



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

PPGEQ0043 - Tópicos Especiais em Engenharia Química: Modelagem Molecular de Biocombustíveis.

(CH = 45 h, Cr = 3)

Aplicação dos Métodos Teóricos de Dinâmica Molecular, Método Monte Carlo e a Teoria de Densidade Funcional na Predição de Propriedades Físicas e Termofísicas de Compostos Químicos de Biodiesel e Frações de Biocombustíveis (Gasolina Verde, Querosene Verde, Diesel Leve e Pesado Verde) obtidos via Destilação de PLO (Produto Líquido Orgânico). Esta Disciplina visa aplicar os métodos computacionais (Métodos Teóricos de Dinâmica Molecular, Método Monte Carlo e a Teoria de Densidade Funcional) para compreender o comportamento físico das moléculas constituintes dos Biocombustíveis, assim como analisar as limitações e potencial de predição dos métodos teóricos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

1)Molecular Modelling, Principles and applications. Andrew R. Leach, 2° edition. Prentice Hill. 2001. 2)Szabo, A & Ostlund, N. S., Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover, 1989 3)Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional. José David M. Vianna, Adalberto Fazzio, Sylvio Canuto. São Paulo, Editora Livraria da Física, 2004. 4)M. S. Dresselhaus. Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, 1998 Sumário: 1)Modelagem Molecular de Biocombustíveis; 2)Espectrometria UV-vis, Raman, IR, DOS, Circular Dicroísmo. 3)Teoria da Densidade Funcional; Dinâmica Molecular Clássica, Quântica e Clássica/Quântica; Método de Monte Carlo; 4)Aplicações de Métodos Computacionais em Biocombustíveis e Nanosistemas; 5)Fundamentos, Processos de Conversão, Aplicações; 5.1)Principais Processos de Conversão pelas rotas Bioquímicas e Termoquímicas (Produção de Biodiesel, Biodiesel de Algas, Biogás, Etanol Convencional, Lignocelulótico e Biocombustíveis Líquidos obtidos via Rota BTL (Biomass-to-Liquid); 5.2)Tratamento dos Resíduos da Produção de Biocombustíveis.