

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

LARISSA CESA

CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS USANDO A  
TOPOLOGIA MOLECULAR

CURITIBA

2013

LARISSA CESA

CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS USANDO A TOPOLOGIA  
MOLECULAR

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como parte das exigências para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Papa Matar Ndiaye

Coorientador: Prof. Dr. Marcelo Kaminski Lenzi

CURITIBA

2013

Este trabalho eu dedico aos meus pais e irmãos; à minha querida avó, Waldereza Nerone e ao meu noivo, Diogo, por todo o apoio e por terem acreditado em mim.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus pela vida, pela saúde e por me fazer manter a fé, mesmo nos momentos difíceis.

Aos meus pais e irmãos, pela família que somos, por todo apoio e incentivo desde sempre, pelo carinho, atenção e amor.

À minha avó, pelo amor, por toda ajuda, pelos conselhos e atenção.

Ao meu noivo pelo apoio, incentivo, pela cumplicidade e amor, pela paciência e respeito.

Aos meus amigos, Cinthia, Ju, Carol, Valéria, Paola, Alexis, Larissa pelas manhãs e tardes de estudo, os momentos de descontração. Giselle, pelos dias e noites de estudos, amizade e apoio sempre. Luis, Bruno pelo grande auxílio nas disciplinas, nos estudos, sempre dispostos a ajudar a todos.

A todos os professores do programa PPGEQ, de maneira especial ao Fernando, Lenzi e Corazza pela orientação e conselhos.

Ao professor Papa pela sua humildade, sua dedicação e por sempre estar aberto às minhas dúvidas. Obrigada professor, por toda a atenção, conselhos não voltados apenas ao trabalho, mas à vida.

A secretária do programa PPGEQ, Cintya.

Aos colegas do grupo de termodinâmica pelas dicas e pela ajuda.

A Capes, pelo auxílio financeiro.

Aos meus amigos de Curitiba, Campo Mourão e Mamborê.

Aos tios, tias, primos, de sangue e de coração. OBRIGADA!

## RESUMO

As propriedades termodinâmicas podem ser obtidas experimentalmente ou através de uma variedade de métodos semi-empíricos ou preditivos. O método de contribuição de grupo tem sido amplamente empregado nos últimos anos. Neste método as moléculas são formadas por grupos livres com contribuição individual numa determinada propriedade. Neste trabalho um novo método de cálculo de propriedades termodinâmicas é apresentado. O conceito de índice de conectividade baseado na topologia molecular, proposto por Randic e estendido por Kier e Hall foi utilizado para estimar as propriedades termodinâmicas de famílias de compostos que incluem alcanos lineares e ramificados, alcoóis, alcenos, alcinos, cetonas, ésteres e ácidos carboxílicos. Seis correlações lineares e quadráticas foram propostas para cálculos do calor de formação, da capacidade calorífica a pressão constante de gás ideal, da capacidade calorífica a pressão constante de líquidos, da entalpia de vaporização e da energia livre de Gibbs de formação. Os cálculos dos índices para várias ordens foram feitos com o uso do programa TOP.. Os resultados obtidos mostram que boas correlações tendo como variável o somatório dos índices de conectividades e o somatório dos índices de conectividade de valência, foram obtidas para todas as famílias de compostos investigados, com erro médio relativo inferior a 10%, quando comparados a dados da literatura. A inclusão de um termo quadrático não trouxe melhorias significativas no modelo linear. As correlações propostas foram utilizadas para determinar propriedades termodinâmicas de substâncias para as quais não existem dados experimentais, como é o caso dos alquil ésteres que formam o biodiesel e dos ácidos carboxílicos de cadeia longa.

Palavras chave: propriedades termodinâmicas, índice de conectividade, Correlações.

## ABSTRACT

Thermodynamic properties can be obtained experimentally or through a variety of methods. The most popular method are the group contribution techniques for which molecules are a mixtures of free group having individual contribution for a given property. This approach has been extensively used in last year. In this work a new estimation technique of thermodynamic properties based on molecular topology is used. The molecular connectivity index developed by Randic and enhanced by Kier and Hall was used to correlate several properties of organic compounds, including alkanes, alcohols, esters and carboxylic acids, Ketones, Alkenes and alkynes. Six linear and quadratic correlations were used to calculate thermodynamics properties, including standard heat of formation, ideal gas heat capacity, liquid heat capacity, enthalpy of vaporization and standard Gibbs energy of formation. Molecular connectivity index of all orders were obtained from the TOP software. Good correlations using the linear models which have as variable the sum of connectivity index and sum the valence connectivity index, were obtained for all thermodynamics properties investigated when results are compared with data from literature. The inclusion of the quadratic term does not improve significantly the properties for which the linear terms have poor performance. Successful correlations obtained in this work were used to calculate thermodynamics properties of fatty alkyl esters and long chain carboxylic acid for which experimental are not available.

Key words: thermodynamics properties, index connectivity, correlations.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Gráfico molecular do etano.....	18
Figura 2.2 – Gráficos moleculares e matrizes adjacentes dos compostos: propano e butano.....	19
Figura 2.3 – Gráficos moleculares e matrizes adjacências do propano.....	20
Figura 2.4 – Subestruturas do tipo linha, ramo, linha/ramo e anel.....	21
Figura 3.1 – Exemplo de arquivo de saída do programa TOP do ácido butanoico.....	27
Figura 4. 1 – Modelo 1 para calor de formação de alcanos gasosos, utilizando $\chi$ de ordem zero, a 298,15 K.....	33
Figura 4. 2 - Modelo 2 para calor de formação de alcanos gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	33
Figura 4. 3 - Modelo 2 para calor de formação de alcanos ramificados gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de ordens, a 298,15 K.....	34
Figura 4. 4 - Modelo 3 para calor de formação de alcanos ramificados gasosos, utilizando o modelo com a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens e o quadrado desta soma, a 298,15 K.....	35
Figura 4.5 - Modelo 4 para calor de formação de álcoois gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	36
Figura 4. 6 - Modelo 5 para calor de formação de álcoois gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	37
Figura 4. 7 - Modelo 4 para calor de formação de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	38
Figura 4. 8 - Modelo 4 para calor de formação de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	38
Figura 4. 9 - Modelo 4 para calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	39
Figura 4. 10 - Modelo 4 para calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	40

Figura 4. 11 - Modelo 5 para calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias pequenas e longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	40
Figura 4. 12 - Modelo 1 para capacidade calorífica de alcanos gasosos, utilizando $\chi$ de ordem zero, a 298,15 K.....	42
Figura 4. 13 - Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	42
Figura 4. 14 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alcanos gasosos, utilizando $\chi$ 's de ordem de zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	43
Figura 4. 15 - Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos ramificados gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	44
Figura 4. 16 - Modelo 3 para capacidade calorífica de alcanos ramificados gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	44
Figura 4. 17 - Modelo 4 para capacidade calorífica de álcoois gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	46
Figura 4. 18 - Modelo 6 para capacidade calorífica de álcoois gasosos, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem de zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	46
Figura 4. 19 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	47
Figura 4. 20 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	47
Figura 4. 21 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	48
Figura 4. 22 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	48
Figura 4. 23 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias curtas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	49
Figura 4. 24 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	49
Figura 4. 25 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando $\chi$ 's de valência ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	50

Figura 4. 26 - Modelo 1 para capacidade calorífica de alcanos líquidos, utilizando $\chi$ de ordem zero, a 298,15 K.....	51
Figura 4. 27 – Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos líquidos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	51
Figura 4. 28 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alcanos líquidos, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	52
Figura 4. 29 - Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos ramificados líquidos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	52
Figura 4. 30 - Modelo 3 para capacidade calorífica de alcanos ramificados líquidos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	53
Figura 4. 31 - Modelo 4 para capacidade calorífica de álcoois líquidos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	54
Figura 4. 32 - Modelo 6 para capacidade calorífica de álcoois líquidos, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	54
Figura 4. 33 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	55
Figura 4. 34 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	55
Figura 4. 35 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias pequenas, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	56
Figura 4. 36 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias longas, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	56
Figura 4. 37 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	57
Figura 4. 38 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	57
Figura 4. 39 – Modelo 6 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias pequenas, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	58
Figura 4. 40 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias longas, utilizando $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.....	58

Figura 4. 41 - Modelo 5 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias pequenas e longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	59
Figura 4. 42 - Modelo 1 para calor de vaporização de alcanos, utilizando $\chi$ de ordem zero, a 298,15 K.....	60
Figura 4. 43 - Modelo 2 para calor de vaporização de alcanos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	60
Figura 4. 44 - Modelo 3 para calor de vaporização de alcanos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	61
Figura 4. 45 - Modelo 2 para calor de vaporização de alcanos ramificados, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas ordens, a 298,15 K.....	61
Figura 4. 46 - Modelo 3 para calor de vaporização de alcanos ramificados, utilizando um modelo quadrático com a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens e o quadrado desta soma, a 298,15 K.....	62
Figura 4. 47 - Modelo 4 para calor de vaporização de álcoois gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	63
Figura 4. 48 - Modelo 5 para calor de vaporização de álcoois gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	63
Figura 4. 49 - Modelo 4 para calor de vaporização de ésteres de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	64
Figura 4. 50 - Modelo 4 para calor de vaporização de ésteres de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	64
Figura 4. 51 - Modelo 4 para calor de vaporização de ácidos carboxílicos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	65
Figura 4. 52 - Modelo 4 para calor de vaporização de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	65
Figura 4. 53 - Modelo 5 para calor de vaporização de ácidos carboxílicos gasosos a 298,15 K.....	66
Figura 4. 54 - Modelo 1 para energia de Gibbs de formação de alcanos gasosos, utilizando $\chi$ de ordem zero, a 298,15 K.....	67
Figura 4. 55 - Modelo 2 para energia de Gibbs de formação de alcanos gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.....	67

Figura 4. 56 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de álcoois gasosos, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	68
Figura 4. 57 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	68
Figura 4. 58 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	69
Figura 4. 59 - Modelo 5 para energia de Gibbs de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias pequenas e longas, utilizando a soma dos $\chi$ 's e $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.....	69

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Índices de conectividade para ciclo-alcanos (Kier e Hall, 1976).....	22
Tabela 2.2 - Dados para polióis de ponto de ebulição observados e calculados.....	25
Tabela 2.3 – Dados para ésteres de ponto de ebulição observados e calculados....	25
Tabela 4.1 - Alcanos ramificados.....	35, 44, 53, 62

