

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO MARANHÃO
CENTRO DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS – CECEN
CURSO DE QUÍMICA LICENCIATURA

ANDRESSA LUIZA TEIXEIRA OLIVEIRA

**AVALIAÇÃO TERMODINÂMICA E CINÉTICA DA MOLÉCULA DE
ACETATO DE ETILA COMO COMBUSTÍVEL ALTERNATIVO**

São Luís

2025

ANDRESSA LUIZA TEIXEIRA OLIVEIRA

**AVALIAÇÃO TERMODINÂMICA E CINÉTICA DA MOLÉCULA DE
ACETATO DE ETILA COMO COMBUSTÍVEL ALTERNATIVO**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Curso de Química
da Universidade Estadual do
Maranhão para o grau de
licenciatura em Química.

Orientador: Prof. Dr. Alamgir
Khan.

São Luís

2025

ANDRESSA LUIZA TEIXEIRA OLIVEIRA

**AVALIAÇÃO TERMODINÂMICA E CINÉTICA DA MOLÉCULA DE
ACETATO DE ETILA COMO COMBUSTÍVEL ALTERNATIVO**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao curso de Química da
Universidade Estadual do Maranhão –
UEMA, para obtenção do grau de
licenciatura em Química.

Aprovado em: 15 / julho / 2025

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente



ALAMGIR KHAN
Data: 31/07/2025 23:23:50-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Examinador 1

Prof. Dr. Alamgir Khan (Orientador)
Departamento de Química – UEMA

Documento assinado digitalmente



WILLIAM DA SILVA CARDOSO
Data: 01/08/2025 17:01:46-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Examinador 2

Prof. Dr. William da Silva Cardoso
Departamento de Química – UEMA

Documento assinado digitalmente



RAQUEL MARIA TRINDADE FERNANDES
Data: 01/08/2025 09:51:58-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Examinador 3

Profª. Dra. Raquel Maria Trindade Fernandes
Departamento de Química – UEMA

São Luís

2025

Dedico este trabalho a Deus, que sempre me fortaleceu nos momentos de dúvida e cansaço; à minha família, que foi meu alicerce com amor incondicional e palavras de encorajamento; e aos amigos que, com paciência, carinho e fé em mim, nunca deixaram que eu desistisse. Cada gesto de apoio de vocês foi essencial para que este sonho se tornasse realidade. Esta conquista também é de vocês.

AGRADECIMENTOS

A Deus, em primeiro lugar, agradeço por ter me concedido forças, sabedoria e resiliência ao longo de toda esta caminhada. Sua presença foi meu refúgio nos momentos difíceis e minha luz nas horas de incerteza. Sem Ele, esta conquista simplesmente não seria possível.

À minha família, minha base firme e porto seguro, dedico todo o meu amor e gratidão. Em especial, à minha mãe Maria Raimunda Teixeira Oliveira, ao meu pai Alan Marinho Oliveira e a minha irmã Alanna Crysllen Teixeira Oliveira — minha fonte inesgotável de força, inspiração e coragem. A vocês, que sempre estiveram ao meu lado de forma incondicional, acreditando nos meus sonhos mesmo quando eu mesma duvidei deles, o meu mais profundo agradecimento. Cada palavra de incentivo, cada gesto de carinho e cada demonstração de apoio foram fundamentais para que eu continuasse firme nesta jornada. Amo vocês com todo o meu coração.

Ao professor Dr. Alamgir Khan, meu sincero agradecimento por ter sido mais que um orientador — por ter sido um guia paciente, exigente e inspirador ao longo destes dois anos de pesquisa. Sua dedicação, conhecimento e confiança foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho e para o meu crescimento acadêmico e pessoal. Serei eternamente grata por tudo que aprendi sob sua orientação.

Aos colegas de trabalho, que caminharam comigo durante essa jornada, minha gratidão pelo apoio mútuo, pelas trocas de conhecimento e pelos momentos compartilhados que tornaram essa trajetória mais leve e enriquecedora.

Aos colegas do Carcará Rocket Design, meu profundo agradecimento. Trabalhar ao lado de pessoas tão competentes, apaixonadas e comprometidas com a ciência e a inovação foi, sem dúvida, um privilégio. Levarei comigo não só o aprendizado técnico, mas principalmente o espírito de equipe, a amizade e a paixão por fazer acontecer.

Agradeço, com ternura e admiração, a Mauro Fernando Santana Pinto, alguém que o destino colocou em meu caminho no momento mais bonito da caminhada. Dizem que certas pessoas chegam para transformar, e você chegou iluminando meus dias com coragem, leveza e uma força silenciosa que me impulsiona a seguir. Com gestos de cuidado, palavras que acolhem e um olhar que inspira, você me ensinou novas formas de ver o mundo — e de acreditar em mim. Sou profundamente grata por sua presença, por cada instante dividido e por todo amor e leveza que floresceu ao longo dessa jornada. Que a vida siga sendo nosso lugar favorito, lado a lado.

Por fim, agradeço à Universidade Estadual do Maranhão, que me proporcionou não apenas formação acadêmica, mas também experiências transformadoras que ultrapassaram os limites da sala de aula e marcaram profundamente minha trajetória. Sinto-me honrada por ter feito parte desta instituição.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para essa caminhada — com palavras, gestos, apoio ou presença — deixo o meu mais sincero e eterno agradecimento. Cada um de vocês deixou sua marca neste capítulo da minha vida.

"É justo que muito custe o que muito vale."
— Santa Teresa de Ávila

Este Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) será apresentado em formato de artigo científico, na revista Cad. Prospec., Salvador, com o objetivo de divulgar seus resultados de maneira mais ampla. Após sua defesa, o trabalho será submetido para publicação em uma revista acadêmica da área, contribuindo para o avanço do conhecimento científico e possibilitando que outros pesquisadores e profissionais tenham acesso às informações produzidas.

Oliveira, Andressa Luiza Teixeira

Avaliação termodinâmica e cinética do acetato de etila como combustível alternativo. / Andressa Luiza Teixeira Oliveira. – São Luis, MA, 2025.

23 f

TCC (Graduação em Licenciatura em Química) - Universidade Estadual do Maranhão, 2025.

Orientador: Prof. Dr. Alamgir Khan.

1.Acetato de Etila. 2.Quimica Computacional. 3.Reações Isodesmicas. 4.Termodinamica e Combustível Alternativo. I.Titulo.

CDU:661.72

Elaborado por Cássia Diniz - CRB 13/910

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Molécula do acetato de etila.	13
Figura 2 - Reações do acetato de etila.	14

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores da energia térmica da dissociação do acetato de etila.....	15
Tabela 2 – Valores da energia livre de Gibbs da dissociação do acetato de etila	15
Tabela 3 – Valores da entropia da dissociação do acetato de etila.	15
Tabela 4 – Valores da entalpia da dissociação do acetato de etila..	15
Tabela 5 – Valores finais da entalpia das reações isodesmicas	16
Tabela 6 – Valores finais da energia livre de Gibbs das reações isodesmicas	17
Tabela 7 – Valores finais da entropia das reações isodesmicas	17
Tabela 8 – Valores finais da energia térmica das espécies químicas.	18
Tabela 9 – Valores da variação da entalpia das reações.	20
Tabela 10 – Valores da variação da entropia das reações.	21
Tabela 11 – Valores da variação da energia livre de Gibbs das reações.	22
Tabela 12 – Valores da constante de equilíbrio.	23
Tabela 13 – Valores final da constante de equilíbrio.	24

LISTA DE FORMULAS

Formula 1 – Constante de equilíbrio K	22
--	----

SUMÁRIO

1. Introdução	11
1.1 Biocombustível	12
1.2 Acetato de etila	12
1.3 Química computacional	12
2. Objetivo	12
3. Metodologia	12
3.1 Química computacional	13
3.2 Modelagem da molécula	13
3.3 Teoria do Funcional da Densidade	13
3.4 Reações isodesmicas	14
4. Resultado e discussão	14
4.1 Dados termodinâmicos	15
4.2 Variações de temperatura	16
4.3 Entalpia	18
4.4 Entropia	19
4.5 Energia livre de Gibbs	20
4.6 Constante de equilíbrio	21
4.7 Taxa de reação	22
5. Conclusão	23
6. Referências	24

