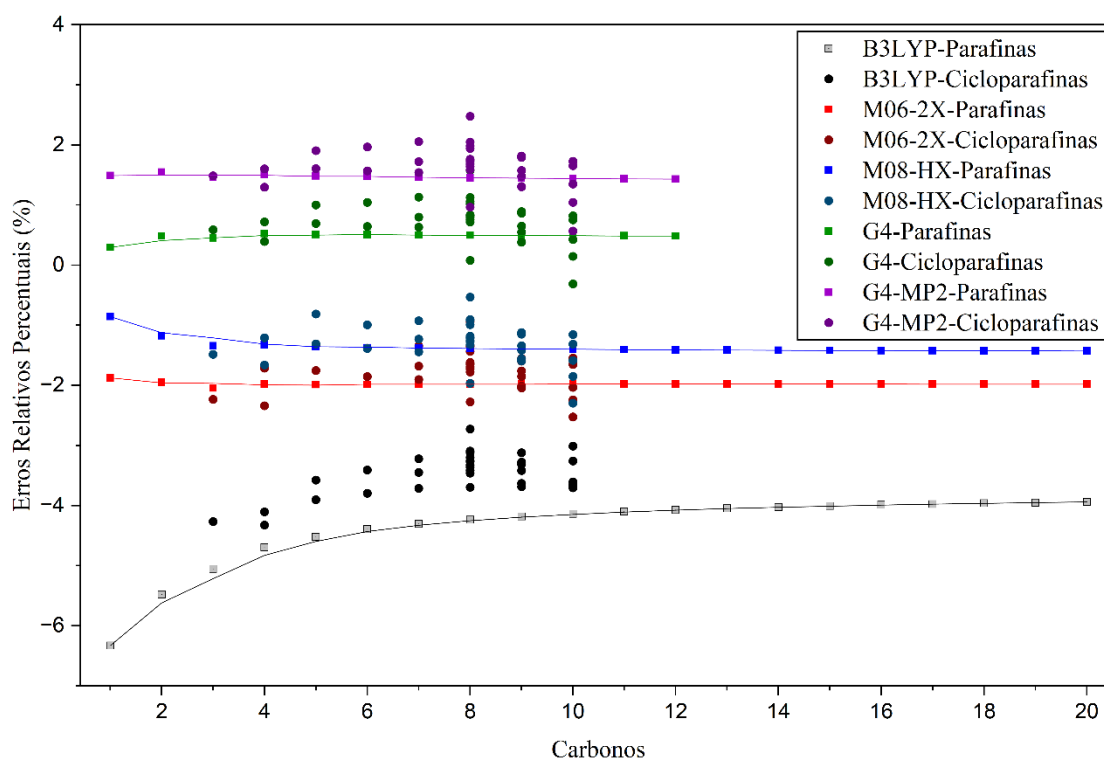
70° Percentil	0,48	0,26	0,15	0,27	0,21
80° Percentil	0,63	0,34	0,22	0,42	0,27
90° Percentil	0,87	0,48	0,40	0,48	0,46
Maior ERP	2,56	1,64	1,62	0,95	0,98

Analisando os resultados da Tabela 4 é possível observar que todas os métodos resultaram na redução dos EPRM, que o método M08-HX-CE teve destaque ao apresentar um EPRM = 0,06% e ERP do 90° percentil de 0,40% (Tabela 03), superando o G4-CE (EPRM = 0,12%). Os demais métodos obtiveram resultados expressivos tanto para os M06-2X-CE (EPRM = 0,08%) e G4-MP2-CE (EPRM = 0,08%), enquanto que o B3LYP-CE apresentou o maior EPRM = 0,24%. Esses resultados indicam a possibilidade de obter teorias precisas com a implementação de correções baseadas em valores experimentais.

5.2 Análise das Parafinas e Cicloparafinas para Entalpias de combustão.

No gráfico da Figura 6 é observado os valores dos ERP em relação ao número de carbonos para entalpia de combustão das 20 parafinas e 32 cicloparafinas.

Figura 6 - Gráfico dos Erros Relativos Percentuais para parafinas e cicloparafinas calculadas do Grupo Teste.



As parafinas estão indicadas pelos quadrados, seguem a tendência linear para todos os métodos, com exceção das menores estruturas moleculares do B3LYP que tem maior ERP para moléculas contendo entre 1 até 5 carbonos. As cicloparafinas apresenta maior variação entre os ERP, indicando estar relacionado a posição das ramificações e quantidade de carbono no anel.

Os desvios obtidos para entalpia de combustão das cicloparafinas analisadas do Grupo Teste estão apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 - Erros Percentual Relativo e percentil obtido para as metodologias calculadas para cicloparafinas calculadas do Grupo Teste.

Método	B3LYP	M06-2X	M08-HX	G4-MP2	G4
ERPM	3,41	1,70	1,26	1,65	0,76
Menor ERP	2,73	0,94	0,53	0,57	0,08
10° Percentil	3,11	1,34	0,92	1,30	0,14
20° Percentil	3,21	1,55	1,12	1,48	0,38
30° Percentil	3,27	1,66	1,27	1,60	0,64
40° Percentil	3,38	1,76	1,31	1,73	0,75
50° Percentil	3,41	1,85	1,39	1,76	0,80
60° Percentil	3,59	1,97	1,44	1,90	0,82
70° Percentil	3,67	2,03	1,56	1,96	0,89
80° Percentil	3,83	2,24	1,59	2,05	0,96
90° Percentil	4,16	2,05	1,85	2,47	1,05
Maior ERP	4,32	2,52	2,30	2,47	1,57

Comparando os dados das cicloparafinas com o Grupo Teste completo, os dados apontam ERPM menores para os métodos baseados na DFT, e ERPM maiores para os compostos. Os métodos G4 e M08-HX apresentaram maior acurácia, sendo indicados para cálculos de moléculas combustíveis orgânicas.

Ao obter as novas CE* utilizando apenas os fatores de correção empíricos das cicloparafinas foi obtido a Tabela 6.