## NOMENCLATURA

A, B, C, D, E e F - Parâmetros numéricos para os modelos 1 a 5

a, b, c, d, e - Parâmetros numéricos para o modelo 6

E – Erro relativo médio

$E_{ABS}$  – Erro absoluto

H - Entalpia

T - Temperatura

$C_P$  - Capacidade calorífica a pressão constante

$\Delta H_f$  - Calor de formação

$\Delta G_f$  – Energia livre de Gibbs de formação

$\Delta H_{vap}$  - Calor de vaporização

$\delta$  - Grau vértice

$\delta_v$  - Grau vértice de valência

$\chi$  - Índice de conectividade molecular

$\chi^v$  - Índice de conectividade molecular de valência

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	15
1.1 OBJETIVO GERAL.....	16
1.1.1 Objetivos específicos.....	16
1.2 ESCOPO.....	16
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	18
2.1 GRÁFICO MOLECULAR.....	18
2.2 OBTENÇÃO DOS ÍNDICES DE CONECTIVIDADE.....	19
2.3 CORRELAÇÕES ENTRE OS ÍNDICES DE CONECTIVIDADE E PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS.....	24
3. METODOLOGIA.....	27
3.1 MODELOS PROPOSTOS.....	28
3.1.1 Modelo 1.....	28
3.1.2 Modelo 2.....	28
3.1.3 Modelo 3.....	29
3.1.4 Modelo 4.....	29
3.1.5 Modelo 5.....	29
3.1.6 Modelo 6.....	30
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	32
4.1 CALOR PADRÃO DE FORMAÇÃO.....	32
4.2 CAPACIDADE CALORÍFICA A PRESSÃO CONSTANTE.....	41
4.2.1 Capacidade calorífica a pressão constante de gases.....	41
4.2.2 Capacidade calorífica a pressão constante de líquidos.....	50
4.3 CALOR DE VAPORIZAÇÃO.....	59
4.4 ENERGIA LIVRE DE GIBBS PADRÃO DE FORMAÇÃO.....	66
5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	70
5.1 CONCLUSÕES.....	70
5.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	71
REFERÊNCIAS.....	72
APÊNDICE A.....	73
APÊNDICE B.....	85

## 1. INTRODUÇÃO

As propriedades termodinâmicas são consideradas o coração da indústria química. Praticamente todas as operações industriais, que vão desde bombeamento até o tratamento de efluentes, passando pela etapa de reação e purificação, dependem do conhecimento das propriedades termodinâmicas dos compostos envolvidos. As aplicações das propriedades se estendem de processos, como de destilação, evaporação e extração; á projetos de trocadores de calor, reatores e bombas, e podem ocorrer em indústrias alimentícias, de bebidas, petroquímicas e etc.. As propriedades são fundamentais, também, na simulação e na otimização de processos (TERRON, 2009; POLING *et al.*, 2001). As propriedades termodinâmicas podem ser obtidas de diferentes maneiras, as quais incluem experimento, correlações empíricas e métodos de contribuição de grupos.

Apesar dos dados experimentais serem de grande relevância, as medições podem exigir a aquisição de novos equipamentos e reagentes, além disso, é preciso dispor de tempo, e essas condições representam um custo geralmente elevado. Em algumas situações é praticamente impossível obter estas propriedades experimentalmente, como é o caso das propriedades críticas de macromoléculas, em que a molécula se decompõe bem antes de alcançar a temperatura crítica. Neste caso, correlações empíricas são frequentemente empregadas. O princípio consiste em correlacionar determinadas propriedades de algumas substâncias e o modelo resultante é extrapolado para outras substâncias (TERON, 2009). A principal limitação desta abordagem é que estes modelos são limitados a determinadas faixas de temperatura e pressão e a determinados tipos de compostos como é o caso da indústria de petróleo. A extrapolação para outros tipos de compostos geralmente produz resultados muito diferentes daqueles esperados. Uma outra forma de estimar propriedades termodinâmicas diz respeito ao uso de métodos de contribuição de grupo (POLING *et al.*, 2001; TERRON, 2009). Neste formalismo a molécula como identidade não existe. É formada por um conjunto de grupos e subgrupos, que possuem uma contribuição para uma determinada propriedade termodinâmica. As técnicas de contribuição de grupos mais empregadas são aquelas propostas por Constantinou e Gani (1994) e por Joback (1987). A principal crítica relacionada ao uso do método de contribuição de grupo para cálculo de propriedades

termodinâmicas reside no fato da perda da identidade molecular. Por exemplo, o grupo metila do ácido acético, possui a mesma contribuição do grupo metila do etano. Melhorias significativas tem sido propostas para identificação dos grupos termodinamicamente estáveis (WU e SANDLER, 1991). Neste contexto, a busca de métodos alternativos de estimação de propriedade termodinâmicas continua sendo objeto de pesquisa no mundo inteiro.

Este trabalho propõe uma nova forma de cálculo de propriedades termodinâmicas através dos índices de conectividades moleculares, derivados da topologia molecular.

## 1.1. OBJETIVO GERAL

O objetivo geral do trabalho é determinação de propriedades termodinâmicas usando os índices de conectividade molecular.

### 1.1.1. Objetivos específicos

Especificamente, objetiva-se propor correlações para a obtenção de propriedades termodinâmicas de famílias de compostos que incluem alcanos, alcenos, alcinos, alcoóis, ésteres, cetonas e ácidos carboxílicos. As propriedades estimadas incluem o calor padrão de formação, a capacidade calorífica a pressão constante de gases ideais, a capacidade calorífica a pressão constante de líquidos, a entalpia de vaporização e a energia livre de Gibbs padrão de formação.

## 1.2. ESCOPO

O capítulo 1 apresenta uma breve introdução sobre a importância das propriedades termodinâmicas.

O capítulo 2 aborda uma revisão bibliográfica a respeito do conceito de topologia molecular, mais especificamente sobre o índice de conectividade molecular, e aplicações.

O capítulo 3 discute a metodologia empregada na obtenção das propriedades termodinâmicas investigadas neste trabalho, apresentando os modelos empregados e a forma de ajustes dos parâmetros.

O capítulo 4 é destinado aos resultados obtidos para as propriedades termodinâmicas de 4 famílias de compostos (alcanos, alcoóis, ésteres e ácidos carboxílicos).

O capítulo 5 expõe as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

O apêndice A mostra as propriedades termodinâmicas de alcenos, alcinos, éteres e cetonas.

O apêndice B apresenta os índices de conectividades dos compostos utilizados neste trabalho.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O cálculo das propriedades termodinâmicas baseadas na topologia molecular implica três hipóteses:

- 1) As propriedades da molécula são associadas a informações sobre a estrutura.
- 2) A representação da estrutura através de parâmetros numéricos.
- 3) A busca de correlações entre estes parâmetros e as propriedades que se tem interesse.

Dois métodos baseados neste formalismo são bastante utilizados: Os métodos QSAR (Quantitative Structure Activity Relationships), empregados na obtenção de correlações entre a estrutura e a atividade da molécula e os métodos QSPR (Quantitative Structure Property Relationships) usados para obter correlações entre a estrutura e propriedades. Quando os parâmetros numéricos representam informações contidas na estrutura molecular, como ligações entre os átomos, ramificação, forma e tamanho, ou seja, relacionadas a estrutura bidimensional da molécula, os parâmetros são denominados índices topológicos (NDIAYE *et. al.* 1998; KIER e HALL 1976). Dentre os índices topológicos estão o índice Kappa ( ${}^m\kappa$ ), ligado a forma da molécula, o índice de equivalência topológica (T), e o índice de conectividade molecular,  ${}^m\chi$  (NDIAYE *et. al.* 1998).

### 2.1. GRÁFICO MOLECULAR

A obtenção dos índices de conectividade começa pelo gráfico molecular, que representa a estrutura de uma molécula e suas ligações químicas conforme o exemplo mostrado na Figura 2.1.

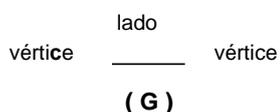


Figura 2.1 - Gráfico molecular do etano.

G ilustra o grau vértice do etano, onde os vértices representam os átomos de carbono e o lado, a ligação entre os átomos. Um lado é sempre separado por dois vértices. O gráfico molecular pode ser representado por meio de uma matriz, chamada de matriz adjacência ou conexão, que mostra se existe ou não conectividade entre os átomos ou vértices (Figura 2.2).

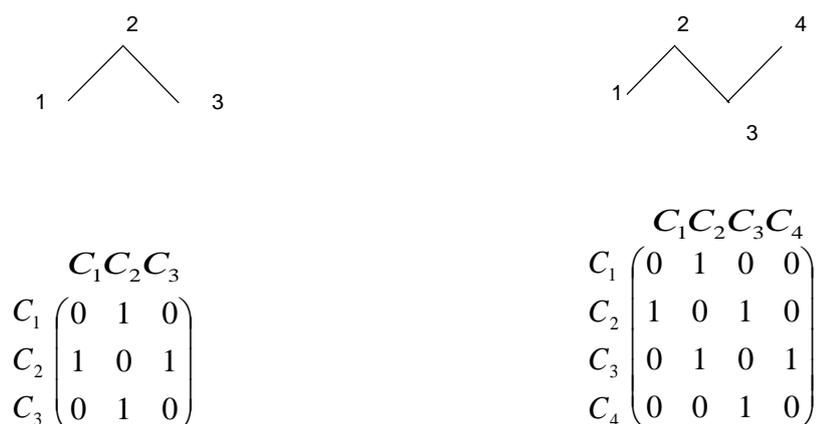


Figura 2.2 - Gráficos moleculares e matrizes adjacentes dos compostos: pronano e butano.

O número de vértices da molécula será igual ao número de linhas e colunas da matriz. E os valores 1 e 0 indicam a presença ou não da conexão entre os vértices. Pode-se verificar que, sempre, a diagonal principal da matriz será nula e os valores que compõe os triângulos superiores e inferiores dela serão simétricos.

## 2.2. OBTENÇÃO DO ÍNDICE DE CONECTIVIDADE

A matriz topológica pode ser usada junto com o gráfico molecular para desenvolver um índice topológico, ou seja, um parâmetro numérico que represente as informações referidas a estrutura molecular. Wiener (1947), sugeriu um índice topológico (índice de Wiener), referente ao número de lados encontrados no gráfico molecular. Enquanto que o Índice de Gordon e Scantlebury (1964) foi proposto buscando caracterizar as ramificações presentes na molécula. E o índice proposto por Platt (1952) representa o número de pares de lados adjacentes. Existem correlações importantes entre esses índices e algumas propriedades, no entanto,

eles são responsáveis por poucas informações relacionadas a estrutura, como exemplo, cita-se a não distinção entre isômeros.

Randic (1975), na tentativa de quantificar um maior número de características das moléculas propôs um novo índice de conectividade, através de informações relacionadas aos vizinhos mais próximos dos vértices, como forma de contemplar as ramificações. De acordo com Randic os vértices dos gráficos moleculares podem ser enumerados sem uma determinada ordem, como pode ser verificada na figura 2.3, para a molécula do propano.