AValiação TERMODINÂMICA E CINÉTICA DA MOLÉCULA DE ACETATO DE ETILA COMO COMBUSTÍVEL ALTERNATIVO

RESUMO

A crescente preocupação com os impactos ambientais causados pelos combustíveis fósseis tem impulsionado a busca por alternativas sustentáveis. Neste contexto, este trabalho apresenta uma avaliação teórica das propriedades termoquímicas e cinéticas do acetato de etila, utilizando métodos da química quântica computacional. Por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), com o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-31G(d), foram realizados cálculos de otimização de geometria, análise vibracional e estimativas de energia para diferentes temperaturas. As reações isodésmicas foram aplicadas como método indireto para obtenção precisa de dados termoquímicos, como entalpia (ΔH), energia livre de Gibbs (ΔG), entropia (ΔS) e constantes de equilíbrio. Os resultados obtidos permitiram analisar a estabilidade térmica do composto e seu potencial como combustível alternativo. Conclui-se que o acetato de etila apresenta comportamento termodinâmico compatível com aplicações energéticas específicas, sendo promissor no desenvolvimento de combustíveis oxigenados com menor impacto ambiental.

Palavras-chave: acetato de etila, química computacional, reações isodésmicas, termodinâmica, combustível alternativo.

ABSTRACT

The growing concern over the environmental impacts of fossil fuels has driven the search for sustainable alternatives. In this context, this study presents a theoretical evaluation of the thermochemical and kinetic properties of ethyl acetate using computational quantum chemistry methods. Density Functional Theory (DFT), employing the B3LYP functional and the 6-31G(d) basis set, was applied to perform geometry optimizations, vibrational analysis, and energy calculations at different temperatures. Isodesmic reactions were employed as an indirect method to accurately determine thermochemical data, such as enthalpy (ΔH), Gibbs free energy (ΔG), entropy (ΔS), and equilibrium constants. The results allowed for the assessment of the compound's thermal stability and its potential as an alternative fuel. It is concluded that ethyl acetate exhibits thermodynamic behavior compatible with specific energy applications, showing promise for the development of oxygenated fuels with reduced environmental impact.

Keywords: ethyl acetate, computational chemistry, isodesmic reactions, thermodynamics, alternative fuel.

INTRODUÇÃO

Desde o século XX, a sociedade tem dependido intensamente dos combustíveis fósseis, especialmente os derivados do petróleo. O refino do petróleo bruto gera produtos como gasolina, diesel, querosene e GLP, amplamente utilizados em setores industriais e no transporte (Andrade; Mattei, 2011). Além disso, o petróleo serve como base para a produção de plásticos, lubrificantes e pesticidas (Agra, 2001).

Contudo, a queima desses combustíveis libera grandes quantidades de gases poluentes, como CO_2 , NO_x e SO_2 , contribuindo para o aquecimento global, o efeito estufa e outros impactos ambientais negativos (Manahan, 2013). Diante disso, torna-se essencial investir em fontes de energia renováveis — como solar, eólica, hidrelétrica, biomassa e biocombustíveis (Leite; Leal, 2007) — e em tecnologias de mitigação de poluentes, como catalisadores e sistemas de filtragem.

Os biocombustíveis destacam-se como alternativa viável e sustentável. Produzidos a partir de matérias-primas renováveis, como milho, cana-de-açúcar e óleos vegetais, esses combustíveis apresentam menor emissão de gases tóxicos e contribuem para a redução dos impactos ambientais. O biodiesel, por exemplo, pode ser usado puro ou misturado ao diesel comum, oferecendo vantagens como menor emissão de SO_2 e NO_x , além de baixo custo e boa durabilidade (Guarieiro; Vasconcellos; Solci, 2011).

O acetato de etila, ou etanoato de etila, é um éster orgânico simples, de estrutura molecular relativamente estável e facilmente obtido por reação entre ácido acético e etanol (Solomons; Fryhle; Snyder, [s.d.]). Embora tradicionalmente utilizado como solvente em indústrias farmacêuticas (Chazin, 2012) e químicas, esse composto tem despertado interesse na área energética por seu potencial como combustível alternativo. Apesar de seu baixo poder calorífico em comparação aos combustíveis convencionais, sua estrutura química e sua combustão limpa justificam investigações mais aprofundadas sobre sua viabilidade termoquímica (Ivanov, 2005).

A avaliação de compostos como o acetato de etila requer metodologias confiáveis, capazes de prever o comportamento químico das moléculas em diferentes condições. A química computacional tem se consolidado como uma ferramenta essencial nesse contexto (Raupp; Serrano; Martins, 2008). Em especial, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) tem demonstrado alta precisão na determinação de propriedades moleculares, como entalpia de formação, energia livre de Gibbs, constantes de equilíbrio e parâmetros cinéticos (Ochterski, 2000). O uso de reações isodésmicas, que consistem em reações hipotéticas onde o tipo e número de ligações permanecem inalterados, permite reduzir erros sistemáticos nos cálculos energéticos, tornando os resultados mais confiáveis mesmo com métodos computacionais de custo moderado (Torres; Hovell, 2003).

Este trabalho tem como objetivo principal avaliar as propriedades termoquímicas e cinéticas do acetato de etila, com foco em sua decomposição térmica, por meio de cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o software Gaussian09 (Ochterski, 2000). A aplicação de reações isodésmicas permite a obtenção precisa de dados energéticos, como entalpia, energia livre de Gibbs e entropia, além de parâmetros cinéticos relevantes. A pesquisa também analisa a influência da temperatura no comportamento da molécula e propõe um mecanismo teórico de decomposição, contribuindo para a avaliação do composto como potencial combustível alternativo.

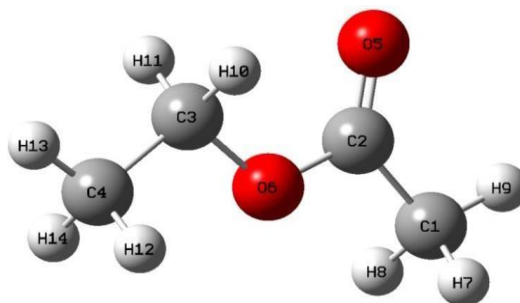
METODOLOGIA

Este trabalho empregou métodos da química quântica computacional para avaliar a estabilidade térmica, as propriedades termodinâmicas e o comportamento cinético do acetato de etila como potencial combustível alternativo. A investigação baseou-se na

Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando uma abordagem sistemática em diferentes temperaturas e considerando reações isodésmicas como ferramenta para a correção de erros sistemáticos.

A modelagem inicial da molécula de acetato de etila, como consta na figura 1 ($\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$), foi realizada com o software GaussView 5.0 (Ochterski, 2000), ferramenta gráfica amplamente utilizada na construção de estruturas moleculares. A geometria inicial foi baseada em parâmetros experimentais médios para as ligações covalentes envolvidas: C–C (1,54 Å), C–O (1,43 Å), C=O (1,23 Å), e C–H (1,09 Å) (Toledo; Oliveira, 2014), garantindo um ponto de partida fisicamente coerente para os cálculos posteriores.

Figura 1 - Molécula do acetato de etila.