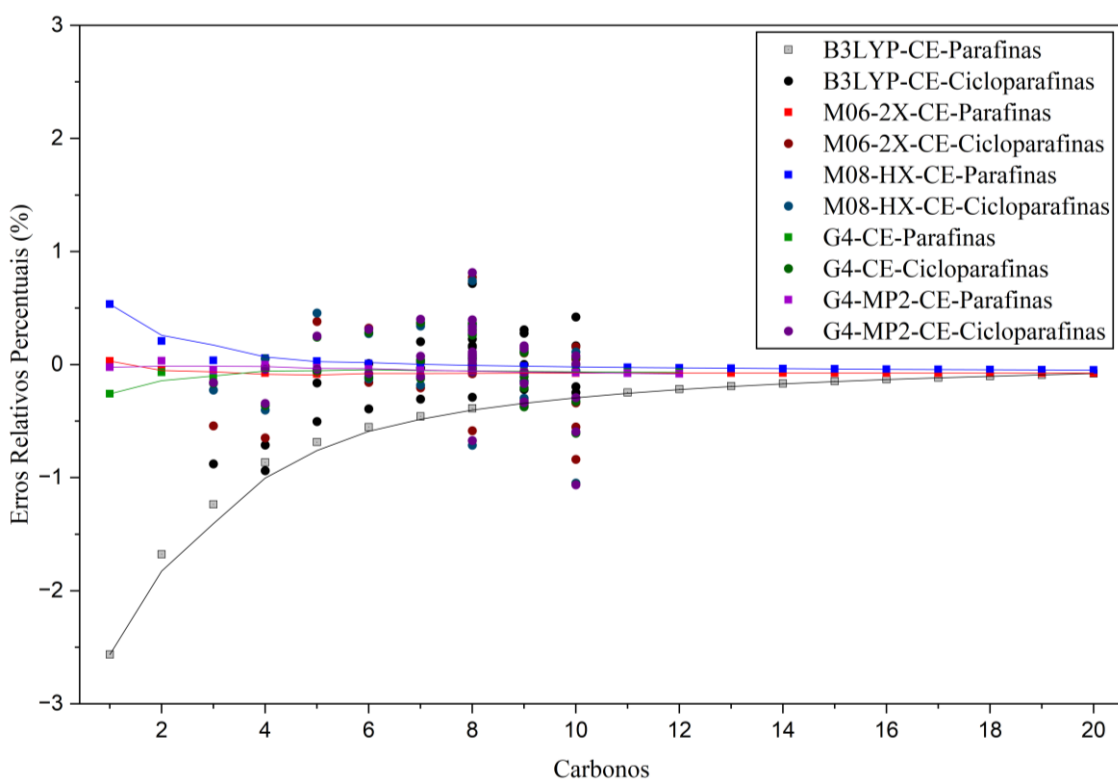
Tabela 6 - Erros Relativos Percentuais Médio obtidos para as metodologias com correção empírica para cicloparafinas calculadas do Grupo Teste.

Método	B3LYP	M06-2X	M08-HX	G4-MP2	G4
CE	1,0411	1,0200	1,0141	0,9842	0,9951
ERPM	0,55	0,32	0,20	0,21	0,23
CE*	1,0354	1,0173	1,0128	0,9838	0,9925
ERPM*	0,22	0,18	0,17	0,16	0,15

Os ERPM com CE do Grupo Teste total de todos os métodos ficaram entre 0,20% e 0,55%, enquanto os ERPM* com CE* com apenas das cicloparafinas obtiveram os valores de 0,15% até 0,22% (Tabela 6), indicando boa correção para os métodos. O B3LYP se destaca ao reduzir significativamente o ERPM de 0,55% para 0,22%, indicando maior eficiência quando as estruturas moleculares tem maior nível de semelhança.

A Figura 7 mostra a redução dos ERP para cicloparafinas com CE* e os ERP das parafinas com CE do Grupo teste completo por representar pouca alteração nos resultados.

Figura 7 - Gráfico dos Erros Relativos Percentuais para parafinas e cicloparafinas calculadas do Grupo Teste com correção empírica.



Nota-se a diversidade de erros das cicloparafinas estão distribuídos entre a faixa de 1% do ERP, a diferença estrutural desse grupo está no tamanho do anel, tamanho das ramificações ao longo do anel e posição das ramificações, portanto maiores investigações devem ser observadas para melhorar as entalpias de combustão. As parafinas obtiveram erros próximos de 0% para os métodos compostos, as moléculas com maior quantidade de carbono tendem a reduzir os erros em todos os métodos DFT.

Os tempos de processamento para as moléculas estão apresentados na Tabela 7:

Tabela 7 - Tempo de processamentos (em horas) dos métodos estudados. .

Molécula	B3LYP	M06-2X	M08-HX	G4-MP2	G4
Ciclopropano	0,01	0,02	0,02	0,01	0,19
Ciclobutano	0,03	0,05	0,05	0,04	0,33
Ciclopentano	0,12	0,17	0,17	0,09	0,77
Ciclohexano	0,03	0,05	0,05	0,04	0,32
Cicloheptano	0,12	0,19	0,19	0,27	1,49
Ciclooctano	0,11	0,19	0,19	0,20	1,30
Ciclodecano	2,34	1,89	1,97	3,27	10,30
Metilciclopropano	0,04	0,06	0,06	0,04	0,45
Metilciclobutano	0,09	0,13	0,11	0,10	0,80
Metilciclopentano	0,34	0,43	0,43	0,42	2,70
Etilciclopentano	0,57	0,69	0,76	0,79	4,12
n-Propilciclopentano	0,81	1,05	0,52	1,20	5,65
Isopropilciclopentano	0,50	0,86	0,81	1,87	4,76
Metilciclohexano	0,13	0,20	0,21	0,30	1,70
Etilciclohexano	0,34	0,51	0,52	0,88	3,51
n-Propilciclohexano	0,46	0,70	0,72	1,17	6,19
Isopropilciclohexano	0,30	0,44	0,45	0,93	4,59
cis-1,2-Dimetilciclohexano	0,31	0,51	0,50	1,08	4,73
trans-1,2-Dimetilciclohexano	0,19	0,29	0,30	0,46	2,71
cis-1,3-Dimetilciclohexano	0,30	0,41	0,42	0,47	3,03
trans-1,3-Dimetilciclohexano	0,29	0,46	0,47	1,11	4,52
cis-1,4-Dimetilciclohexano	0,20	0,30	0,31	0,46	3,54
trans-1,4-Dimetilciclohexano	0,11	0,17	0,15	0,24	1,66
1-Etil-3-metilciclohexano	0,49	0,73	0,76	1,44	5,60