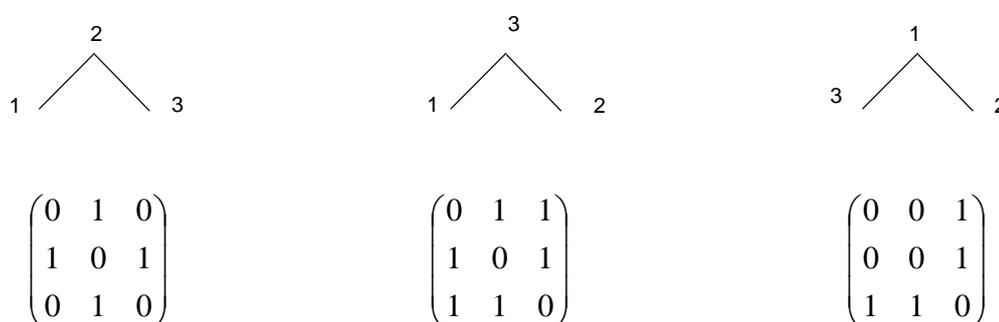


Figura 2.3 – Gráficos moleculares e matriz adjacências do propano.

Para quantificar as ramificações moleculares, Randic introduziu o conceito de grau vértice ( $\delta$ ). O valor atribuído a  $\delta$  se refere ao número de vértices vizinhos. Para o propano, por exemplo, os vértices que estão nas extremidades da molécula possuem apenas um vizinho, portanto,  $\delta = 1$  e o vértice que está no centro da molécula possui dois vértices vizinhos, assim  $\delta = 2$ .

Para o cálculo do peso entre dois vértices, Randic propôs:

$$C_{ij} = (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2} \quad 2.1$$

onde  $C_{ij}$  se refere ao peso entre os vértices  $i$  e  $j$  e  $\delta_i$  é o grau vértice de  $i$ .

O índice de conectividade molecular,  $\chi$ , é definido como a soma dos pesos dos vértices.

$$\chi = \sum C_{ij} = \sum (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2} \quad 2.2$$

Assim como o gráfico molecular possui diferentes tipos de conectividade, várias ordens de  $\chi$ 's podem ser definidas. (KIER e HALL, 1976).

$$\chi_0 = \sum (\delta_i)^{-1/2} \quad 2.3$$

$$\chi_1 = \sum (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2} \quad 2.4$$

$$\chi_2 = \sum (\delta_i \cdot \delta_j \cdot \delta_k)^{-1/2} \quad 2.5$$

$$\chi_3 = \sum (\delta_i \cdot \delta_j \cdot \delta_k \cdot \delta_l)^{-1/2} \quad 2.6$$

$$\chi_4 = \sum (\delta_i \cdot \delta_j \cdot \delta_k \cdot \delta_l \cdot \delta_p)^{-1/2} \quad 2.7$$

Cada ordem do índice de conectividade é responsável por uma informação diferente da estrutura. Baseadas nas subestruturas e subgráficos das moléculas. Como ilustrado na figura 2.4.

Sendo que o índice de conectividade de ordem zero, (Equação 2.3), possui apenas um tipo de subgráfico, referente ao vértice isolado.  $\chi_0$  representa o número de vértices. O índice de conectividade de primeira ordem, (Equação 2.4), está relacionado a ligações separadas por dois vértices e contém, também, apenas um tipo de subgráfico. O valor encontrado para o  $\chi$  de segunda ordem, (Equação 2.5), se refere a relação entre três vértices, isto é, a ligação entre dois vértices e a ligação adjacente. Para  $\chi_2$ , o número de subgráficos aumenta com a ramificação. Para o termo de terceira ordem, (Equação 2.6) pode ser levado em consideração os subgráficos do tipo linha e ramo, estes subgráficos são formados pelas ligações entre quatro vértices. E finalmente, para a obtenção dos valores do índice  $\chi$  de quarta ordem, são inclusos todos os possíveis subgráficos.

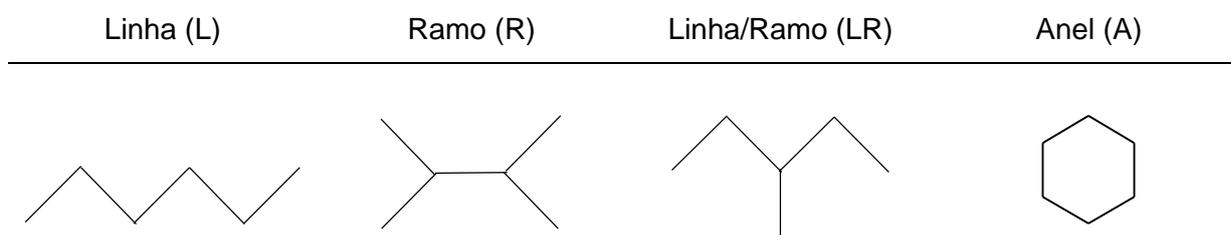


Figura 2.4 – Subestruturas do tipo linha, ramo, linha/ramo e anel.

Como ilustrado na tabela 2.1, para os isômeros 1,3-Dimetil-ciclo-hexano e 1,4-Dimetil-ciclo-hexano, o índice  $\chi$  de ordens zero e um são iguais. Porém o índice de conectividade de ordem 2 apresenta um valor diferente para os dois isômeros, ou seja, a diferença de uma determinada propriedade para estas duas moléculas pode ser atribuída ao fato de possuírem índices de conectividade de ordem superior a 2 diferentes.

**Tabela 2. 1 - Índices de conectividade para ciclo-alcanos (Kier e Hall, 1976).**

Composto	$\chi_0$	$\chi_1$	$\chi_2$	$\chi_3$	$\chi_4$	$\chi_5$	$\chi_6$	$\chi_7$
Ciclo-hexano	4,243	3,000	2,121	1,500	1,061	0,750	0,000	
							0,125	
Metil-ciclo-hexano	5,113	3,394	2,743	1,894	1,307	0,901	0,204	0,000
				0,289	0,000	0,000	0,000	0,000
					0,408	0,433	0,000	0,000
							0,102	0,102
1,3-Dimetil-ciclo-hexano	5,983	3,788	3,377	2,199	1,737	0,971	0,451	0,000
				0,577	0,000	0,000	0,000	0,000
					1,093	1,093	0,354	0,000
							0,083	0,083
1,4-Dimetil-ciclo-hexano	5,983	3,788	3,365	2,305	1,427	1,305	0,333	0,000
				0,577	0,000	0,000	0,000	0,000
					0,817	0,760	0,471	0,000
							0,083	0,167

A tabela 2.1 mostra também que a medida que a ordem aumenta, o valor dos  $\chi$ 's decresce consideravelmente.

Os índices de conectividade tais como propostos por Randic não levam em consideração a presença de heteroátomos e de insaturações e não podem ser aplicados a moléculas diferentes de alcanos. Por exemplo, como foi proposto por Randic, o n-pentano e 1-butanol possuem o mesmo gráfico, portanto os mesmos índices de conectividades.

A generalização da teoria de Randic foi feita por Kier e Hall (1976) com a redefinição do grau de vértice considerando a valência dos átomos (vértices):

$$\delta_i^V = \frac{Z_i^V + h_i}{Z_i + Z_i^V + 1} \quad 2.8$$

onde  $\delta_i^V$  é grau vértice de valência do vértice  $i$ ,  $Z_i^V$  é o número de elétrons de valência do átomo  $i$ ,  $h_i$  o número de átomos de hidrogênios ligados ao átomo  $i$  e  $Z_i$  representa o número atômico do átomo  $i$ .

Para a definição do índice de conectividade de valência é usado o mesmo formalismo descrito para equações 2.3 a 2.7.

$$\chi_0^V = \sum (\delta_i^V)^{-\frac{1}{2}} \quad 2.9$$

$$\chi_1^V = \sum (\delta_i^V \delta_j^V)^{-\frac{1}{2}} \quad 2.10$$

$$\chi_2^V = \sum (\delta_i^V \delta_j^V \delta_k^V)^{-\frac{1}{2}} \quad 2.11$$

$$\chi_3^V = \sum (\delta_i^V \delta_j^V \delta_k^V \delta_l^V)^{-\frac{1}{2}} \quad 2.12$$

$$\chi_4^V = \sum (\delta_i^V \delta_j^V \delta_k^V \delta_l^V \delta_p^V)^{-\frac{1}{2}} \quad 2.13$$

Para alcanos, o grau de vértice proposto por Kier e Hall equivale aquele proposto por Randic.

Para o n-pentano temos:

$$\chi_0 = \chi_0^V = (\delta_1)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 4,1213$$

$$\chi_1 = \chi_1^V = (\delta_1 \delta_2)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2 \delta_3)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3 \delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_4 \delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 2,4142$$

$$\chi_2 = \chi_2^V = (\delta_1 \delta_2 \delta_3)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2 \delta_3 \delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3 \delta_4 \delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 1,3516$$

$$\chi_3 = \chi_3^V = (\delta_1 \delta_2 \delta_3 \delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2 \delta_3 \delta_4 \delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 0,7071$$

$$\chi_4 = \chi_4^V = (\delta_1 \delta_2 \delta_3 \delta_4 \delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 0,3536$$

De maneira análoga, calcula-se os índices de conectividade molecular do 1-butanol.

$$\chi_0 = (\delta_1)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 4,1213$$

$$\chi_1 = (\delta_1\delta_2)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2\delta_3)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3\delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_4\delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 2,4142$$

$$\chi_2 = (\delta_1\delta_2\delta_3)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2\delta_3\delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3\delta_4\delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 1,3516$$

$$\chi_3 = (\delta_1\delta_2\delta_3\delta_4)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2\delta_3\delta_4\delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 0,7071$$

$$\chi_4 = (\delta_1\delta_2\delta_3\delta_4\delta_5)^{-\frac{1}{2}} = 0,3536$$

Os índices de conectividade molecular de valência do 1-butanol podem também ser obtidos usando o mesmo formalismo:

$$\chi_0^V = (\delta_1^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_4^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_5^V)^{-\frac{1}{2}} = 3,5685$$

$$\chi_1^V = (\delta_1^V\delta_2^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2^V\delta_3^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3^V\delta_4^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_4^V\delta_5^V)^{-\frac{1}{2}} = 2,0233$$

$$\chi_2^V = (\delta_1^V\delta_2^V\delta_3^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2^V\delta_3^V\delta_4^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_3^V\delta_4^V\delta_5^V)^{-\frac{1}{2}} = 1,0772$$

$$\chi_3^V = (\delta_1^V\delta_2^V\delta_3^V\delta_4^V)^{-\frac{1}{2}} + (\delta_2^V\delta_3^V\delta_4^V\delta_5^V)^{-\frac{1}{2}} = 0,5117$$

$$\chi_4^V = (\delta_1^V\delta_2^V\delta_3^V\delta_4^V\delta_5^V)^{-\frac{1}{2}} = 0,1581$$

O cálculo para o índice de conectividade molecular, apesar de parecer simples, pode se tornar bastante complicado, trabalhoso e com grandes chances de erro, quando se trata da obtenção dos descritores de moléculas complexas.