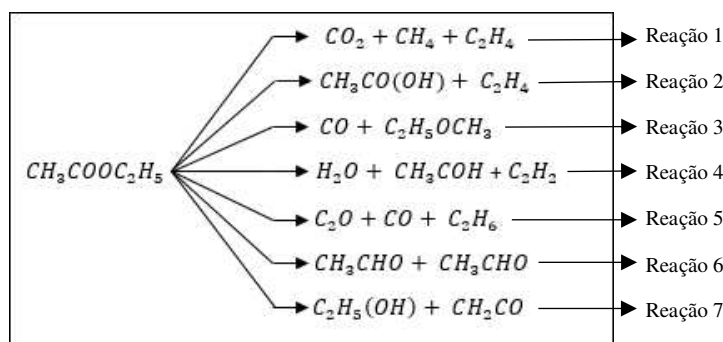
Fonte: Autor/2025

A otimização da geometria molecular foi conduzida com o pacote computacional Gaussian 09, por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o funcional híbrido B3LYP e o conjunto de base 6-31G(d) (Becke, 1993). A confirmação da estabilidade dos mínimos otimizados foi realizada por análise das frequências vibracionais. Apenas geometrias sem frequências imaginárias foram consideradas como estados fundamentais estáveis.

A partir das geometrias otimizadas, foram realizadas análises termodinâmicas em cinco temperaturas: 0 K, 298 K, 500 K, 1000 K e 1500 K. Essa faixa térmica permite compreender desde a estabilidade fundamental da molécula até seu comportamento sob condições de alta energia, como aqueles presentes em motores de combustão ou atmosferas de foguetes. Os dados extraídos dos cálculos computacionais incluíram a energia interna total (U), a entalpia (H), a entropia (S) e a energia livre de Gibbs (G), parâmetros fundamentais para a análise do comportamento termodinâmico da molécula em diferentes condições de temperatura (Ochterski, 2000).

As reações isodésmicas foram elaboradas com base em compostos de referência bem caracterizados, conforme a figura 2 - contadas de reações 1 a 7 de cima para baixo - como CO_2 , CH_4 , C_2H_4 , CH_3COOH , CH_3CHO , entre outros. A construção cuidadosa dessas reações assegura que as mudanças de energia computadas sejam atribuíveis à diferença na organização molecular, e não a artefatos do método.

Figura 2 - Reações do acetato de etila.



Fonte: Autor/2025

Todos os valores obtidos nos cálculos foram organizados em tabelas de variação de temperatura (ΔT) – feitas da temperatura 2 menos a 1, a temperatura 3 menos a 2, a temperatura 4 menos a 3 e a temperatura 5 menos a 4 - e processados por meio de planilhas eletrônicas, o que permitiu a análise das tendências dos parâmetros ΔH , ΔS e ΔG , a identificação das reações mais favorecidas termodinamicamente, o cálculo das diferenças energéticas entre os intermediários e o reagente, além da representação gráfica da evolução das propriedades em função da temperatura. As condições de 0 K foram consideradas apenas como referência teórica, uma vez que, na temperatura absoluta nula, não há movimento molecular, impossibilitando reações ou transições de fase. Dessa forma, os dados práticos foram discutidos principalmente a partir de 298 K.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os cálculos de entalpia (ΔH), entropia (ΔS) e energia livre de Gibbs (ΔG) realizados para o acetato de etila e seus fragmentos possibilitaram uma análise detalhada da estabilidade termodinâmica da molécula em diferentes temperaturas. Observou-se que, com o aumento da temperatura, ocorre um aumento da entropia (ΔS), indicando maior desordem molecular; uma diminuição da energia livre de Gibbs (ΔG), o que sugere maior espontaneidade para as reações de decomposição; e uma redução no valor absoluto da entalpia total, resultado das correções térmicas aplicadas ao sistema.

Após a obtenção e análise dos dados termodinâmicos, foi realizada uma avaliação adicional baseada na variação de temperatura (ΔT), com o objetivo de refinar a interpretação dos resultados e identificar tendências de comportamento da molécula. Para isso, consideraram-se quatro incrementos térmicos a partir de uma temperatura de referência igual a 0 K, definida como o ponto inicial (T_1). As propriedades avaliadas (entalpia, entropia, energia livre de Gibbs e energia térmica) foram analisadas nas temperaturas subsequentes, possibilitando a observação da evolução dos parâmetros em diferentes condições térmicas.

Os valores obtidos diretamente dos cálculos foram expressos em diferentes unidades: energia de Gibbs (G) e entalpia (H) em Hartree; entropia (S) em cal/mol·K; e energia térmica (U) em kcal/mol. Para a padronização e posterior utilização nos cálculos termodinâmicos comparativos, todas as grandezas foram convertidas para kJ/mol e J/mol·K, utilizando fatores de conversão apropriados. A padronização dos dados permitiu

maior precisão na comparação entre diferentes temperaturas e facilitou a interpretação dos efeitos térmicos sobre a estabilidade e reatividade da molécula.

Tabela 1 – Valores da energia térmica da dissociação do acetato de etila. (KJ/mol)

	$C_4H_8O_2$	$C_4H_7O_2^*$	$C_3H_5O_2$	$C_2H_3O_2$	$*C_4H_7O_2$	$C_2H_5O_2$	CH_3	C_2H_5
ΔT_1	-16,736	-16,736	-13,171	-8,368	-12,552	-12,552	-8,786	-4,184
ΔT_2	24,313	25,057	20,853	12,351	25,455	19,702	6,932	11,296
ΔT_3	11,890	11,710	9,418	5,806	11,773	9,585	2,870	5,3969
ΔT_4	24,271	23,394	18,457	11,512	23,919	19,377	5,611	11,003

Fonte: Autor/2025

Tabela 2 – Valores da energia livre de Gibbs da dissociação do acetato de etila. (KJ/mol)

	$C_4H_8O_2$	$C_4H_7O_2^*$	$C_3H_5O_2$	$C_2H_3O_2$	$*C_4H_7O_2$	$C_2H_5O_2$	CH_3	C_2H_5
ΔT_1	60,387	52,510	49,885	39,383	52,510	47,259	107,645	36,758
ΔT_2	-77,271	-80,466	-71,211	-59,310	-76,291	-68,557	-41,587	-55,177
ΔT_3	-319,599	-330,545	-289,353	-232,774	-317,362	-280,051	-159,378	-216,446
ΔT_4	-620,710	-673,006	-552,216	-435,137	-616,141	-538,936	-292,023	-405,429

Fonte: Autor/2025

Tabela 3 – Valores da entropia da dissociação do acetato de etila. (KJ/mol)

	$C_4H_8O_2$	$C_4H_7O_2^*$	$C_3H_5O_2$	$C_2H_3O_2$	$*C_4H_7O_2$	$C_2H_5O_2$	CH_3	C_2H_5
ΔT_1	0	0	0	0	0	-0,046	-0,033	-0,025
ΔT_2	24	25	57	35	68	53,864	21,744	32,781
ΔT_3	119	117	162	103	230	162,669	57,170	96,000
ΔT_4	243	234	239	153	302	245,048	82,642	144,845

Fonte: Autor/2025

Tabela 4 – Valores da entalpia da dissociação do acetato de etila. (KJ/mol)

	$C_4H_8O_2$	$C_4H_7O_2^*$	$C_3H_5O_2$	$C_2H_3O_2$	$*C_4H_7O_2$	$C_2H_5O_2$	CH_3	C_2H_5
ΔT_1	-18,379	-15,753	-13,128	-10,502	-15,753	-13,127	-8,401	-7,876
ΔT_2	25,989	26,738	22,534	14,025	27,131	21,382	8,609	12,972
ΔT_3	124,740	122,944	100,023	63,902	125,974	101,688	345,384	59,803
ΔT_4	252,712	243,940	194,573	125,112	249,191	203,770	66,104	120,019

Fonte: Autor/2025

Os dados obtidos a partir da dissociação da molécula de acetato de etila foram considerados exclusivamente para fins comparativos e de análise termodinâmica preliminar. No entanto, o foco central deste estudo é a avaliação das reações isodésmicas, as quais oferecem maior confiabilidade na estimativa de entalpias de formação devido à minimização dos erros sistemáticos associados aos métodos computacionais empregados.

Após a redução e organização dos dados de energia, tais informações foram utilizadas como base para novos cálculos envolvendo diferentes espécies moleculares. A análise incluiu a aplicação de constantes físicas fundamentais, como a constante de Boltzmann ($K_B = 1,38 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1}$), utilizada para correlacionar a energia cinética média das

partículas com a temperatura termodinâmica, e a constante de Planck ($h = 6,626 \times 10^{-34}$ J·s), essencial em formulações que envolvem estados de transição e estimativas de frequências moleculares.