1,2,3-Trimetilciclohexano	0,49	0,75	0,76	1,84	7,15
1,2,4-Trimetilciclohexano	0,46	0,71	0,72	1,88	6,93
1,3,5-Trimetilciclohexano	0,26	0,41	0,42	0,68	3,65
Butilciclohexano	0,66	1,60	1,08	2,47	9,34
Biciclo[2,2,2]octano	0,23	0,37	0,37	0,78	3,29
Adamantano	0,39	0,62	0,62	2,69	9,47
cis-Decalina	1,23	1,27	1,23	3,34	11,37
trans-Decalina	0,17	0,25	0,25	0,41	4,88
TOTAL	11,8	16,7	15,7	33,6	116,3

Os métodos compostos apresentaram tempos de processamento para o G4 de 116,3 horas, sendo altamente dispendioso ao comparar com o G4MP2 (33,6 horas). Já, para os métodos DFT não ocorreram problemas de convergência, rodando em menor tempo computacional. Ao comparar os tempos de processamento (Tabela 7) dos métodos analisados, o M08-HX tem tempos individuais de processamento semelhante ao M06-2X, apresentando ao final tempo total de 15,7 horas de processamento, contra 16,7 horas do M06-2X, sendo superado apenas pelo método B3LYP (11,8 horas).

5.2.1 Entalpias de combustão para as SPK-CTC

A literatura cita uma diversidade de moléculas para combustíveis, dentre elas os querosenes de aviação que podem ser obtidos de fontes petrolífera ou sintetizados por rotas físicas, químicas e biológicas. Os principais combustíveis utilizados no mundo possuem em sua composição parafinas, iso-parafinas, cicloparafinas e aromáticos. Dentre a diversidade de compostos dos QAVs, as cicloparafinas tem alto potencial pois reduz a temperatura de congelamento, mantendo alto poder calorífico e ponto de fulgor (Sacia *et al.*, 2015; Wang, 2021).

As $\Delta_c H_{teo}^\circ$ das cicloparafinas-a estão apresentas na Tabela 8:

Tabela 8 - Entalpias de combustão teórico do ciclparafinas-a.

Fórmula	Molécula	$\Delta_c H_{B3LYP}$ kcal mol ⁻¹	$\Delta_c H_{M06-2X}$	$\Delta_c H_{M08-HX}$
C ₁₂ H ₂₄	R1(1)_R2(1)_R3(1)	-1704,7	-1728,0	-1735,0
C ₁₅ H ₃₀	R1(1)_R2(1)_R3(4)	-2129,2	-2160,1	-2169,3
C ₁₄ H ₂₈	R1(1)_R2(1)_R3(3)	-1987,7	-2016,1	-2024,5

C ₁₃ H ₂₆	R1(1)_R2(1)_R3(2)	-1846,3	-1872,2	-1879,8
C ₁₅ H ₃₀	R1(1)_R2(4)_R3(1)	-2128,8	-2159,4	-2168,5
C ₁₈ H ₃₆	R1(1)_R2(4)_R3(4)	-2553,2	-2591,1	-2602,4
C ₁₇ H ₃₄	R1(1)_R2(4)_R3(3)	-2412,4	—	-2459,6
C ₁₆ H ₃₂	R1(1)_R2(4)_R3(2)	-2270,1	-2302,9	-2312,8
C ₁₄ H ₂₈	R1(1)_R2(3)_R3(1)	-1987,4	-2015,4	-2023,7
C ₁₇ H ₃₄	R1(1)_R2(3)_R3(4)	-2412,6	—	-2458,0
C ₁₆ H ₃₂	R1(1)_R2(3)_R3(3)	-2270,4	-2303,1	-2312,9
C ₁₅ H ₃₀	R1(1)_R2(3)_R3(2)	-2129,0	-2159,1	-2168,3
C ₁₃ H ₂₆	R1(1)_R2(2)_R3(1)	-1845,9	-1871,3	-1878,9
C ₁₆ H ₃₂	R1(1)_R2(2)_R3(4)	-2270,4	-2303,0	-2312,9
C ₁₅ H ₃₀	R1(1)_R2(2)_R3(3)	-2128,9	-2159,0	-2168,2
C ₁₄ H ₂₈	R1(1)_R2(2)_R3(2)	-1987,5	-2015,2	-2023,5
C ₁₅ H ₃₀	R1(4)_R2(1)_R3(1)	-2133,3	-2162,6	—
C ₁₈ H ₃₆	R1(4)_R2(1)_R3(4)	—	-2595,4	—
C ₁₇ H ₃₄	R1(4)_R2(1)_R3(3)	-2416,4	-2450,7	—
C ₁₆ H ₃₂	R1(4)_R2(1)_R3(2)	-2274,1	-2306,3	—
C ₁₈ H ₃₆	R1(4)_R2(4)_R3(1)	-2557,4	-2595,4	-2606,3
C ₂₁ H ₄₂	R1(4)_R2(4)_R3(4)	-2978,3	-3024,1	-3037,6
C ₂₀ H ₄₀	R1(4)_R2(4)_R3(3)	-2840,4	-2883,5	-2896,0
C ₁₉ H ₃₈	R1(4)_R2(4)_R3(2)	-2692,7	-2732,9	-2744,9
C ₁₇ H ₃₄	R1(4)_R2(3)_R3(1)	-2416,0	-2451,4	-2461,6
C ₂₀ H ₄₀	R1(4)_R2(3)_R3(4)	-2840,5	-2881,8	-2894,3
C ₁₉ H ₃₈	R1(4)_R2(3)_R3(3)	-2698,4	-2739,4	-2751,1
C ₁₈ H ₃₆	R1(4)_R2(3)_R3(2)	-2557,7	-2593,9	-2604,8
C ₁₆ H ₃₂	R1(4)_R2(2)_R3(1)	-2274,6	-2306,0	-2315,7
C ₁₉ H ₃₈	R1(4)_R2(2)_R3(4)	-2699,0	-2739,5	-2751,1
C ₁₈ H ₃₆	R1(4)_R2(2)_R3(3)	-2557,7	-2594,1	-2605,2
C ₁₇ H ₃₄	R1(4)_R2(2)_R3(2)	-2416,3	-2450,1	-2460,5
C ₁₄ H ₂₈	R1(3)_R2(1)_R3(1)	-1991,9	-2018,7	-2026,8
C ₁₇ H ₃₄	R1(3)_R2(1)_R3(4)	—	-2451,4	-2461,7
C ₁₆ H ₃₂	R1(3)_R2(1)_R3(3)	-2275,0	-2306,8	-2316,3
C ₁₅ H ₃₀	R1(3)_R2(1)_R3(2)	-2132,7	-2162,3	-2171,3
C ₁₇ H ₃₄	R1(3)_R2(4)_R3(1)	-2416,0	-2451,3	-2461,6
C ₂₀ H ₄₀	R1(3)_R2(4)_R3(4)	-2840,6	-2882,1	-2894,7
C ₁₉ H ₃₈	R1(3)_R2(4)_R3(3)	-2699,0	-2739,5	-2751,2
C ₁₈ H ₃₆	R1(3)_R2(4)_R3(2)	-2557,7	-2594,2	-2605,3