### 2.3 CORRELAÇÕES ENTRE ÍNDICES DE CONECTIVIDADE E PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS.

A determinação de propriedades termodinâmicas a partir dos índices de conectividades tem sido reportada na literatura. Estas propriedades incluem a temperatura normal de ebulição, calor de formação, calor de atomização, polarizabilidade molecular, índice de refração, suscetibilidade diamagnética, densidade, solubilidade em água (Somayajulo, 1972).

Dois exemplos da aplicação de conceito de topologia molecular em correlações entre propriedades e índices de conectividade proposto por Kier e Hall são mostrados nas tabelas, 2.2 e 2.3 para dióis, trióis e ésteres.

**Tabela 2.2 - Dados para polióis de ponto de ebulição observados e calculados.**

Composto	Ponto de ebulição ( $T_b$ )	
	Observado	Calculado
1. 2-Metil-2,4-pentanediol	196	197,3
2. Etanodiol	197,8	197,3
3. 1,3-Butanodiol	207,5	204,8
4. 1,3-Propanodiol	214,7	211,0
5. 1,2-Propanodiol	187,4	191,1
6. 2,3-Butanodiol	181,7	185,6
7. 1,4-Butanodiol	230,0	224,8
8. 1,5-Pentanodiol	238	238,5
9. Glicerol	290	292,7

**Tabela 2.3 - Dados para ésteres de ponto de ebulição observados e calculados.**

Composto	Ponto de ebulição ( $T_b$ )	
	Observado	Calculado
1. Éter-metil-propílico	38,9	43,6
2. Éter-butil-isopropílico	108,0	106,3
3. Éter-hexil-metílico	118,0	118,1
4. Éter-etil-pentílico	121,0	129,6
5. Éter-dibutílico	142,0	138,2

Para os polióis são propostos dois modelos, utilizando  $\chi_1$  e  $\chi_1^V$ :

$$T_b = 20,71\chi_1 + 159,38 \quad s = 34,0 \quad \text{Modelo 1}$$

$$T_b = 249,64\chi_1 - 222,1\chi_1^V - 29,11 \quad s = 3,78 \quad \text{Modelo 2}$$

O desvio padrão observado,  $s$ , diminui consideravelmente ao adicionar um termo referente ao índice de conectividade de valência de primeira ordem,  $\chi_1^V$ .

Para os ésteres, mostrados na tabela 2.3, a correlação sugerida também emprega  $\chi_1$  e  $\chi_1^V$ :

$$T_b = 79,15\chi_1 - 30,90\chi_1^V - 83,75 \quad s = 5,39 \quad \text{Modelo 2}$$

Sendo que o desvio obtido é próximo a 5%. Esses estudos puderam mostrar a importância do índice de conectividade de valência para as correlações.

### 3. METODOLOGIA

Neste capítulo é apresentada a metodologia empregada para determinação das propriedades termodinâmicas a partir dos índices de conectividade moleculares descritos no capítulo anterior. Uma descrição dos 6 modelos utilizados para a estimação das propriedades termodinâmicas das famílias de compostos investigados é feita.

Neste trabalho foi utilizado o programa TOP, desenvolvido por Ndiaye *et. al.* (1998). A Figura mostra um exemplo de saída do programa TOP para o ácido butanoico. Como pode ser observado, para a mesma molécula, os índices de conectividade e os índices de conectividade de valência podem ser obtidos em todas as ordens.

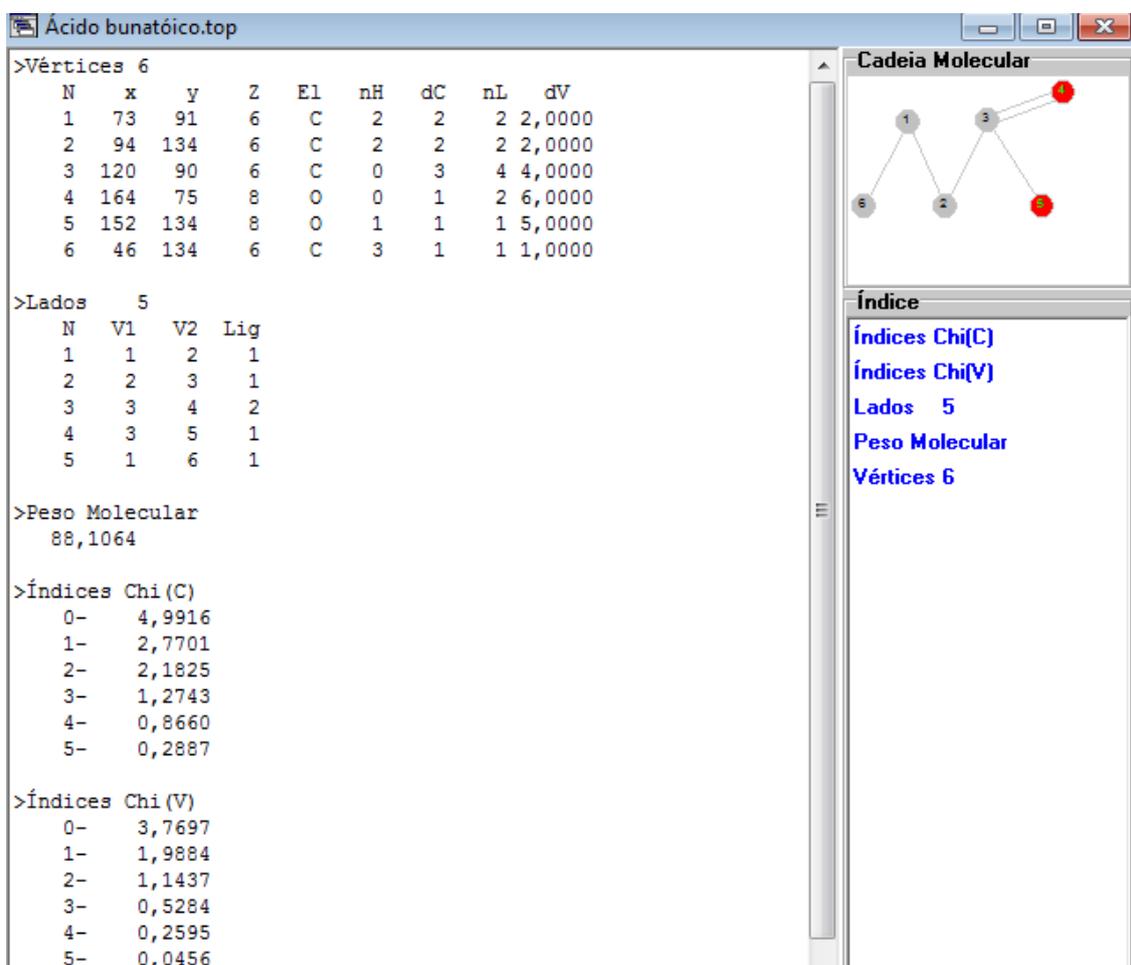


Figura 3.1 – Exemplo de arquivo de saída do programa TOP do ácido butanoico.

### 3.1. MODELOS PROPOSTOS

Com o objetivo de encontrar correlação entre estrutura e propriedades, foram propostos seis modelos tendo como variáveis os índices de conectividade e o somatório. As propriedades correlacionadas incluem calor padrão de formação, a capacidade calorífica a pressão constante para gás ideal e líquido, o calor de vaporização e a energia livre de Gibbs padrão de formação. As famílias de compostos investigadas incluem alcanos, alcenos, alcinos, alcoóis, cetonas, éteres, ésteres e ácidos carboxílicos.

#### 3.1.1. Modelo 1

Este modelo é dado pela equação (3.1). É um modelo linear em relação ao índice de conectividade de ordem zero com dois parâmetros ajustáveis (A e B). É utilizado na estimação das propriedades (P) de alcanos lineares. O índice de conectividade de ordem zero é uma medida do número de átomos de carbono que compõem o esqueleto molecular e conseqüentemente do peso molecular

$$P = A + B\chi_0 \quad 3.1$$

#### 3.1.2. Modelo 2

O modelo 2 (Equação 3.2) também é um modelo linear, mas usa como variável o somatório dos índices conectividade. Este modelo avalia a influência dos índices de conectividade numa determinada propriedade dos alcanos lineares, quando comparado ao modelo 1 que usa apenas o índice de conectividade de ordem zero. O modelo 2 é também utilizado para alcanos ramificados. O modelo 2 possui 2 parâmetros ajustáveis (A e B)

$$P = A + B \sum \chi \quad 3.2$$

### 3.1.3. Modelo 3

O modelo 3 é um modelo quadrático em relação ao somatório dos índices de conectividade. É utilizado para investigar a dependência quadrática da entalpia de vaporização dos alcanos lineares. Este modelo que possui três parâmetros ajustáveis (A, B e C) é também utilizado para a estimativa de todas as propriedades dos alcanos ramificados. Foi utilizado no cálculo da entalpia de vaporização dos alcanos lineares e ramificados.

$$P = A + B \sum \chi + C \sum \chi^2 \quad 3.3$$

### 3.1.4. Modelo 4

O modelo 4 (Equação 3.4) possui três parâmetros ajustáveis (A, B e C) e possui como variáveis os somatórios dos índices de conectividade e dos índices de conectividades de valência. Este modelo foi utilizado para determinação das propriedades termodinâmicas dos alcoóis, dos ésteres, dos ácidos carboxílicos, das cetonas e dos éteres.

$$P = A + B \sum \chi + C \sum \chi^V \quad 3.4$$

### 3.1.5. Modelo 5

Para algumas propriedades termodinâmicas, existe certa discrepância entre o modelo 4 e dados obtidos da literatura. Neste caso o modelo 5 (Equação 3.5) é empregado. O modelo possui 6 parâmetros ajustáveis e é quadrático em relação aos somatórios dos índices de conectividade e dos índices de conectividade de valência. O modelo 5 possui também um termo cruzado das duas variáveis.

$$P = A + B \sum \chi + C \sum \chi^V + D \sum \chi^2 + E \sum \chi^{V^2} + F \sum \chi \sum \chi^V \quad 3.5$$

### 3.1.6. Modelo 6

Nos cálculos de Engenharia, frequentemente se utiliza um modelo de capacidade calorífica de gases ideais dependente da temperatura de forma polinomial com 7 parâmetros ajustáveis para efeito de balanço de energia. O modelo 6 proposto neste trabalho utiliza os índices de conectividade de valência até a quarta ordem como variável (Equação 3.6) e possui 6 parâmetros ajustáveis.

$$C_p^\circ = Z + \chi_0^V T^a + \chi_1^V T^b + \chi_2^V T^c + \chi_3^V T^d + \chi_4^V T^e \quad 3.6$$

Foram usadas as variáveis  $\sum \chi$  e  $\sum \chi^V$  nos modelos 2, 3, 4 e 5 para que se possam diferenciar os isômeros. Dois isômeros, por exemplo, podem apresentar índices de conectividade de ordem zero, 1, 2 ou 3 iguais, mas essa igualdade não acontecerá em todas as ordens dos índices.