Importante ressaltar que, para a análise termodinâmica, os valores computados a 0 K foram desconsiderados. Embora úteis como ponto de referência teórico, o zero absoluto (Duarte, 2023) representa uma condição não observável na prática, na qual todas as partículas estariam em repouso absoluto, sem movimento translacional, vibracional ou rotacional. Consequentemente, para fins práticos, as análises consideraram temperaturas a partir de 298 K.

As variações de entalpia (ΔH), energia livre de Gibbs (ΔG) e entropia (ΔS) foram utilizadas para caracterizar o comportamento termodinâmico das reações propostas. A partir da análise estrutural e energética da molécula de acetato de etila, foram determinadas as reações isodésmicas correspondentes, conforme apresentado na figura 2.

Seguindo a mesma metodologia aplicada à dissociação da molécula, os dados obtidos foram organizados de forma a subsidiar cálculos adicionais e comparações estruturais. Para uma análise mais precisa do comportamento termodinâmico das espécies, foi realizada uma avaliação da variação de temperatura (ΔT), considerando quatro intervalos, com base em uma temperatura de referência de 0 K (T_1). Essa abordagem permitiu a análise da evolução das propriedades moleculares com o aumento da temperatura, contribuindo para uma compreensão mais aprofundada sobre estabilidade e reatividade.

Ao final desta seção, é apresentada uma tabela síntese contendo todos os valores convertidos, organizados por propriedade e temperatura, servindo como base consolidada para a interpretação dos resultados.

Tabela 5 – Valores finais da entalpia das reações isodesmicas. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
CO₂	-3	3,266	12,939	5,229
CH₄	-2	3,008	13,973	6,564
C₂H₄	-2	3,904	18,682	8,948
CH₃COOH	-4	6,358	28,952	13,942
CO	-2	2,260	8,275	28,878
C₂H₅OCH₃	-5	8,009	9,763	20,182
H₂O	-2	2,615	20,007	3,801
CH₃COH	-3	5,050	56,048	11,393
C₂H₂	-3	3,652	32,555	6,181
C₂O	-3	4,342	42,789	8,305
C₂H₆	-3	4,734	56,705	12,024
C₂H₅OH	-4	6,121	71,475	14,688
CH₃CHO	-3	5,050	56,048	11,393
CH₂CO	-3	4,343	23,038	8,306

Fonte: Autor/2025

Tabela 6 – Valores finais da energia livre de Gibbs das reações isodesmicas. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
CO₂	34,132	-45,746	-173,661	-315,598
CH₄	28,881	-39,663	-152,793	-283,383
C₂H₄	34,132	-46,796	-182,753	-341,819
CH₃COOH	24,008	-62,410	-248,553	-469,187
CO	28,881	-41,595	-154,082	-275,155
C₂H₅OCH₃	44,634	-66,616	-273,595	-530,022
H₂O	28,880	-40,175	-150,806	-272,062
CH₃COH	36,757	-56,353	-221,353	-415,067
C₂H₂	23,629	-35,845	-141,068	-262,434
C₂O	36,757	-52,573	-203,297	-375,249
C₂H₆	34,131	-49,207	-196,151	-373,548
C₂H₅OH	39,382	-58,729	-235,767	-449,270
CH₃CHO	39,382	-56,351	-221,348	-797,044
CH₂CO	36,757	-52,575	-79,704	-375,257

Fonte: Autor/2025

Tabela 7 – Valores finais da entropia das reações isodesmicas. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
CO₂	0	22	57	60
CH₄	0	20	59	90
C₂H₄	0	26	78	119
CH₃COOH	0	42	123	182
CO	0	15	37	51
C₂H₅OCH₃	0	53	164	252
H₂O	-0,016	17,560	43,605	61,496
CH₃COH	-0,029	40,496	12,338	187,54
C₂H₂	-0,020	24,367	63,839	90,843
C₂O	-0,020	28,886	79,696	115,58
C₂H₆	-0,025	31,421	99,005	153,55
C₂H₅OH	-0,029	40,496	12,338	187,54
CH₃CHO	-0,029	33,476	99,390	149,45
CH₂CO	-0,025	28,226	79,692	115,57

Fonte: Autor/2025

Tabela 8 – Valores finais da energia térmica das reações isodesmicas. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
CO₂	-7,877	85,748	33,971	62,282
CH₄	-5,251	78,975	36,686	75,640
C₂H₄	-5,251	102,49	49,013	99,477
CH₃COOH	-10,502	166,92	76,726	149,41
CO	-5,251	59,226	21,726	38,870
C₂H₅OCH₃	-13,128	21,027	103,46	21,181
H₂O	-5,251	68,656	25,840	48,002
CH₃COH	-7,876	132,58	61,883	123,93
C₂H₂	-9,588	38,390	71,812	71,8126
C₂O	-11,399	48,626	93,050	93,0503
C₂H₆	-12,429	62,542	130,235	130,235
C₂H₅OH	-10,502	160,706	77,313	156,876
CH₃CHO	-7,876	132,58	61,883	123,93
CH₂CO	-7,876	114,025	79,664	93,052

Fonte: Autor/2025

Com base nas reações isodésmicas propostas, foi possível determinar a entalpia de formação relativa do acetato de etila e de outras espécies químicas associadas. Os cálculos realizados referem-se à variação de entalpia (ΔH) dessas reações em diferentes temperaturas, com o objetivo de estimar a energia envolvida em sua formação ou decomposição.

Como o software Gaussian fornece diretamente a soma das entalpias eletrônicas e térmicas de cada molécula, foi adotado um procedimento simplificado para o cálculo da entalpia de reação. Esse método consiste em calcular a diferença entre os valores totais dos produtos e dos reagentes. Essa abordagem é válida, pois em reações isodésmicas o número e o tipo de ligações químicas — e, portanto, o número atômico dos elementos envolvidos — permanecem constantes em ambos os lados da equação (Ochterski, 2000). Assim, as contribuições atômicas se anulam, permitindo o uso exclusivo dos dados moleculares obtidos.

A variação de entalpia (ΔH) foi determinada por meio da seguinte equação:

$$\Delta H_R = [\sum \Delta H^\circ_{\text{produtos}}] - [\sum \Delta H^\circ_{\text{reagentes}}] \text{ (MOORE, 1976)}$$

Essa grandeza permite avaliar se a reação é exotérmica (libera energia) ou endotérmica (absorve energia), sendo um parâmetro fundamental para a análise da viabilidade energética do sistema químico.

Tabela 9 – Valores da variação da entalpia das reações. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
REAÇÃO 1	-18,372	26,712	119,659	237,304
REAÇÃO 2	-15,746	26,932	125,015	248,798
REAÇÃO 3	-18,372	26,951	125,146	250,589
REAÇÃO 4	-20,997	29,702	126,065	243,649
REAÇÃO 5	-20,997	29,752	132,847	262,059
REAÇÃO 6	-15,746	26,507	123,718	247,766
REAÇÃO 7	-18,372	27,463	-119,379	249,832

Fonte: Autor/2025

A partir da análise dos dados de entalpia das reações isodésmicas, observou-se que alguns valores de ΔH foram negativos, indicando que essas reações são exotérmicas ($\Delta H < 0$), ou seja, ocorrem com liberação de calor. Nas variações de temperatura ΔT_2 , ΔT_3 e ΔT_4 , os valores de entalpia foram, em sua maioria, positivos, caracterizando reações endotérmicas ($\Delta H > 0$), em que há absorção de calor pelo sistema. Apesar das diferenças entre os valores, estas ocorrem principalmente na ordem de centenas de milésimos (ou centésimos), indicando baixa variação relativa entre as reações e confirmando a consistência dos dados.