C ₁₆ H ₃₂	R1(3)_R2(3)_R3(1)	-2274,6	-2306,1	-2315,7
C ₁₉ H ₃₈	R1(3)_R2(3)_R3(4)	-2699,1	-2738,1	-2750,0
C ₁₈ H ₃₆	R1(3)_R2(3)_R3(3)	-2557,6	-2595,5	-2606,5
C ₁₇ H ₃₄	R1(3)_R2(3)_R3(2)	-2416,3	-2450,2	-2460,6
C ₁₅ H ₃₀	R1(3)_R2(2)_R3(1)	-2133,2	-2162,2	-2171,0
C ₁₈ H ₃₆	R1(3)_R2(2)_R3(4)	-2557,7	-2594,2	-2604,6
C ₁₇ H ₃₄	R1(3)_R2(2)_R3(3)	-2416,2	-2450,2	-2460,5
C ₁₆ H ₃₂	R1(3)_R2(2)_R3(2)	-2274,9	-2306,2	-2315,8
C ₁₃ H ₂₆	R1(2)_R2(1)_R3(1)	-1850,4	-1874,9	-1882,3
C ₁₆ H ₃₂	R1(2)_R2(1)_R3(4)	-2274,0	-2306,4	-2316,0
C ₁₅ H ₃₀	R1(2)_R2(1)_R3(3)	-2132,6	-2162,4	-2171,2
C ₁₄ H ₂₈	R1(2)_R2(1)_R3(2)	-1992,0	-2019,0	-2027,2
C ₁₆ H ₃₂	R1(2)_R2(4)_R3(1)	-2274,6	-2306,3	-2316,0
C ₁₉ H ₃₈	R1(2)_R2(4)_R3(4)	-2698,9	-2739,5	-2751,2
C ₁₈ H ₃₆	R1(2)_R2(4)_R3(3)	-2557,5	-2595,5	-2606,4
C ₁₇ H ₃₄	R1(2)_R2(4)_R3(2)	-2416,2	-2450,5	-2460,8
C ₁₅ H ₃₀	R1(2)_R2(3)_R3(1)	-2133,1	-2162,3	-2171,2
C ₁₈ H ₃₆	R1(2)_R2(3)_R3(4)	-2557,6	-2594,4	-2605,5
C ₁₇ H ₃₄	R1(2)_R2(3)_R3(3)	-2416,1	-2451,5	-2461,7
C ₁₆ H ₃₂	R1(2)_R2(3)_R3(2)	-2274,8	-2306,4	-2316,0
C ₁₄ H ₂₈	R1(2)_R2(2)_R3(1)	-1991,7	-2018,4	-2026,5
C ₁₇ H ₃₄	R1(2)_R2(2)_R3(4)	—	-2448,7	-2459,3
C ₁₆ H ₃₂	R1(2)_R2(2)_R3(3)	-2271,4	-2304,7	-2314,5
C ₁₅ H ₃₀	R1(2)_R2(2)_R3(2)	—	-2163,9	-2182,4

Devido as moléculas conterem número de carbono superior a 10 carbonos, não foi possível realizar os cálculos para os métodos compostos. Portanto foram analisados os métodos baseados na DFT. As moléculas apresentaram $\Delta_c H^\circ_{teo}$ de -1705 kcal mol⁻¹ até -2978 kcal mol⁻¹ para B3LYP, de -1728 kcal mol⁻¹ até -3024 kcal para M06-2X e -1735 kcal mol⁻¹ até -3038 kcal para M08-HX. Em que a diferença de energia entre os métodos M06-2X e M08-HX é de 7 até 18 kcal mol⁻¹. Já o B3LYP obtém de valores de 30 até 59 kcal mol⁻¹ em comparação com M08-HX.

Foi aplicado a CE* para entalpias de combustão dos isômeros das cicloparafinas-a, e obtidos as médias dos isômeros, esses valores são apresentadas na Tabela 9.

Tabela 9 - Entalpias de combustão teórico dos isômeros das cicloparafinas.

Fórmula	B3LYP	B3LYP-CE*	M06-2X	M06-2X-CE*	M08-HX	M08-HX-CE*
C ₁₂ H ₂₄	-1704,7	-1765,0	-1728,0	-1757,9	-1735,0	-1757,2
C ₁₃ H ₂₆	-1848,2	-1913,6	-1873,1	-1905,5	-1880,6	-1904,5
C ₁₄ H ₂₈	-1955,1	-2025,3	-1985,9	-2020,5	-1995,8	-2021,0
C ₁₅ H ₃₀	-2130,9	-2206,2	-2161,8	-2199,1	-2171,4	-2199,5
C ₁₆ H ₃₂	-2273,3	-2353,7	-2306,2	-2346,1	-2315,9	-2345,5
C ₁₇ H ₃₄	-2415,4	-2501,0	-2450,5	-2492,8	-2460,7	-2492,2
C ₁₈ H ₃₆	-2557,2	-2647,8	-2594,4	-2639,4	-2605,4	-2638,7
C ₁₉ H ₃₈	-2698,0	-2794,0	-2739,5	-2786,8	-2751,2	-2786,4
C ₂₀ H ₄₀	-2840,5	-2941,1	-2882,5	-2932,3	-2895,0	-2932,1
C ₂₁ H ₄₂	-2978,3	-3083,7	-3024,1	-3076,4	-3037,5	-3076,5

Os resultados da Tabelas 9 indicam que o método M08-HX tem os desvios mais próximo dos valores da teoria M06-2X e o B3LYP por apresentar maior erro tem maior desvio entre os funcionais do grupo de D.G. Truhlar. Utilizando as CE* nas cicloparafinas-a propostas por Sacia et al. (2015), os métodos M06-2X e M08-HX apresentam $\Delta_c H_{teo}^\circ$ com desvios inferiores a 1 kcal mol⁻¹ entre si. Já o método B3LYP apresenta $\Delta_c H_{teo}^\circ$ com desvios de 6 a 10 kcal mol⁻¹. As reduções observadas entre os métodos para entalpia de combustão validam a hipótese que estruturas semelhantes à analisada contribui de forma significativa para que os desvios se aproximassem dos métodos mais acurados mantendo boa precisão.