Os parâmetros presentes nas equações 3.1 a 3.5 foram ajustados aos dados experimentais da literatura extraídos de POLING *et. al.* (2001) e do DIPPR (Design Institute for Physical Properties). O ajuste foi feito através do software Statistica que faz uso do algoritmo de Levenberg-Marquadt, o qual é uma técnica de iteração que permite obter o mínimo de uma função multivariável não linear. Para a equação 3.6, o algoritmo de Levenberg-Marquadt não se aplica. Neste trabalho a função objetivo é minimizada é dada pela equação 3.7. Sendo que os parâmetros foram obtidos ajustando a equação a dados da literatura através do suplemento solver (Microsoft Excel) que busca minimizar a função objetivo, empregando o gradiente reduzido generalizado (GRG).

$$F = \sum_i^{np} (P_{literatura} - P_{calculado})^2 \quad 3.7$$

Com os valores das propriedades termodinâmicas obtidos através dos modelos apresentados acima faz-se o cálculo do erro relativo (Equações 3.8 e 3.9) médio para todas as propriedades investigadas neste trabalho.

$$E = \frac{1}{n} \frac{100|P_{lit} - P_{mod}|}{P_{lit}} \quad 3.8$$

Onde  $E$  é o erro relativo médio em porcentagem,  $P_{lit}$  é o valor da propriedade obtida da literatura e  $P_{mod}$  o valor da propriedade calculado a partir do modelo obtido por meio das correlações sugeridas por este trabalho. Multiplica-se por 100 para que o erro seja obtido em porcentagem.

$$E_{DIPPR} = \frac{1}{n} \frac{100|P_{DIPPR} - P_{mod}|}{P_{DIPPR}} \quad 3.9$$

Onde  $E_{DIPPR}$  é o erro relativo médio em porcentagem,  $P_{DIPPR}$  é o valor da propriedade extraída do DIPPR (Design Institute for Physical Properties) e  $P_{mod}$  o valor da propriedade calculado através deste trabalho.

Nos casos em que o valor das propriedades termodinâmicas é bastante baixo, próximo a zero, não foram usadas as fórmulas mostradas acima (Equações 3.8 e 3.9). Foi calculado, então, o erro absoluto.

$$E_{ABS} = |P_{lit} - P_{mod}| \quad 3.9$$

Onde,  $E_{ABS}$  é o erro absoluto,  $P_{lit}$  é o valor da propriedade obtido da literatura e  $P_{mod}$  o valor da propriedade calculado utilizando este trabalho.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos no cálculo das propriedades termodinâmicas que incluem calor de formação, capacidade calorífica, energia livre de Gibbs de formação e entalpia de vaporização para as famílias de compostos orgânicos incluindo alcanos, alcenos, alquinos, álcoois, cetonas, éteres, ésteres e ácidos carboxílicos. Os compostos do banco dados estão de acordo com a nomenclatura do IUPAC, com exceção de alguns ésteres e ácidos carboxílicos onde foi utilizado nomes comuns. Da literatura foram extraídos de POLING *et al.* (2001) e do banco de dados do DIPPR (Design Institute for Physical Properties).

Os dados para calor de formação no estado padrão ( $\Delta H_f^\circ$ ) e energia de Gibbs de formação no estado padrão ( $\Delta G_f^\circ$ ) estão a 298,15 K e 1,01325 bar.

Os dados pesquisados em POLING *et al.* (2001), são para gases ideais com temperatura de 298,15 K e pressão de 1 atm.

Para efeito de comparação, os diagramas apresentados têm como ordenadas as propriedades obtidas pela literatura e como abscissas as propriedades calculadas através dos modelos sugeridos neste trabalho. A linha na diagonal possui uma inclinação 45°. Para os dados da literatura, duas fontes foram empregadas. Nas figuras 4.10; 4.11; 4.24; 4.25; 4.40; 4.41; 4.52; 4.53 e 4.59 os dados foram extraídos do DIPPR e para tais foram utilizados os índices \* e \*\* para diferenciar os dados preditos e experimentais, respectivamente. Nos demais diagramas foram utilizados dados do POLING *et al.* (2001). Em todos os modelos propostos, o erro relativo (E) foi calculado e quando este for inferior a 5% o modelo proposto é considerado bom.

### 4.1 CALOR PADRÃO DE FORMAÇÃO

As figuras 4.1 e 4.2 exibem os diagramas de alcanos lineares gasosos e mostram, respectivamente, o modelo 1 e 2 para calor de formação.

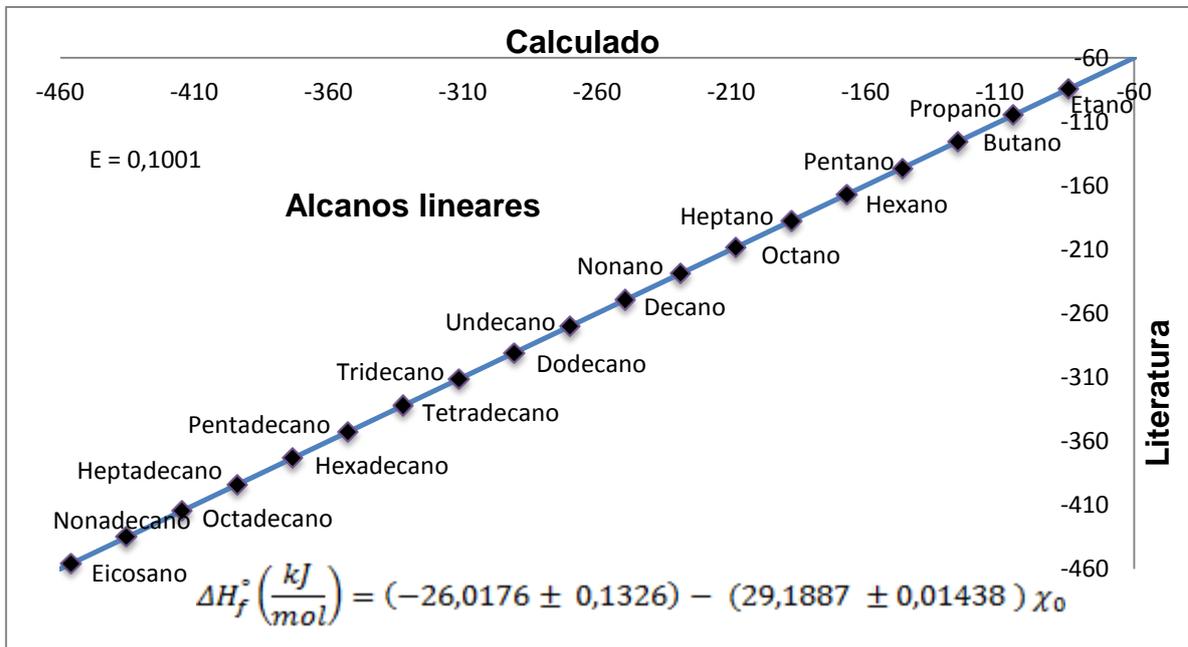


Figura 4. 1 – Modelo 1 para calor de formação de alcanos gasosos, utilizando  $\chi$  de ordem zero, a 298,15 K.

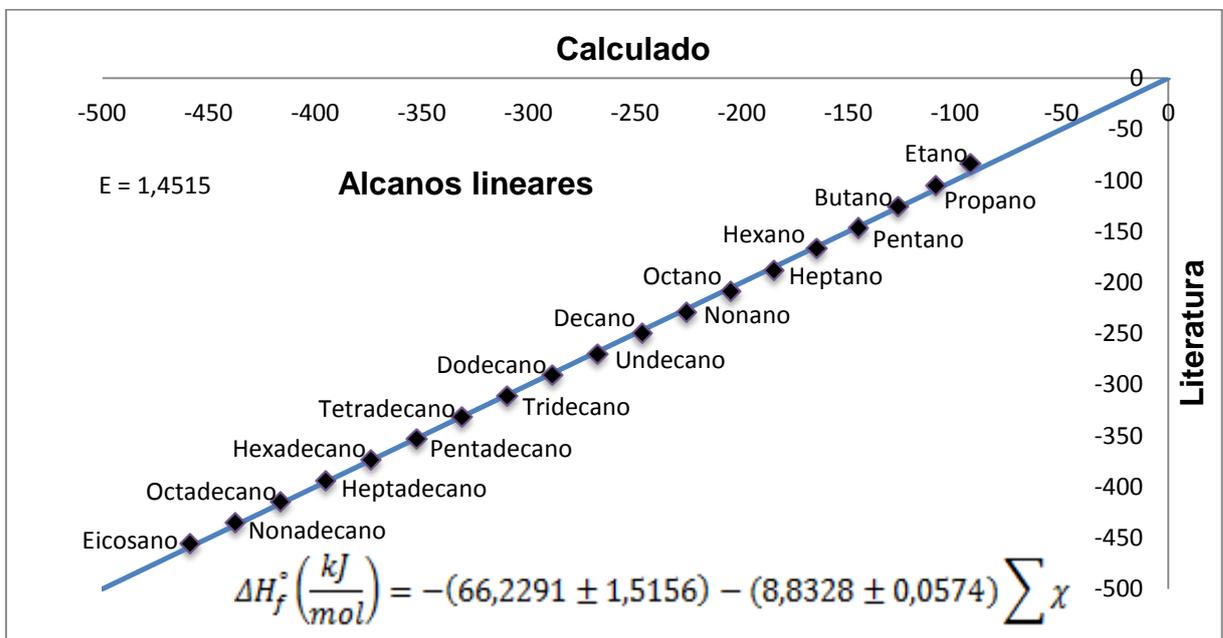


Figura 4. 2 - Modelo 2 para calor de formação de alcanos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

A comparação dos modelos 1 e 2, mostra que o erro relativo médio para o primeiro e segundo modelo são bastante próximos. Enquanto o modelo 2 representa várias informações referentes a estrutura molecular, devido a equação

conter a soma dos índices de conectividade,  $\chi$ , de todas as ordens, o primeiro, que utiliza  $\chi$  de ordem zero, traz informações relacionadas ao número de átomos e pontos de ramificação na molécula. Essa informação, portanto, referente ao  $\chi$  de ordem zero é de grande relevância para o cálculo do calor de formação dos alcanos lineares.

Para alcanos ramificados gasosos, os modelos 2 e 3 são utilizados para correlações do calor de formação. Os resultados são apresentados nas figuras 4.3 e 4.4, respectivamente.