Uma exceção foi observada na Reação 7, especificamente na variação ΔT_3 , cujo valor de ΔH foi negativo, destoando dos demais resultados. Essa anomalia ainda não pôde ser plenamente explicada, sendo necessário um aprofundamento na análise da estrutura dos reagentes e produtos envolvidos, ou uma reavaliação dos parâmetros computacionais para essa reação em particular. Essas variações refletem a troca de energia térmica entre o sistema e o meio, sendo fundamentais para a avaliação da viabilidade energética das reações simuladas.

Em seguida, foram realizados os cálculos da variação da entropia (ΔS) para as reações isodésmicas. A variação foi obtida por meio da equação:

$$\Delta S_R \text{ reação} = [\sum \Delta S^\circ \text{ produtos}] - [\sum \Delta S^\circ \text{ reagentes}]$$

A entropia dos reagentes foi subtraída dos produtos, permitindo avaliar a alteração no grau de desordem do sistema ao longo da reação. Esse parâmetro é essencial para estimar a espontaneidade do processo e a disponibilidade de estados acessíveis em condições de temperatura e energia constantes.

Tabela 10 – Valores da variação da entropia das reações. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
REAÇÃO 1	4	-5,743	-28,225	-57,722
REAÇÃO 2	4	-5,743	-28,218	-57,710
REAÇÃO 3	4	-5,743	-28,218	-57,708
REAÇÃO 4	4	-5,736	-28,212	-57,709
REAÇÃO 5	4	-5,736	-28,203	-57,691
REAÇÃO 6	4	-5,744	-28,220	-57,712
REAÇÃO 7	4	-5,742	-28,216	-57,708

Fonte: Autor/2025

A análise dos dados mostrou que todas as moléculas envolvidas apresentaram entropia absoluta positiva, como esperado. No entanto, ao calcular a variação da entropia nas reações isodésmicas, os valores resultaram negativos e próximos de zero, indicando uma ligeira diminuição no grau de desordem do sistema.

Esse comportamento sugere que, embora os reagentes e produtos apresentem entropias positivas individualmente, o processo como um todo leva a uma organização ligeiramente maior no estado final, caracterizando reações com variação entrópica negativa, porém moderada ($\Delta S < 0$). Os valores são muito próximos entre si e variam apenas em ordens decimais, o que dificulta a distinção gráfica, mas comprova a precisão e a baixa dispersão dos dados.

Do ponto de vista físico-químico, a entropia está associada à probabilidade dos estados acessíveis de um sistema. No caso do acetato de etila enquanto potencial biocombustível, os valores obtidos estão em conformidade com os parâmetros da literatura para substâncias no estado líquido. Variações significativas nesses valores poderiam indicar mudanças no estado físico, o que não foi observado, reforçando a estabilidade entrópica do sistema nas temperaturas analisadas (MOORE, 1976).

Dando continuidade à análise termoquímica, foi realizada a avaliação da variação da energia livre de Gibbs (ΔG) para as reações isodésmicas. O cálculo foi feito a partir da seguinte expressão:

$$\Delta G_R = [\sum \Delta G^\circ_{\text{produtos}}] - [\sum \Delta G^\circ_{\text{reagentes}}]$$

A energia livre de formação dos reagentes foi subtraída da dos produtos, permitindo determinar a quantidade de energia disponível para a realização de trabalho útil, sob condições de temperatura e pressão constantes. A variação de ΔG é fundamental para a avaliação da espontaneidade das reações, sendo negativa ($\Delta G < 0$) para processos espontâneos e positiva ($\Delta G > 0$) para não espontâneos nessas condições.]

Tabela 11 – Valores da variação da energia livre de Gibbs das reações. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
REAÇÃO 1	97,167	-132,177	-509,086	-938,436
REAÇÃO 2	76,163	-109,178	-431,184	-808,642
REAÇÃO 3	73,537	-108,183	-427,556	-802,813
REAÇÃO 4	89,290	-132,345	-513,105	-947,200
REAÇÃO 5	99,792	-143,346	-553,409	-1.021,588
REAÇÃO 6	78,788	-112,672	-442,574	-827,755
REAÇÃO 7	76,163	-111,276	-315,337	-822,163

Fonte: Autor/2025

A análise dos dados de variação da energia livre de Gibbs (ΔG) revelou que a maioria das reações apresentou valores negativos, indicando que os processos ocorrem de forma espontânea ($\Delta G < 0$). Observou-se ainda que, à medida que a temperatura aumenta, os valores de ΔG tendem a diminuir, o que demonstra uma maior redução da energia livre do sistema e, conseqüentemente, uma maior capacidade de realização de trabalho útil.

Embora os valores de ΔG nas variações ΔT_2 , ΔT_3 e ΔT_4 apresentem diferenças numéricas significativas, a tendência geral se mantém: todas as sete reações analisadas resultam em ΔG negativo, reforçando a natureza espontânea dos processos simulados. Esses resultados confirmam que, nas condições simuladas, o acetato de etila e seus derivados apresentam comportamento termodinamicamente favorável, reforçando sua viabilidade como composto energético em aplicações de combustão.

Com os valores obtidos para a variação da energia livre de Gibbs (ΔG), foi possível calcular a constante de equilíbrio K (Rezende; Miranda, 2014) de cada reação isodérmica:

Formula 1 – Constante de equilíbrio K

$$K = e^{\frac{-\Delta G}{R.T}}$$

Fonte: Autor/2025

Essa equação demonstra que quanto mais negativo for o valor de ΔG , maior será o valor de K, indicando que a reação favorece a formação dos produtos. Assim, o cálculo de K permite quantificar o deslocamento do equilíbrio químico, complementando a análise da espontaneidade reacional. A interpretação dos valores calculados para a constante de equilíbrio K permite inferir o sentido predominante das reações químicas.

Com base nos valores de ΔG obtidos nas temperaturas simuladas, os valores de K encontrados indicaram que, na maioria das reações e faixas de temperatura analisadas, o equilíbrio tende a favorecer a formação dos produtos, já que K foi consistentemente maior que 1, conforme será apresentado nas tabelas a seguir.

Tabela 12 – Valores da constante de equilíbrio. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
REAÇÃO 1	-39	318,117	612,618	752,857
REAÇÃO 2	-31	262,763	518,874	648,730
REAÇÃO 3	-30	260,368	514,508	644,054
REAÇÃO 4	-36	318,521	617,455	759,888
REAÇÃO 5	-40	344,997	665,956	819,565
REAÇÃO 6	-32	271,173	532,580	664,064
REAÇÃO 7	-31	267,812	379,467	659,577

Fonte: Autor/2025

Após a coleta e redução dos dados de energia livre de Gibbs (ΔG), esses valores foram utilizados para a realização de novos cálculos voltados à estimativa da constante da taxa de reação K, em função da temperatura, para cada radical analisado em relação à molécula principal (acetato de etila). O objetivo é compreender a viabilidade cinética dos processos simulados, com base nos parâmetros obtidos. Para esses cálculos, foram empregadas constantes fundamentais da física, o cálculo da constante de taxa foi realizado em três etapas principais: primeiramente, determinou-se a constante de equilíbrio K, conforme descrito anteriormente; em seguida, aplicou-se parcialmente a equação da constante de taxa com base na teoria do estado de transição; por fim, foi realizado o cálculo final de K, considerando os parâmetros termodinâmicos obtidos e as constantes físicas envolvidas.