6. CONCLUSÃO

Os dados obtidos do Grupo Teste mostram que o método G4 é o mais acurado para entalpia de combustão, mas também é o método que mais caro computacionalmente. Os resultados do M08-HX são semelhantes as teorias compostas G4-MP2, e devido ao menor custo computacional é indicado para moléculas maiores.

A correção empírica aplicado aos métodos teóricos aumentou a acurácia da energia de combustão teórica, podendo ser comparada com erros previstos em métodos compostos. Os resultados obtidos das cicloparafinas-a confirmam a acurácia dos métodos desenvolvido por Truhlar *et al.* (2008a,b), sendo o M06-2X e o M08-HX métodos com alta exatidão e precisão para entalpia de combustão das cicloparafinas.

Com menores erros é possível analisar outras propriedades físico-químicas como a estabilidade molecular e cinética de reação, que são fundamentais para otimização da engenharia de motores a jato e redução da emissão de monóxido de carbono, hidrocarbonetos e partículas não queimado na combustão.

7. PUBLICAÇÕES

- SILVA, Thiago Soares *et al.* Computational study of bisphenol A adsorption on reduced graphene oxide: Interactions, energies, pH effects, and adsorption mechanisms. *Journal of Nanoparticle Research*, v. 27, artigo n. 121, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11051-025-06318-x>. Acesso em: 3 out. 2025.
- BIHAIN, Muriely Fernanda Ribeiro *et al.* Theoretical evaluation of 17 β -estradiol and 17 α -ethinyl estradiol adsorption on reduced graphene oxide: Interactions, bonds, and energies. *Computational and Theoretical Chemistry*, v. 1244, p. 115087, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2025.115087>. Acesso em: 3 out. 2025.
- GIROTO, Amanda S. *et al.* Transformation of glycerol, a biodiesel by-product, into high-performance activated carbons using organic acids: mechanisms, thermal stability, and adsorption properties. *Surfaces and Interfaces*, v. 61, p. 106057, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2025.106057>. Acesso em: 3 out. 2025.
- CARVALHO, Raimundo Francisco de *et al.* Theoretical and Experimental Study of the Stability of Thiamethoxam Under Different Environmental Conditions. *Processes*, v. 12, p. 2328, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/pr12112328>. Acesso em: 3 out. 2025.
- MACEDO, Vinícius Souza *et al.* Evaluation of the nanodelivery capacity of anticancer jacaranone by B₁₂N₁₂ nanocages: a DFT study. *Computational and Theoretical Chemistry*, v. 1232, p. 114461, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114461>. Acesso em: 3 out. 2025.

8. REFERÊNCIAS

- AGENCY FOR TOXIC SUBSTANCES AND DISEASE REGISTRY (ATSDR). Toxicological Profile for JP-5, JP-8, and JET A Fuels. Disponível em: <https://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp121.pdf>. Acesso em: 2 out. 2025.
- ALABAŞ, Hüsamettin Alperen; ALBAYRAK ÇEPER, Bilge. Effect of oxygen enrichment on the combustion characteristic and pollutant emissions of kerosene-biogas mixtures on a mini jet engine combustion chamber. *Journal of the Energy Institute*, v. 111, 101420, dez. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.joei.2023.101420>. Acesso em: 2 out. 2025.
- AMORIM DA SILVA, Luciana *et al.* A density functional theory investigation of the substituent effect on acyclovir and guanine derivatives for applications on energetic materials. *Energetic Materials Frontiers*, 23 fev. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enmf.2024.01.002>. Acesso em: 2 out. 2025.
- ASTM INTERNATIONAL. ASTM D1655: Standard Specification for Aviation Turbine Fuels. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2024.
- ASTM INTERNATIONAL. ASTM D4054: Standard Practice for Evaluation of New Aviation Turbine Fuels and Fuel Additives. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2023.
- ASTM INTERNATIONAL. ASTM D7566: Standard Specification for Aviation Turbine Fuel Containing Synthesized Hydrocarbons. West Conshohocken, PA: ASTM International, 2024.
- ATKINS, P.; DE PAULA, J. *Físico-Química*. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2018. v. 1.
- BARRETO, Elisa da Silva *et al.* Optimization of 2G ethanol production from sugarcane bagasse: Upscaling of soda pretreatment with redox mediator followed by fed-batch enzymatic hydrolysis and co-fermentation. *Energy Conversion and Management*, v. 323, Part A, 119225, 1 jan. 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.119225>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BAYRAMOĞLU, Kubilay; NURAN, Mustafa. Energy, exergy, sustainability evaluation of the usage of pyrolytic oil and conventional fuels in diesel engines. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 181, p. 324-333, jan. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2023.11.034>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Agência Nacional de Aviação Civil (ANAC). Plano de Ação Ambiental 2025/2027. Site Oficial, 2025. Disponível em: <https://www.gov.br/anac/pt-br/assuntos/meio-ambiente/arquivos/plano-de-acao-ambiental-2025-2027>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Agência Nacional de Aviação Civil (ANAC). Resolução nº 743, de 2024. Disponível em: <https://www.anac.gov.br/assuntos/legislacao/legislacao-1/resolucoes/2024/resolucao-743>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Combustíveis de aviação. Site Oficial. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/producao-de-derivados-de-petroleo-e-processamento-de-gas-natural/producao-de-derivados-de-petroleo-e-processamento-de-gas-natural/combustiveis-de-aviacao>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Resolução nº 856, de 2021. Disponível em: <https://atosoficiais.com.br/anp/resolucao-n-856-2021>. Acesso em: 2 out. 2025.