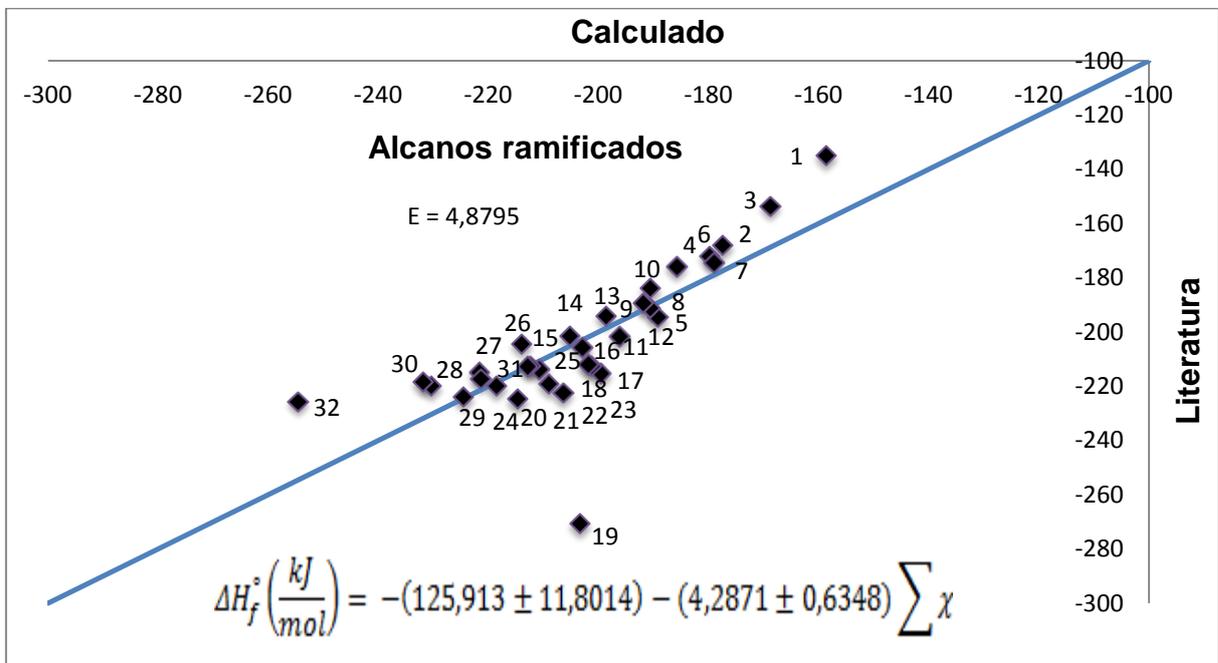


Figura 4. 3 - Modelo 2 para calor de formação de alcanos ramificados gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de ordens, a 298,15 K.

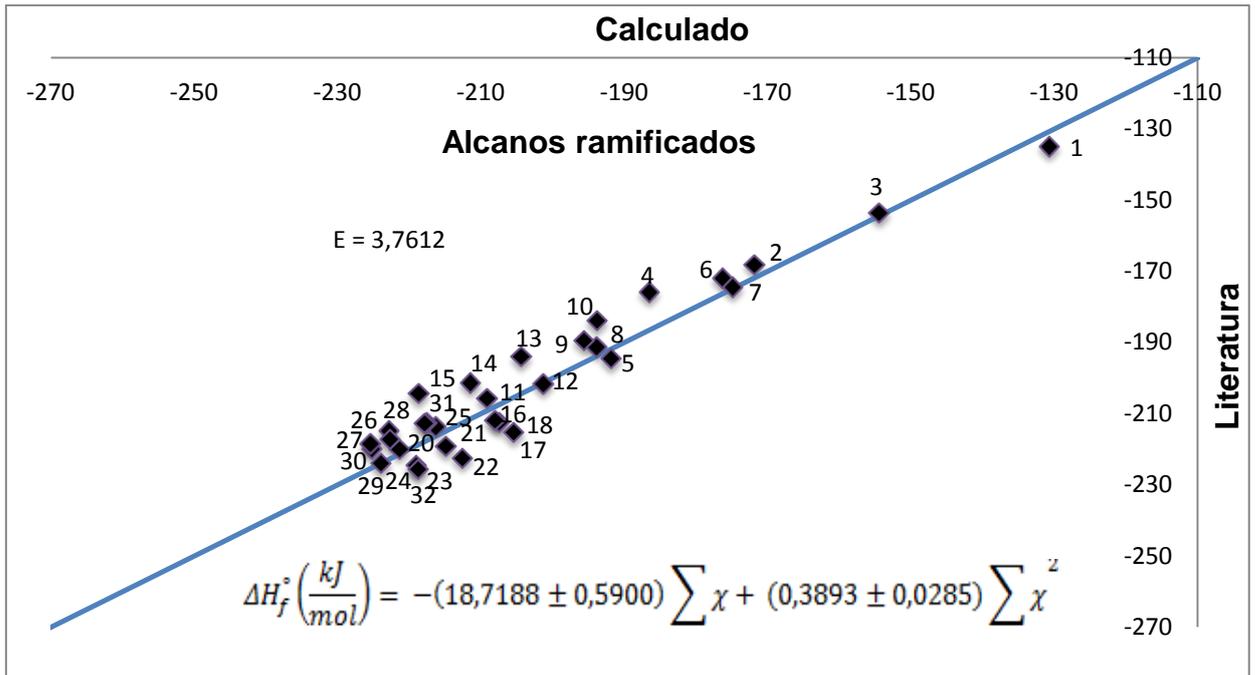


Figura 4. 4 - Modelo 3 para calor de formação de alcanos ramificados gasosos, utilizando o modelo com a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens e o quadrado desta soma, a 298,15 K.

Tabela 4. 1 – Alcanos ramificados

ALCANOS RAMIFICADOS	
1. Metil-propano	17. 3-Metil-heptano
2. 2,2-Dimetil-propano	18. 4-Metil-heptano
3. 2-Metil-butano	19. 3-Etil-hexano
4. 2,3-Dimetil-butano	20. 2,2-Dimetil-hexano
5. 2,2-Dimetil-propano	21. 2,3-Dimetil-hexano
6. 3-Metil-pentano	22. 2,4-Dimetil-hexano
7. 2-Metil-pentano	23. 2,5-Dimetil-hexano
8. 2-Metil-hexano	24. 3,3-Dimetil-hexano
9. 3-Metil-hexano	25. 3,4-Dimetil-hexano
10. 3-Etil-pentano	26. 2-Metil-3-Etil-pentano
11. 2,2-Dimetil-pentano	27. 3-Metil-3-Etil-pentano
12. 2,3-Dimetil-pentano	28. 2,2,3-Trimetil-pentano
13. 2,4-Dimetil-pentano	29. 2,2,4-Trimetil-pentano
14. 3,3-Dimetil-pentano	30. 2,3,3-Trimetil-pentano
15. 2,2,3-Trimetil-butano	31. 2,3,4-Trimetil-pentano

Os valores do erro relativo médio calculado para as duas correlações são semelhantes. Verifica-se que para a figura 4.3 o erro é de aproximadamente 5%, já na figura 4.4 o erro calculado é aproximadamente 3%. O modelo 2 é linear em relação ao somatório dos  $\chi$ 's, enquanto o modelo 3 é quadrático, necessitando de um parâmetro adicional. A introdução de um termo quadrático não trouxe melhorias significativas ao modelo.

As correlações para o calor de formação de alcoóis gasosos são apresentadas nas Figuras 4.5, e 4.6.

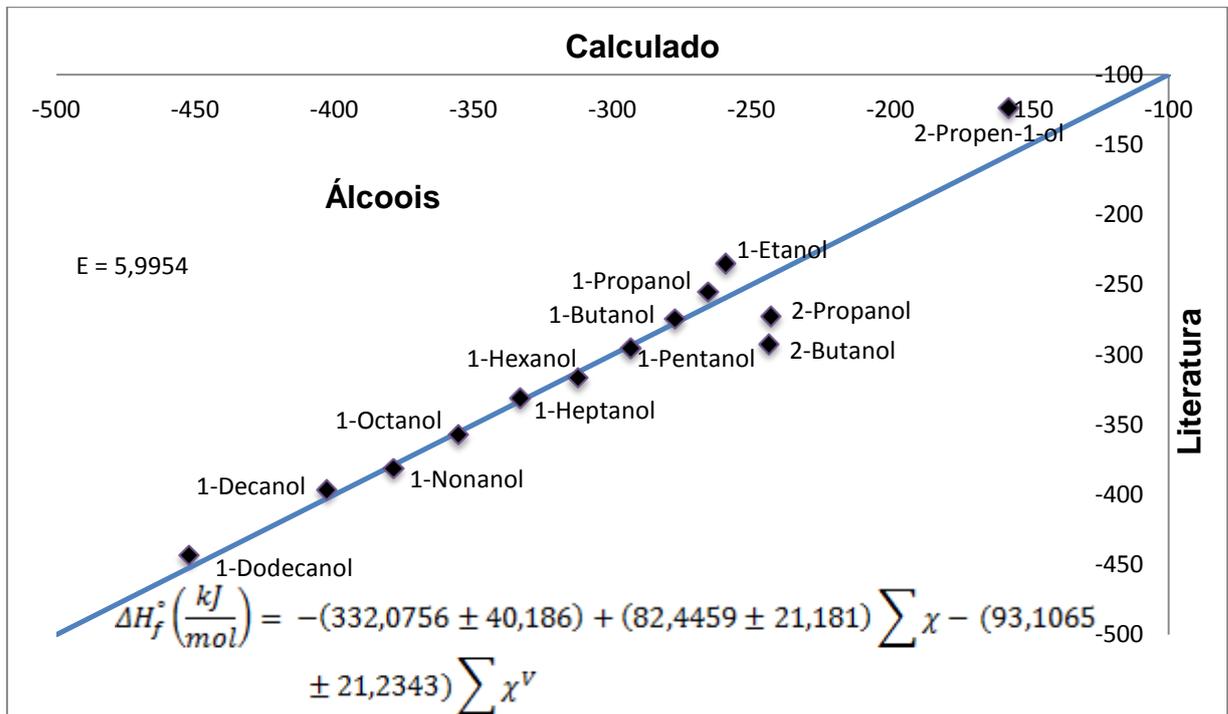
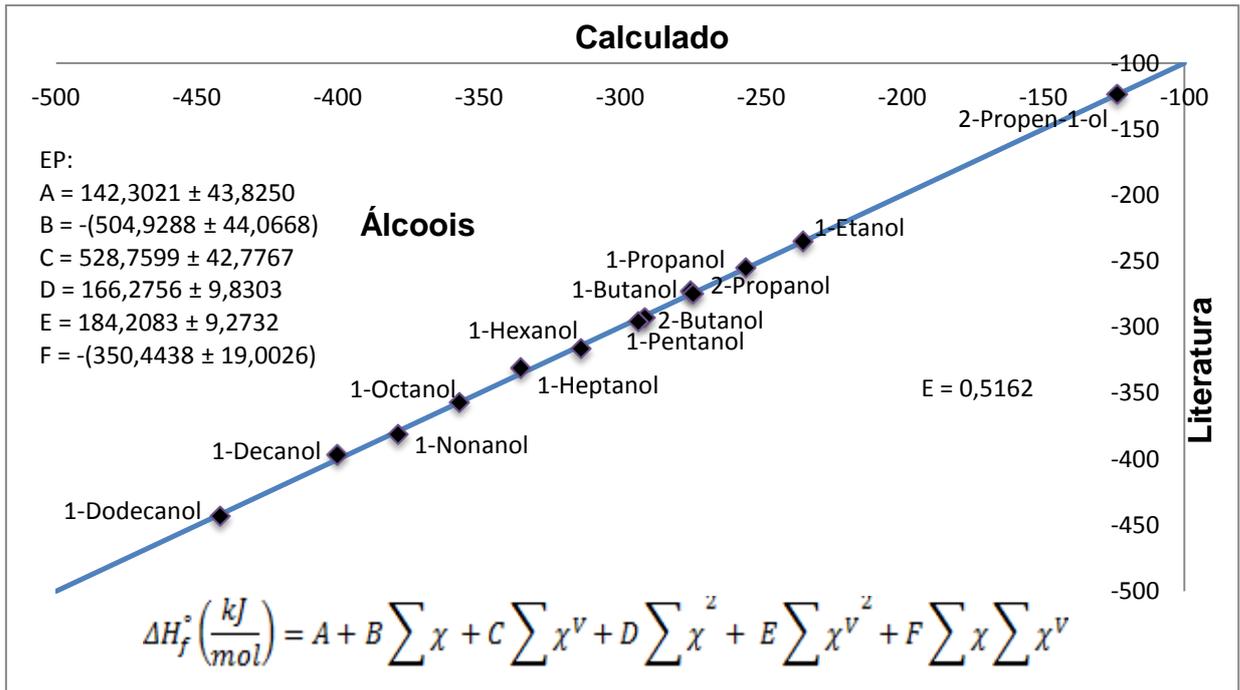