A equação geral usada como base será derivada da forma:

$$k(T) = \frac{k_B T}{h c^\circ} \implies \begin{array}{c|c|c|c} \Delta T_1 & \Delta T_2 & \Delta T_3 & \Delta T_4 \\ \hline 6,23 \text{ e}^{+12} & 1,04 \text{ e}^{+15} & 2,08 \text{ e}^{+13} & 1,37 \text{ e}^{-53} \end{array}$$

Na área da cinética química, a taxa de reação refere-se à rapidez com que os reagentes são consumidos e os produtos são formados ao longo do tempo. A taxa de reação permite estimar o tempo necessário para a formação de produtos, com base no consumo proporcional dos reagentes. Em uma reação simples, a conversão ocorre de forma estequiometricamente equivalente — por exemplo, se uma quantidade X de reagente é consumida, X de produto será formado.

$$k(T) = \frac{k_B T}{h c^\circ} e^{-\Delta^\ddagger G^\circ / RT}$$

Tabela 13 – Valores final da constante de equilíbrio. (KJ/mol)

	ΔT_1	ΔT_2	ΔT_3	ΔT_4
REAÇÃO 1	-2,43 e ⁺²¹	3,31 e ⁺¹⁹	1,27 e ⁺¹⁸	1,03 e ⁻⁴⁸
REAÇÃO 2	-1,93 e ⁺²¹	2,73 e ⁺¹⁹	1,08 e ⁺¹⁸	8,89 e ⁻⁴⁹
REAÇÃO 3	-1,87 e ⁺²¹	2,71 e ⁺¹⁹	1,07 e ⁺¹⁸	8,82 e ⁻⁴⁹
REAÇÃO 4	-2,24 e ⁺²¹	3,31 e ⁺¹⁹	1,28 e ⁺¹⁸	1,04 e ⁻⁴⁸
REAÇÃO 5	-2,49 e ⁺²¹	3,59 e ⁺¹⁹	1,39 e ⁺¹⁸	1,12 e ⁻⁴⁸
REAÇÃO 6	-1,99 e ⁺²¹	2,82 e ⁺¹⁹	1,11 e ⁺¹⁸	9,10 e ⁻⁴⁹
REAÇÃO 7	-1,93 e ⁺²¹	2,79 e ⁺¹⁹	7,89 e ⁺¹⁷	9,04 e ⁻⁴⁹

Fonte: Autor/2025

Dessa forma, observando os resultados obtidos, nota-se que a reação 3 na variação ΔT_3 apresenta a menor constante de taxa, sendo, portanto, a mais lenta entre as avaliadas nessa condição — como era esperado a partir da análise da energia livre de Gibbs. A frequência vibracional representa a intensidade com que os átomos de uma molécula vibram em torno de suas posições de equilíbrio. Esse parâmetro está diretamente relacionado ao grau de agitação térmica do sistema: quanto maior a energia térmica, maior será a frequência das vibrações moleculares. Essa grandeza é fundamental para diversos campos científicos.

No caso de compostos como o biodiesel, etanol ou acetato de etila, a frequência vibracional das moléculas pode afetar características como volatilidade, inflamabilidade e a energia liberada durante o processo de combustão (Oliveira et al., 2020). Um alto grau de agitação vibracional, por exemplo, pode indicar maior facilidade de evaporação, o que pode ser vantajoso em motores de combustão interna, ao facilitar a mistura com o ar e a ignição. Além disso, as vibrações moleculares também influenciam a estabilidade química e térmica do combustível, impactando diretamente sua capacidade de armazenamento, transporte e desempenho ao longo do tempo. Portanto, a análise das frequências vibracionais representa uma ferramenta importante para garantir a qualidade, eficiência e segurança dos combustíveis alternativos em diferentes aplicações industriais e energéticas.

CONCLUSÃO

Com base nos resultados obtidos, conclui-se que a aplicação da técnica de reações isodésmicas mostrou-se eficiente na avaliação termodinâmica e cinética de combustíveis alternativos. Essa abordagem permitiu identificar com precisão as reações envolvidas na absorção ou liberação de calor, bem como analisar o comportamento de espécies químicas derivadas do acetato de etila sob diferentes temperaturas.

A análise da variação da entalpia (ΔH) revelou que, nas variações de temperatura ΔT_2 , ΔT_3 e ΔT_4 , as reações apresentaram, em sua maioria, valores positivos, caracterizando processos endotérmicos, ou seja, com absorção de calor do meio. Um comportamento atípico foi observado na Reação 7 em ΔT_3 , cuja entalpia foi negativa, destoando dos demais casos e sugerindo a necessidade de estudos complementares.

A variação da entropia (ΔS), por sua vez, apresentou valores negativos e muito próximos de zero, indicando uma leve diminuição no grau de desordem do sistema, compatível com processos parcialmente organizados. Apesar da baixa visibilidade gráfica, a consistência entre os valores obtidos confirma a confiabilidade dos cálculos.

No caso da energia livre de Gibbs (ΔG), os resultados foram todos negativos nas temperaturas analisadas (excetuando-se 0 K, desconsiderado por representar o zero absoluto), indicando que as reações ocorrem de forma espontânea e que o sistema apresenta capacidade de realizar trabalho útil. Além disso, ao considerar aspectos da cinética química, a constante da taxa de reação (k) foi associada à temperatura, permitindo estimativas da rapidez com que as reações se processam. Essa análise é fundamental para prever o desempenho de combustíveis alternativos em condições reais de operação. Por fim, a frequência vibracional das moléculas foi discutida como parâmetro relacionado à estabilidade, volatilidade e eficiência dos combustíveis. Um alto grau de agitação molecular pode favorecer a combustão, mas também influenciar a capacidade de armazenamento e segurança do material.

Portanto, a compreensão dos parâmetros termodinâmicos e cinéticos obtidos neste estudo contribui significativamente para a caracterização e avaliação do acetato de etila como potencial combustível alternativo, reforçando a importância de abordagens computacionais na seleção e análise de compostos energéticos.

REFERÊNCIAS

MANAHAN, Stanley E. *Química ambiental*. 9. ed. Tradução de Félix Nonnenmacher. São Paulo: Cengage Learning, 2013.

SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, Craig B.; SNYDER, Scott A. *Guia de estudo e manual de soluções para acompanhar Química Orgânica*. Vol. 2. 12. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2015.

MOORE, Walter John. *Físico-química*. Vol. 2. 8.^a reimpr. São Paulo: Edgard Blücher, 2015.

GUARIEIRO, L. L. N.; VASCONCELLOS, P. C.; SOLCI, M. C. Poluentes atmosféricos provenientes da queima de combustíveis fósseis e biocombustíveis: uma breve revisão. *Revista Virtual de Química*, Salvador, v. 3, n. 6, p. 654–664, nov. 2011. Disponível em: <http://repositoriosenaiba.fieb.org.br/handle/fieb/392>. Acesso em: 06 jul. 2025.

CHAZIN, Eliza de Lucas. Acetato de Etila (CAS No. 141-78-6). *Revista Virtual de Química*, Niterói, v. 4, n. 6, p. 1095–1106, dez. 2012. Disponível em: <https://rvq-sub.sbq.org.br/index.php/rvq/article/view/350>. Acesso em: 06 jul. 2025.

IVANOV, Ricardo Boeira et al. Avaliação de combustíveis oxigenados para motores ciclo Otto. *Ciências Exatas e da Terra*, Porto Alegre, n. 142, p. 1–1, 2010. Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/handle/10183/35051>. Acesso em: 06 jul. 2025.

RAUPP, Daniele; SERRANO, Agostinho; MARTINS, Tales Leandro Costa. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química. *Revista Liberato*, Novo Hamburgo, v. 9, n. 12, p. 1–8, 2008. Disponível em: <https://revista.liberato.com.br/index.php/revista/article/view/123>. Acesso em: 06 jul. 2025.

TORRES, Luciana Andrade; HOVELL, Ian. Análise das energias de reações de compostos organomercuriais utilizando cálculos ab-initio e reações isodésmicas. *Jornada de Iniciação Científica - CETEM*, Rio de Janeiro, p. 1–7, 2003. Disponível em: <https://mineralis.cetem.gov.br/bitstream/cetem/759/1/Luciana%20Andrade%20Torres.pdf>. Acesso em: 06 jul. 2025.

MARTINS TOLEDO, Eduardo; OLIVEIRA, Solemar Silva. Estudo dos comprimentos de ligação da forma cetônica da curcumina no vácuo usando dinâmica molecular de Car-Parrinello. *Scientific@ - Multidisciplinary Journal*, Anápolis, v. 1, n. 1, p. 1–6, 2014. DOI: <https://doi.org/10.37951/2358-260X.2014v1i1.1079>. Acesso em: 06 jul. 2025.