- BRASIL. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Resolução nº 901, de 2022. Disponível em: <https://atosoficiais.com.br/anp/resolucao-n-901-2022>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Decreto Legislativo nº 144, de 2002. Aprova o texto do Protocolo de Quioto à Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre Mudança do Clima, aberto a assinaturas na cidade de Quioto, Japão, em 14 de dezembro de 1997. Diário Oficial da União, Seção 1, Brasília, DF, p. 2, 21 jun. 2002. Disponível em: <https://www2.camara.leg.br/legin/fed/decleg/2002/decleg-144-31-dezembro-2002-456241-publicacaooriginal-1-pe.html>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Instrução Normativa nº 188, de 27 de março de 2023. Disponível em: <https://www.anac.gov.br/assuntos/legislacao/legislacao-1/instrucoes-normativas/2023/instrucao-normativa-188>. Acesso em: 2 out. 2025.
- BRASIL. Lei nº 14.993, de 8 de outubro de 2024. Institui o Programa Nacional de Combustível Sustentável de Aviação. Disponível em: <https://www2.camara.leg.br/legin/fed/lei/2024/lei-14993-8-outubro-2024-796443-publicacaooriginal-173317-pl.html>. Acesso em: 2 out. 2025.
- CASTAGNOLA, Matteo *et al.* Strong Coupling Quantum Electrodynamics Hartree–Fock Response Theory. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 129, n. 20, p. 4447–4457, 9 maio 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c01166>. Acesso em: 2 out. 2025.
- CASTELLAN, Gilbert W. Físico-Química. Tradução de Ricardo Bicca de Alencastro *et al.* Rio de Janeiro: LTC, 1986. 2 v.
- CHINA. Civil Aviation Administration of China (CAAC). China Civil Aviation Technical Standard Order: Civil Aviation Jet Fuel. CTSO-2C702a, 27 maio 2022. Disponível em: <http://www.caac.gov.cn/XXGK/XXGK/BZGF/JSBZGD/202206/P020220601545361402770.pdf>. Acesso em: 2 out. 2025.
- CNT – CONFEDERAÇÃO NACIONAL DO TRANSPORTE. Combustível sustentável de aviação: uma das soluções para a transição energética do setor aéreo. Brasília: CNT, 2025. 55 p. (Energia no Transporte). ISBN 978-85-68865-29-3. Disponível em: <https://cnt.org.br/agencia-cnt/o-combustivel-sustentvel-de-aviao--uma-das-solues-para-a-transio-energetica-do-transporte-aereo-mostra-estudo-da-cnt>. Acesso em: 2 out. 2025.
- CNT – CONFEDERAÇÃO NACIONAL DO TRANSPORTE. Painel CNT: transporte aéreo. Brasília, 2025. Disponível em: <https://www.cnt.org.br/painel-cnt-transporte-aereo>. Acesso em: 2 out. 2025.
- CURTISS, Larry A.; REDFERN, Paul C.; RAGHAVACHARI, Krishnan. Gaussian-4 theory. *The Journal of Chemical Physics*, v. 126, n. 8, 084108, 28 fev. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.2436888>. Acesso em: 2 out. 2025.
- CURTISS, Larry A.; REDFERN, Paul C.; RAGHAVACHARI, Krishnan. Gn theory. *WIREs Computational Molecular Science*, v. 1, n. 5, p. 810–825, set./out. 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/wcms.59>. Acesso em: 2 out. 2025.
- DANDU, Naveen K. *et al.* Accurate Prediction of Adiabatic Ionization Potentials of Organic Molecules Using Quantum Chemistry Assisted Machine Learning. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 127, n. 28, p. 5914–5920, 2023. Disponível em: [10.1021/acs.jpca.3c00283](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.3c00283).
- DANDU, Naveen K. *et al.* Improving the Accuracy of Composite Methods: A G4MP2 Method with G4-like Accuracy and Implications for Machine Learning. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 126, n. 27, 5 jul. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c01327>.

- ERTÜRK, Talha *et al.* Assessing the usage of end-of-life tire pyrolysis oil as an alternative fuel in a diesel engine in the point of energy, exergy, exergoeconomic, exergoenvironmental, and sustainability parameters. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, v. 46, n. 1, p. 12864-12885, 21 set. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/15567036.2024.2398644>.
- FRISCH, M. J. *et al.* Gaussian 16, Revision C.01. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2016.
- GAUSSVIEW. GaussView, Version 5. [S. l.]: Gaussian, Inc., 2009.
- GOLDSMITH, C. Franklin; MAGOON, Gregory R.; GREEN, William H. Database of Small Molecule Thermochemistry for Combustion. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 116, n. 36, p. 9033-9057, 8 ago. 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/jp303819e>.
- GROTTO, Carlos Guilherme Lopes *et al.* Energy potential of biomass from two types of genetically improved rice husks in Brazil: A theoretical-experimental study. *Biomass and Bioenergy*, v. 142, 105816, nov. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2020.105816>.
- HARGITTAI, Istvan. A 1995 conversation with John A. Pople (1925 – 2004). *Structural Chemistry*, v. 36, p. 1701-1705, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11224-024-02430-1>.
- HARTREE, Douglas R. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 24, n. 1, p. 89–110, 1928. Disponível em: <https://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=4640426>.
- HUDZIK, Jason M.; BOZZELLI, Joseph W. Thermochemistry and Bond Dissociation Energies of Ketones. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 116, n. 23, p. 5707-5722, 5 jun. 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/jp302830c>.
- INTERNATIONAL CIVIL AVIATION ORGANIZATION (ICAO). Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation (CORSA). Disponível em: <https://www.icao.int/carbon-offsetting-and-reduction-scheme-international-aviation-corsia>.
- INTERNATIONAL CIVIL AVIATION ORGANIZATION (ICAO). Committee on Aviation Environmental Protection (CAEP). Disponível em: <https://www.icao.int/environmental-protection/committee-aviation-environmental-protection-caep>.
- INTERNATIONAL CIVIL AVIATION ORGANIZATION (ICAO). Convention on International Civil Aviation (Doc 7300). 1944. Disponível em: https://www2023.icao.int/publications/Documents/7300_orig.pdf.
- INTERNATIONAL CIVIL AVIATION ORGANIZATION (ICAO). ICAO Global Framework for SAF, LCAF and other Aviation Cleaner Energies. 24 nov. 2023. Disponível em: https://www.icao.int/sites/default/files/sp-files/environmental-protection/GFAAF/Documents/ICAO-Global-Framework-on-Aviation-Cleaner-Energies_24Nov2023.pdf.
- INTERNATIONAL CIVIL AVIATION ORGANIZATION (ICAO). Long-Term Global Aspirational Goal for International Aviation (LTAG). Disponível em: <https://www.icao.int/long-term-global-aspirational-goal-ltag-international-aviation>.
- JIN, Biqing *et al.* Parametric study on a novel steam injected inverted Brayton cycle system recovering waste heat from the internal combustion engine. *Applied Thermal Engineering*, v.