Figura 4.5 - Modelo 4 para calor de formação de alcoóis gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.



**Figura 4. 6 - Modelo 5 para calor de formação de álcoois gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.**

A comparação das Figuras 4.5 e 4.6 mostra que o modelo 5 consegue correlacionar melhor o calor de formação dos álcoois gasosos (Figura 4.6), quando comparado ao modelo 4 (Figura 4.5), onde desvios relativamente grande são observados para álcoois de cadeia curta. No entanto, o uso do modelo 5 requer 6 parâmetros enquanto o modelo 4 necessita de apenas 3 parâmetros.

As correlações do calor de formação dos ésteres gasosos são apresentadas nas Figuras 4.7 e 4.8. Para os ésteres de cadeia longa (4.8) não foram encontrados dados da literatura. O mesmo modelo utilizado para ésteres de cadeia curta (Figura 4.7) foi extrapolado. O modelo 4 mostrou um desempenho relativamente bom na correlação do calor de formação de ésteres, com um erro relativo baixo. Este resultado é uma contribuição significativa deste trabalho na estimação de propriedades termodinâmicas do biodiesel que é uma mistura de ésteres de cadeias longas.

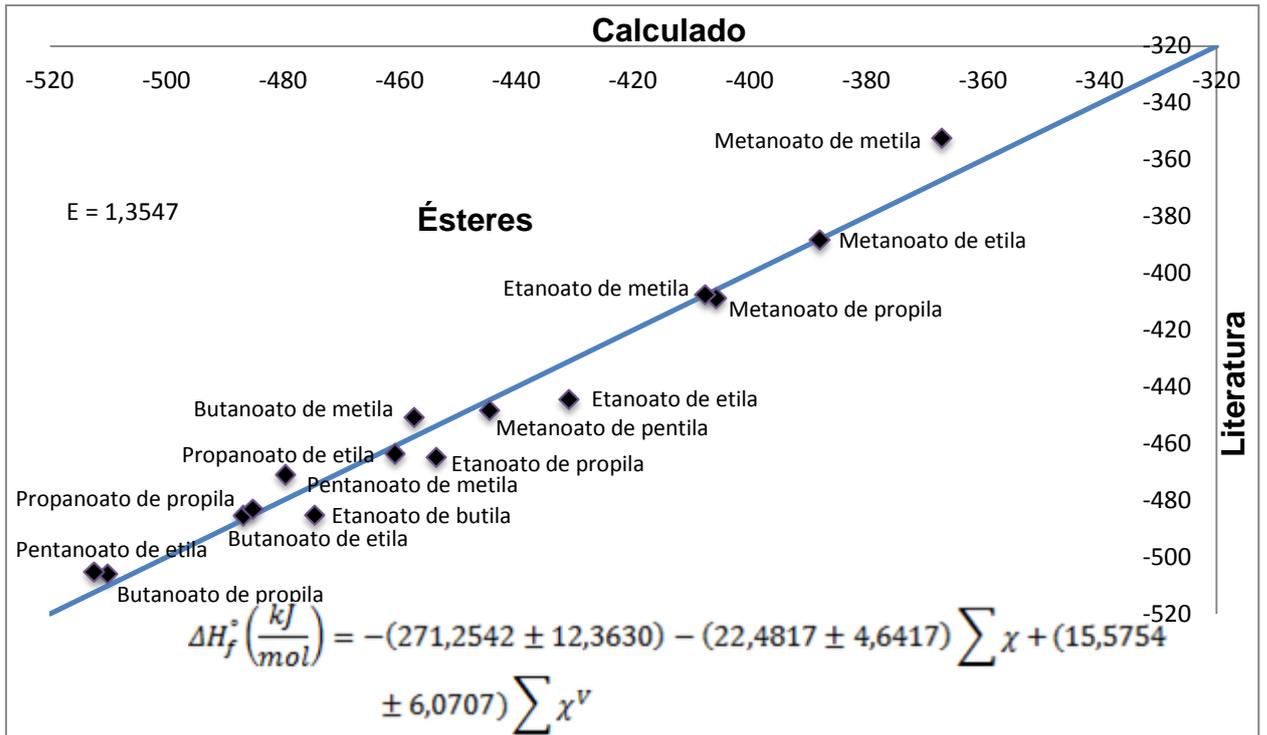


Figura 4. 7 - Modelo 4 para calor de formação de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

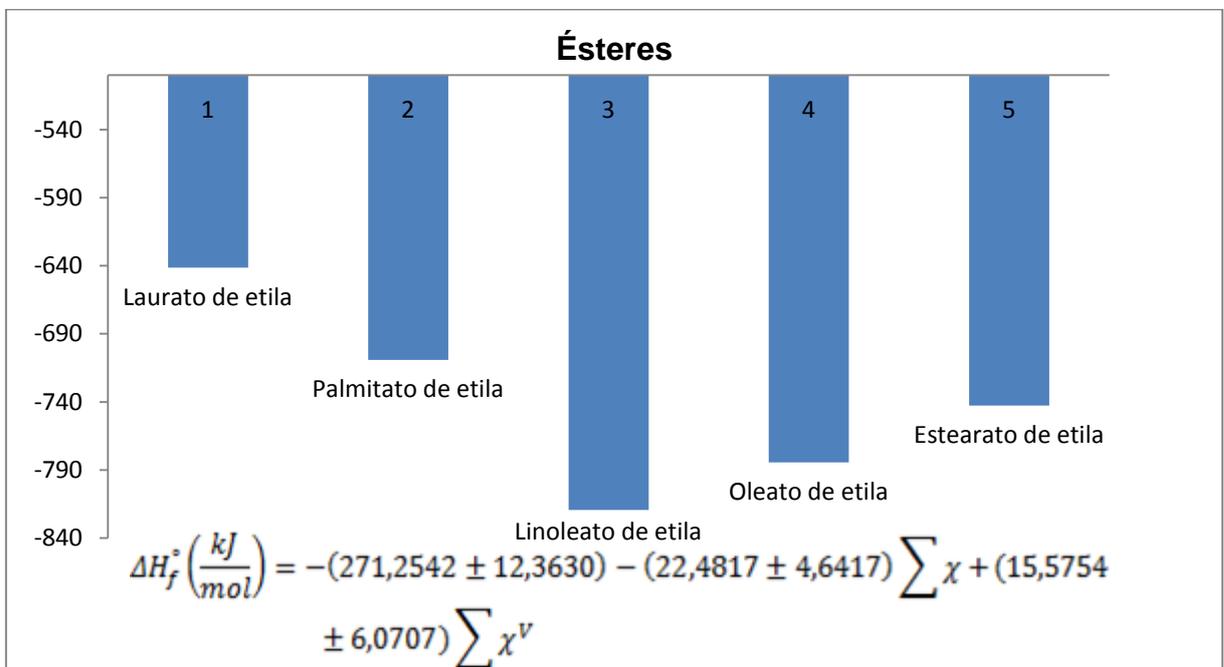


Figura 4. 8 - Modelo 4 para calor de formação de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

Para os ácidos carboxílicos gasosos os resultados para o calor de formação são apresentados nas Figuras 4.9, 4.10 e 4.11. Na Figura 4.9, o modelo 4 utilizado

descreve bem a propriedade investigada, com erro relativo médio menor que 1,4%. No entanto, quando este modelo foi extrapolado para ácidos carboxílicos de cadeia longa (Figura 4.10), o erro relativo médio ficou acima de 19%. O modelo 5 utilizado na Figura 4.11 consegue descrever bem o calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos com um erro relativo médio menor que 0,72%, mas o modelo necessita de 6 parâmetros.