BECKE, A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *Journal of Chemical Physics*, [S.l.], v. 98, p. 1372–1377, 1993.

DUARTE, Leonardo José. *[Química de vibrações moleculares]*. 2023. 170 f. Tese (Doutorado em Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2023. Orientador: Roy Edward Bruns. Disponível em: <https://repositorio.unicamp.br/acervo/detalhe/1266197>. Acesso em: 06 jul. 2025.

OLIVEIRA, Marcileia Dias de et al. Avaliação da inflamabilidade de espécies nativas do cerrado. *Dialnet*, Espanha, v. 33, n. 4, 2020. Disponível em: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=7864087>. Acesso em: 06 jul. 2025.

ALCAMÍ, Manuel; MÓ, Otilia; YÁÑEZ, Manuel. Química computacional: uma ferramenta útil (às vezes obrigatória) em estudos de espectrometria de massa. *Mass Spectrometry Reviews*, v. 20, n. 4, p. 195–245, 2001.

BAUMGARTNER, G. et al. Synthesis of high-performance parallel programs for a class of ab initio quantum chemistry models. *Proceedings of the IEEE*, v. 93, n. 2, p. 276–292, 2005. DOI: [10.1109/JPROC.2004.840311](https://doi.org/10.1109/JPROC.2004.840311).

CHEN, Long-Qing. Chemical potential and Gibbs free energy. *MRS Bulletin*, v. 44, n. 7, p. 520–523, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1557/mrs.2019.162>.

DUNNING Jr., T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. *Journal of Chemical Physics*, v. 90, p. 1007–1023, 1989. DOI: [10.1063/1.456153](https://doi.org/10.1063/1.456153).

TÍTULO INICIAL EM PORTUGUES EM FONTE TIMES NEW ROMAN 12PTS SEM
NEGRITO CENTRALIZADO

RESUMO

Todo o artigo deve estar em fonte Times New Roman 12pts, espaçamento simples, 0pts antes do parágrafo, 6pts após parágrafo. Após o espaço de uma linha vazia do título do documento inicial, deve constar a palavra RESUMO, sem nenhuma pontuação, escrita em fonte 12, caixa alta, centralizado, sem negrito. O conteúdo do RESUMO (começando na linha seguinte) é escrito em parágrafo único, com no máximo 150 palavras. Após o RESUMO, e depois de uma linha vazia, devem constar o indicativo “Palavras-chave”, que é escrito em fonte Times New Roman 12pts, à esquerda, caixa baixa, sem negrito, com 03 (três) palavras e separadas por ponto.

Palavras-chave: P1. P2. P3.

TÍTULO INICIAL EM INGLES EM FONTE 12 SEM NEGRITO CENTRALIZADO

ABSTRACT

Após o espaço de uma linha vazia sobre o indicativo de “Palavras-chave”, deve constar o título em Inglês. Em seguida a mais uma linha vazia, vem a palavra ABSTRACT, sem nenhuma pontuação, escrita em fonte Times New Roman 12pts, caixa alta, centralizado, sem negrito. O conteúdo do ABSTRACT (começando na linha seguinte) é escrito em Inglês, em fonte Times New Roman 12pts, justificado, espaçamento simples, parágrafo único, com no máximo 150 palavras. Após o ABSTRACT, e depois de uma linha vazia, devem constar o indicativo “Keywords”, que é escrito em fonte Times New Roman 12pts, à esquerda, caixa baixa, sem negrito, com 03 (três) palavras e separadas por ponto.

Keywords: K1.K2.K3

Área tecnológica: Os autores deverão indicar até três Áreas tecnológicas para o documento apresentado e conter a seguinte formatação: fonte Times New Roman 12pts, alinhamento à esquerda, caixa baixa, sem negrito. Em seguida, há uma quebra de página para a seção INTRODUÇÃO.

INTRODUÇÃO

Submissão

As submissões deverão ser apenas eletrônicas através do site.

Escopo dos artigos e Condições de Submissão

Os manuscritos devem obedecer ao Modelo de Submissão (disponível para download no site da revista), além disso, devem focar claramente aspectos tecnológicos e de inovação tecnológica.

Os autores devem confirmar que a submissão está em conformidade com as condições seguintes:

✓ A contribuição é original e inédita, e não está sendo avaliada para publicação por outra revista; caso contrário, justificar em "Comentários ao Editor".

✓ Os autores são obrigados, antes da submissão, a verificar a conformidade do documento com as Instruções de Escopo e Formatação - IEF da Revista.

✓ No momento do cadastro de submissão do documento, todos os autores, por ordem, devem ser informados no campo de metadados do sistema eletrônico do periódico. A Revista não se obriga a incluir novos autores, após a submissão do documento.

✓ Os autores submeteram o manuscrito ao DETETOR DE PLÁGIO antes desta submissão, tendo obtido resultado CLARO de que não estão cometendo plágio.

✓ Todos os autores foram nomeados.

✓ Está submetendo o manuscrito com o consentimento dos outros autores.

✓ Caso o trabalho submetido tiver sido contratado por algum empregador, tem o consentimento do referido empregador.

✓ Os autores estão cientes de que é condição de publicação que os manuscritos submetidos a esta revista não tenham sido publicados anteriormente e não sejam submetidos ou publicados simultaneamente em outro periódico sem prévia autorização do Conselho Editorial.

✓ Os autores concordam que o seu artigo ou parte dele possa ser distribuído e/ou reproduzido por qualquer forma, incluindo traduções, desde que sejam citados de modo completo esta revista e os autores do manuscrito.

✓ Revista Cadernos de Prospecção está licenciado com uma Licença Creative Commons Attribution 4.0. Esta licença permite que outros remixem, adaptem e criem a partir do seu trabalho para fins não comerciais, e embora os novos trabalhos tenham de lhe atribuir o devido crédito e não possam ser usados para fins comerciais, os usuários não têm de licenciar esses trabalhos derivados sob os mesmos termos.

Formatação

Os arquivos para submissão deverão estar em formato *Microsoft Word*, *Open Office* ou *RTF*, e devem ser ter tamanho menor que 2MB.

O formato indicado é papel tamanho A4. A margem superior é de 3cm e as demais são de 2cm.

A partir da Introdução, todo documento deve estar com fonte Times New Roman, fonte 12pts, texto justificado, espaçamento simples, 0pts antes do parágrafo, 6pts após parágrafo.

Tamanho do artigo

O artigo deverá possuir, no máximo 15 (quinze), e no mínimo 10 (dez) páginas COMPLETAS, incluindo tabelas, quadros, figuras, gráficos, ilustrações e referências.

Autores

No momento do cadastro de submissão do documento, todos os autores, por ordem, devem ser informados no campo de *metadados* do sistema eletrônico do periódico. A Revista não se obriga a incluir novos autores, após a submissão do documento.

São aceitos manuscritos com até 3 ou, no máximo 4 autores. Recomenda-se utilizar o campo “Comentários para o editor” para explicitar qual foi a contribuição de cada autor.

No caso do manuscrito ter fotos de pessoas, a autorização de uso de imagem deve ser anexada como documentação suplementar no momento da submissão.

No documento inicial, para avaliação cega, o(s) nome(s) do(s) autor(es) NÃO deve(m) aparecer no corpo do artigo. Pede-se, também, a eliminação de trechos que prejudiquem a garantia de anonimato na avaliação e de dados de identificação nas propriedades do arquivo enviado, para evitar o arquivamento da submissão.

Apenas nos trabalhos aprovados, na versão final do documento, o(s) nome(s) do(s) autor(es) deverá(ão) aparecer. A indicação acontecerá após o título em Português, por ordem de autoria, em fonte Times New Roman 12pts, centralizado, espaçamento simples, separados por ponto e vírgula. Haverá a indicação de afiliação, informando a Instituição, Setor da Instituição, Cidade, Estado e País. Após a indicação da Área tecnológica, será preciso indicar com o endereço eletrônico (e-mail) do autor de correspondência.