274, Part C, 126774, 15 set. 2025. Disponível em:
<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.126774>.

KARTON, Amir. Three decades of quantum science: how quantum chemistry transformed thermochemical database generation for benchmarking DFT and machine learning. *Australian Journal of Chemistry*, v. 78, CH24130, 17 mar. 2025. Disponível em:
<https://doi.org/10.1071/CH24130>.

KARTON, Amir. Chapter Three - Quantum mechanical thermochemical predictions 100 years after the Schrödinger equation. In: *Annual Reports in Computational Chemistry*. [S. l.]: Elsevier, 2022. v. 18, p. 123-166. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/bs.arcc.2022.09.003>.

KARTON, Amir *et al.* W4 theory for computational thermochemistry: In pursuit of confident sub-kJ/mol predictions. *The Journal of Chemical Physics*, v. 125, n. 14, 144108, 12 out. 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.2346881>.

KOHN, W.; HOHENBERG, P. Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, v. 136, n. 3B, p. B864–B871, 1964. Disponível em:
<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.136.B864>.

KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, v. 140, n. 4A, p. A1133–A1138, 1965. Disponível em:
<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.140.A1133>.

LAMPRECHT, Delanie. Fischer–Tropsch Fuel for Use by the U.S. Military as Battlefield-Use Fuel of the Future. *Energy & Fuels*, v. 21, n. 3, p. 1448-1453, 5 abr. 2007. Disponível em:
<https://doi.org/10.1021/ef060607m>.

LI, Jian *et al.* Low freezing point sustainable aviation fuels through asymmetric cycloalkane design enabled by Ru/NiAlO_x catalyst. *Fuel*, v. 406, Part B, 136960, 15 fev. 2026. Disponível em: 10.1016/j.fuel.2025.136960.

LI, Xin; FAN, Yingling; WU, Lan. CO₂ emissions and expansion of railway, road, airline and in-land waterway networks over the 1985–2013 period in China: A time series analysis. *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, v. 57, p. 130-140, dez. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.trd.2017.09.008>.

LIU, Yu *et al.* An Experiment Study on the Laminar Burning Velocity and Markstein Length of Chlorella Oil/RP-3 Kerosene Blends. *ACS Omega*, v. 5, n. 37, p. 23510-23519, 7 set. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00789>.

LUISE, Giulia *et al.* Accurate and scalable exchange-correlation with deep learning. *arXiv*, 2025. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2506.14665>.

MA, Jialing *et al.* The prediction and assessment of properties for high energy density fuel – Adamantane derivatives: The combined DFT and molecular dynamics simulation. *Fuel*, v. 343, 127975, 1 jul. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127975>.

MAGALHÃES, Aline Souza; DOMINGUES, Edson Paulo. Blessing or curse: Impacts of the Brazilian Pre-Salt oil exploration. *Economia*, v. 15, n. 3, p. 343-362, set./dez. 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.econ.2014.11.002>.

MARDIROSSIAN, Narbe; HEAD-GORDON, Martin. Thirty years of density functional theory in computational chemistry: an overview and extensive assessment of 200 density functionals.

- Molecular Physics, v. 115, n. 19, p. 2315-2372, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00268976.2017.1333644>.
- MIAO, Zongcheng *et al.* Theoretical studies on diacetonediperoxide derivatives and comparisons with other multi-peroxidic compounds. *Química Nova*, v. 43, p.765-772, 2020. Disponível em: <https://quimicanova.s bq.org.br/pdf/AR20200102>.
- MIKALSEN, R.; ROSKILLY, A. P. A review of free-piston engine history and applications. *Applied Thermal Engineering*, v. 27, n. 14-15, p. 2339-2352, out. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2007.03.015>.
- MODEREGGER, Brent A. *et al.* Influence of Storage Conditions, Sample Handling, Sample Preparation, and Repeated Analysis on the Measured Flash Point and Hydrocarbon Composition of Jet A. Fuel, v. 305, 121399, 1 dez. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121399>.
- MORAES, Edimilson dos Santos. Propriedades termodinâmicas: querosene, bioquerosene, aditivos e mecanismos de detecção de explosivos. 2018. 187 f. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Pará, Belém, 2018. Disponível em: <https://repositorio.ufpa.br/server/api/core/bitstreams/69757e46-7f98-42ee-b653-0a0a208c3c4a/content>.
- MOREIRA, Júlia de Barros Días; REZENDE, Daniel Bastos de; PASA, Vânia Márcia Duarte. Deoxygenation of Macauba acid oil over Co-based catalyst supported on activated biochar from Macauba endocarp: A potential and sustainable route for green diesel and biokerosene production. *Fuel*, v. 269, 117253, 1 jun. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117253>.
- OCHTERSKI, Joseph W. *Thermochemistry in Gaussian*. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2000. Atualizado em 30 nov. 2022. Disponível em: <https://gaussian.com/wp-content/uploads/dl/thermo.pdf>.
- OYEYEMI, Victor B.; KEITH, John A.; CARTER, Emily A. Trends in Bond Dissociation Energies of Alcohols and Aldehydes Computed with Multireference Averaged Coupled-Pair Functional Theory. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 118, n. 17, p. 3039-3050, 7 abr. 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/jp501636r>.
- PADDER, Shahid Ahmad *et al.* Biofuel generations: New insights into challenges and opportunities in their microbe-derived industrial production. *Biomass and Bioenergy*, v. 185, 107220, jun. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2024.107220>.
- PIELA, Lucjan. The Magic of Quantum Mechanics. In: PIELA, Lucjan. *Ideas of Quantum Chemistry*. [S. l.]: Elsevier, 2007. p. 1-54. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/B978-044452227-6/50002-8>.
- PRATT, George W. Unrestricted Hartree-Fock Method. *Physical Review*, v. 102, n. 5, p. 1303-1307, 1 jun. 1956. Disponível em: <https://journals.aps.org/pr/pdf/10.1103/PhysRev.102.1303>.
- QUEIROZ, Vitória. Exportação de combustível sustentável de aviação podem começar em 2027. *CNN Brasil*, 5 jun. 2025. Disponível em: <https://www.cnnbrasil.com.br/economia/macroeconomia/exportacao-de-combustivel-sustentavel-de-aviacao-pode-comecar-em-2027>.

- RAJI, Abdulwasii Muhammad *et al.* Overview of combustion and emission characteristics of sustainable aviation fuels and conventional JET A-1 fuel. *Fuel*, v. 402, 136011, 15 dez. 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2025.136011>.
- SACIA, Eric R. *et al.* Highly Selective Condensation of Biomass-Derived Methyl Ketones as a Source of Aviation Fuel. *ChemSusChem*, v. 8, n. 10, p. 1726–1736, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cssc.201500002>.
- SEMIDALAS, Emmanouil; BOESE, A. Daniel; MARTIN, Jan M. L. Post-CCSD(T) corrections in the S66 noncovalent interactions benchmark. *Chemical Physics Letters*, v. 863, 141874, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2025.141874>.
- SILVA, Thiago Soares *et al.* Brueckner Doubles variation of W1 theory (W1BD) adapted to pseudopotential: W1BDCEP theory. *Journal of Molecular Modeling*, v. 28, 284, 1 set. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00894-022-05281-x>.
- SOUSA, Sérgio Filipe; FERNANDES, Pedro Alexandrino; RAMOS, Maria João. General Performance of Density Functionals. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 111, n. 42, p. 10439-10452, 25 ago. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/jp0734474>.
- TALIBI, Midhat; HELLIER, Paul; LADOMMATOS, Nicos. Impact of increasing methyl branches in aromatic hydrocarbons on diesel engine combustion and emissions. *Fuel*, v. 216, p. 579–588, 15 mar. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.12.045>.
- TIMKO, Michael T. *et al.* Combustion Products of Petroleum Jet Fuel, a Fischer-Tropsch Synthetic Fuel, and a Biomass Fatty Acid Methyl Ester Fuel for a Gas Turbine Engine. *Combustion Science and Technology*, v. 183, n. 10, p. 1039-1068, 14 set. 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00102202.2011.581717>.
- VASQUEZ-AGUIRRE, I. *et al.* Effect of natural inhibitors on microalloyed steel corrosion in E5 and E10 biofuels. *International Journal of Electrochemical Science*, v. 17, n. 1, 22011, jan. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.20964/2022.01.08>.
- VERMA, Tikendra Nath *et al.* Experimental and empirical investigation of a CI engine fuelled with blends of diesel and roselle biodiesel. *Scientific Reports*, v. 11, 18865, 22 set. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-98382-1>.
- VOIGT, Christiane *et al.* Cleaner burning aviation fuels can reduce contrail cloudiness. *Communications Earth & Environment*, v. 2, n. 1, p. 1–10, 17 jun. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s43247-021-00174-y>.
- XU, Zheng *et al.* Avaliação do desempenho e do potencial de redução de emissões de um combustível de aviação sustentável 100% HEFA em um motor turbofan de pequena escala. *Applied Thermal Engineering*, [S. l.], 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.128501>. Acesso em: [insira a data de acesso].
- WAGLE, Aditi *et al.* Multi-stage pre-treatment of lignocellulosic biomass for multi-product biorefinery: A review. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, v. 49, 101702, fev. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.seta.2021.101702>.
- WALUYO, Budi *et al.* Fuel performance for stable homogeneous gasoline-methanol-ethanol blends. *Fuel*, v. 294, p. 120565, 15 jun. 2021. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236121004415>.

- WANG, Cheng *et al.* Fireball distribution characteristics and thermal radiation effects in the explosion of aviation kerosene storage tank. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 192, p. 707-718, dez. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.10.066>.
- WANG, Hongyan *et al.* Experimental and kinetic modeling study of methyl butyl ketone pyrolysis: Insight into chain lengths and cyclic/acyclic structures effects on alkyl-ketone pyrolysis. *Chemical Engineering Science*, [S.l.], 2025. DOI: 10.1016/j.ces.2025.122786.
- WANG, Xiaoyu *et al.* Review on the Relationship Between Liquid Aerospace Fuel Composition and Their Physicochemical Properties. *Transactions of Tianjin University*, v. 27, p. 87-109, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s12209-020-00273-5>.
- WATSON, M. J. *et al.* Sustainable aviation fuel technologies, costs, emissions, policies, and markets: A critical review. *Journal of Cleaner Production*, v. 449, 141472, 10 abr. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.141472>.
- YAWS, Carl L. *Handbook of chemical compound data for process safety: comprehensive safety and health-related data for hydrocarbons and organic chemicals selected data for inorganic chemicals*. Houston, Tex: Gulf Pub. Co, 1997.
- YOHANNES, Asfaw; GATES, Ian. A century of evolution: Progress and milestones in Fischer-tropsch synthesis. *Coordination Chemistry Reviews*, v. 547, 217096, 15 jan. 2026. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2025.217096>.
- ZHAO, Qianpeng *et al.* Experimental investigation on spark ignition of multi-swirl spray flames under sub-atmospheric pressures and low temperatures. *Fuel*, v. 326, 125004, 15 out. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125004>.
- ZHAO, Yan; TRUHLAR, Donald G. Exploring the Limit of Accuracy of the Global Hybrid Meta Density Functional for Main-Group Thermochemistry, Kinetics, and Noncovalent Interactions. *Journal of Chemical Theory and Computation*, v. 4, n. 12, p. 1849-1868, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ct800246v>.
- ZHAO, Yan; TRUHLAR, Donald G. The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals. *Theoretical Chemistry Accounts*, v. 120, p. 215-241, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00214-007-0310-x>.