Cabeçalho e Rodapé

Não é necessário o(s) autor(es) preencherem cabeçalho, rodapé, e outros dados como datas de recebimento e aceite do documento. Esses itens serão inseridos no momento da editoração para publicação na Revista.

Seções

Obrigatoriamente, o documento deverá conter as seções, sem numeração, com os seguintes títulos: INTRODUÇÃO, METODOLOGIA, RESULTADOS E DISCUSSÃO, CONCLUSÃO, PERSPECTIVAS FUTURAS e REFERÊNCIAS.

A identificação das seções começa a partir da segunda página do documento com a seção INTRODUÇÃO.

O título das seções deverá ser escrito em letras maiúsculas, alinhamento justificado, sem negrito, fonte Times New Roman, tamanho 12pts.

Entre uma seção e outra deverá ser inserido um parágrafo vazio.

Subseções

Os subtítulos das seções, caso houverem, deverão ser escritos em minúsculo, alinhamento justificado, sem negrito, fonte Times New Roman, tamanho 12pts. Não devem ser colocados parágrafo antes ou após os subtítulos das seções.

Recomendações adicionais

O artigo deve estar focado no tema do Título.

O artigo deve integrar e sintetizar o conhecimento existente, gerando novas tabelas, gráficos, etc. que aportem inteligência e novas contribuições

A Introdução deve ter uma descrição clara e concisa do estado atual do conhecimento e ser focada no tema do artigo. Deve ainda conter as citações de documentos que os autores utilizaram como fontes.

A Introdução deve referenciar cuidadosamente trabalhos anteriores sobre o tema.

METODOLOGIA

Os manuscritos baseados em preenchimento de formulários e de pesquisas de opinião devem ter, pelo menos, 100 respondentes e ter aprovação do Comitê de Ética ou Termos de Consentimento pertinentes (favor anexar como documentação suplementar no momento da submissão). Recomenda-se utilizar o campo “Comentários para o editor” para explicitar o tipo de pesquisa e o número de respondentes.

A revisão da literatura deve estar incluída na seção Introdução e não em outras seções como Metodologia ou Discussão.

A Metodologia deve estar claramente descrita, ser ampla o suficiente e ser adequada para cobrir os objetivos do artigo.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Se os autores utilizarem Figuras, Gráficos, Tabelas, Quadros, ilustrações e citações diretas, os pareceristas da Revista também podem fazer considerações e sugestões quanto ao seu conteúdo, utilização, pertinência e apresentação.

Figuras, Gráficos, Tabelas, Quadros, ilustrações devem ser numerados consecutivamente com algarismo arábico, conforme o tipo. Seus títulos devem ficar na parte superior escritos em caixa baixa, justificados, em fonte tamanho Times New Roman, tamanho 12pts, e usando ponto final. A sua chamada deve constar do texto anterior à sua inclusão.

Quanto aos textos usados dentro da Tabela e Ilustrações devem ser em fonte Times New Roman, tamanho 12pts, conforme nos exemplos a seguir. No caso da fonte ser menor, os autores devem se assegurar a boa visibilidade para a leitura.

Texto texto texto texto texto texto (Tabela 1), texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto.

Tabela 1 – Título título título título título.

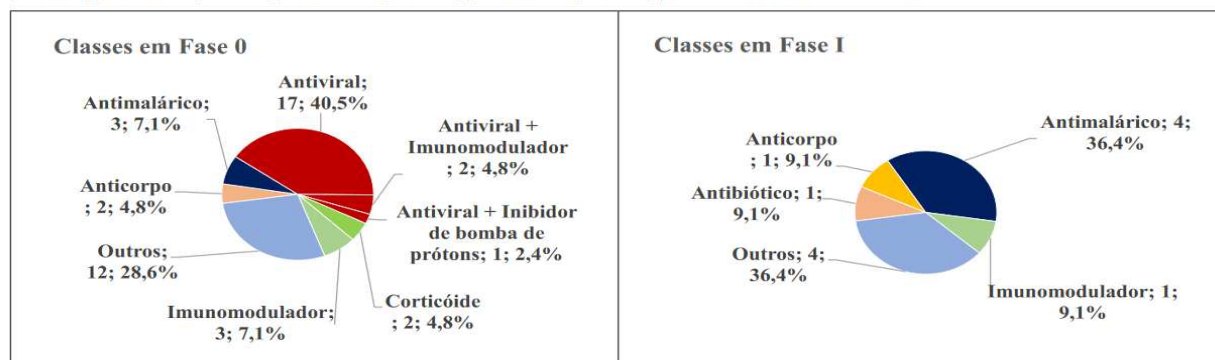
Localização	Ponto A	Ponto B	Ponto C	Ponto D	Ponto E
Ponto A	0	45	76	0	12
Ponto B	87	0	32	26	82
Ponto C	64	56	0	32	23
Ponto D	37	32	91	0	10
Ponto E	93	35	54	43	0

Fonte: Indicar autoria (ano)

No Gráfico 1 pode ser visto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto.

Gráfico 1 – Título título título título título.

Figura 5 – Distribuição dos tipos de fármacos por fases de testes clínicos: Fase 0 (TRL5); Fase I (TRL6); Fase II (TRL7); Fase III (TRL8); Fase IV (TRL9); Fase não informada



Fonte: Nome de Autor Principal (ano).

Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto (Quadro 1). Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto. Texto texto texto texto texto texto.

Quadro 1 – Título título título título título.

Substratos	Trecho 1	Trecho 2	Trecho 2
JJA	Texto texto	n.a	n.a
JJB	Texto texto	n.a	n.a
JJC	Texto texto	Texto texto	Texto texto
JJC + 1	Texto texto	n.a	n.a
JJC - 1	Texto	n.a	n.a

Fonte: Indicar autoria (ano).

Nota: Caso necessário, informar nota.

Recomendações adicionais

Os autores devem separar claramente a Discussão (com dados deste artigo) e a Introdução (com dados de outros documentos).

A Discussão deve ser profunda. A seção de Resultados e Discussão não pode consistir essencialmente de figuras e/ou Tabelas e/ou Quadros e/ou Gráficos, havendo ainda necessidade ter pelo menos três páginas de texto (medidas excluindo as Figuras, Gráficos, Tabelas, Quadros, ilustrações e citações diretas) para aprofundar a discussão de modo a que se possam elaborar as seções de Conclusões e Perspectivas Futuras solidamente, contribuindo substancialmente para o conhecimento e, conseqüentemente, podendo ser aceites pela revista.

O artigo deve apresentar equilíbrio entre texto e elementos gráficos.

CONCLUSÃO

A seção Conclusão deve resumir as Conclusões fundamentadas nos dados obtidos pelo artigo e pela discussão do artigo.

A Conclusão deve identificar possíveis inconsistências nos estudos existentes.

Os autores podem destacar lacunas no corpo da pesquisa existente que possam ser abordadas por futuros estudos.

PERSPECTIVAS FUTURAS

Esta seção deve apresentar as visões de futuro dos autores do artigo, baseadas no que os autores acharam em sua pesquisa relatada neste artigo.

Esta seção deve sugerir soluções para possíveis inconsistências nos estudos existentes.

REFERÊNCIAS

As referências e as citações empregadas devem seguir as normativas indicadas da ABNT.

Exemplo de patente (caso os autores não achem a norma ABNT, podem utilizar este formato que depois será revisto pela editoração para publicação na revista).

ALKIAYAT, M. A Practical Guide to Creating a Pareto Chart as a Quality Improvement Tool. **Global Journal on Quality and Safety in Healthcare**, [s.l.], v. 4, n. 2, p. 83-84, 1º maio 2021.

ARIA, M.; CUCCURULLO, C. Bibliometrix: An R-tool for comprehensive science mapping analysis. **Journal of Informetrics**, [s.l.], v. 11, n. 4, p. 959-975, 1º nov. 2017.