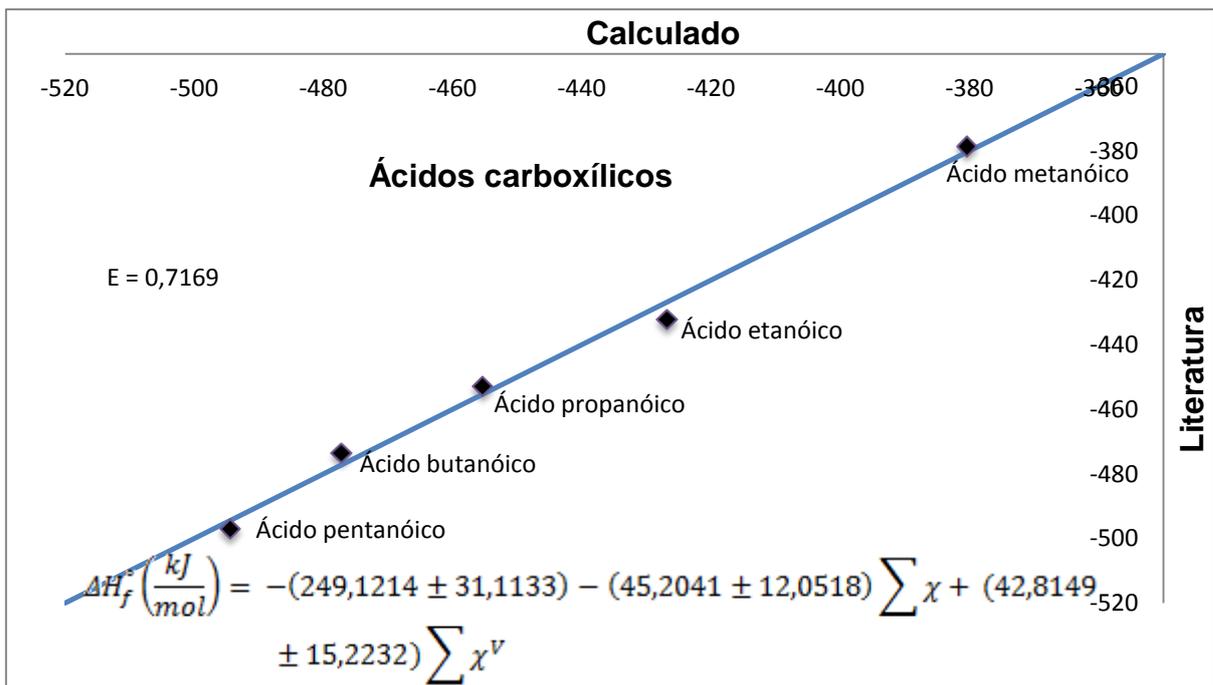


Figura 4. 9 - Modelo 4 para calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi^v$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

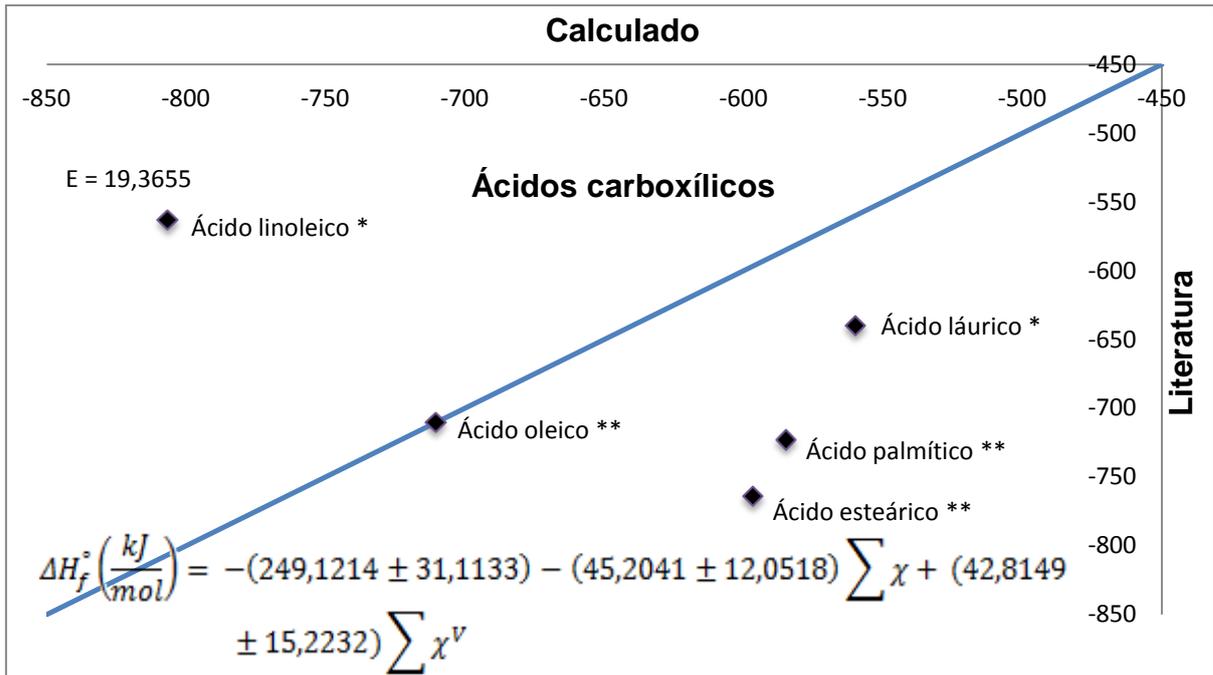


Figura 4. 10 - Modelo 4 para calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

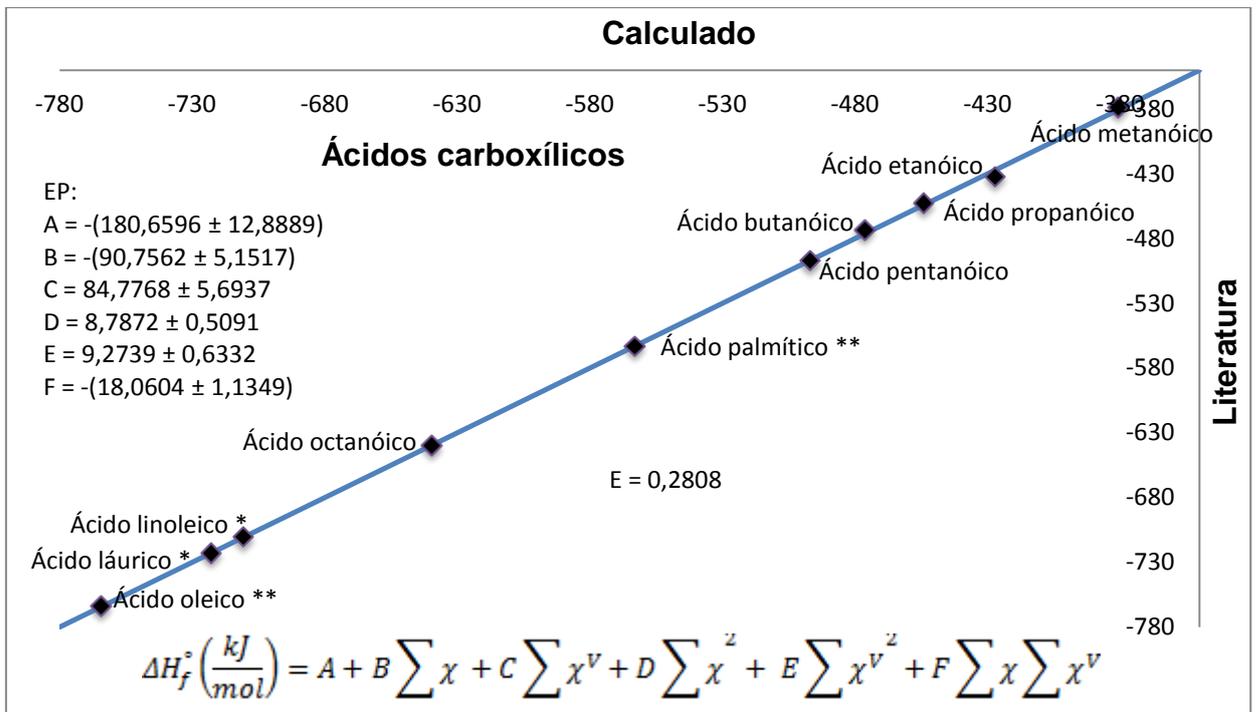


Figura 4. 11 - Modelo 5 para calor de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias pequenas e longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

De forma geral o calor de formação das famílias de compostos empregados neste trabalho pode ser estimado utilizando o modelo 4 com três parâmetros tendo

como variáveis os índices de conectividades e os índices de conectividades de valência, exceto para os ácidos carboxílicos de cadeia longa, onde um modelo quadrático com 6 parâmetros se fez necessário.

## 4.2. CAPACIDADE CALORÍFICA A PRESSÃO CONSTANTE

Para esta propriedade, foram apresentadas correlações para a temperatura padrão (298 K) para gases e líquidos de alcanos, alcoóis, ésteres e ácidos carboxílicos a. Adicionalmente, uma correlação para cálculo da capacidade calorífica para gases a pressão constante foi apresentada.

### 4.2.1. Capacidade calorífica a pressão contante de gases

As correlações para a capacidade calorífica de alcanos lineares gasosos são apresentadas nas Figuras 4.12, 4.13 e 4.14, utilizando os modelos 1, 2 e 6 são respectivamente.

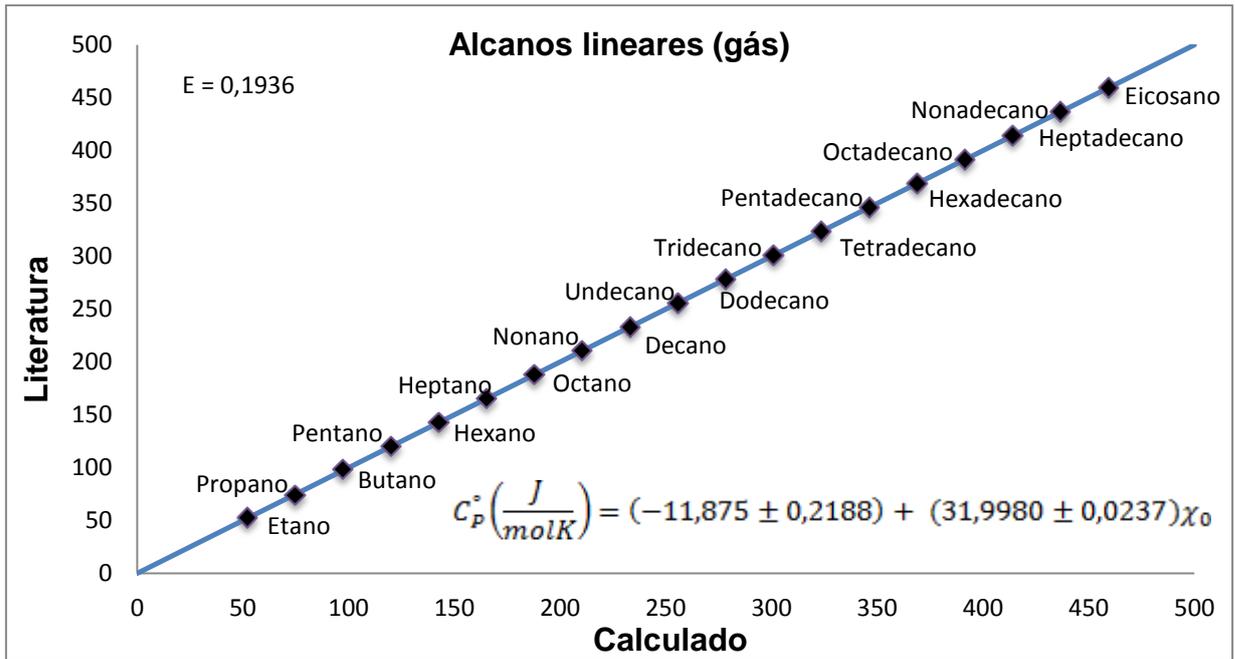


Figura 4. 12 - Modelo 1 para capacidade calorífica de alcanos gasosos, utilizando  $\chi$  de ordem zero, a 298,15 K.

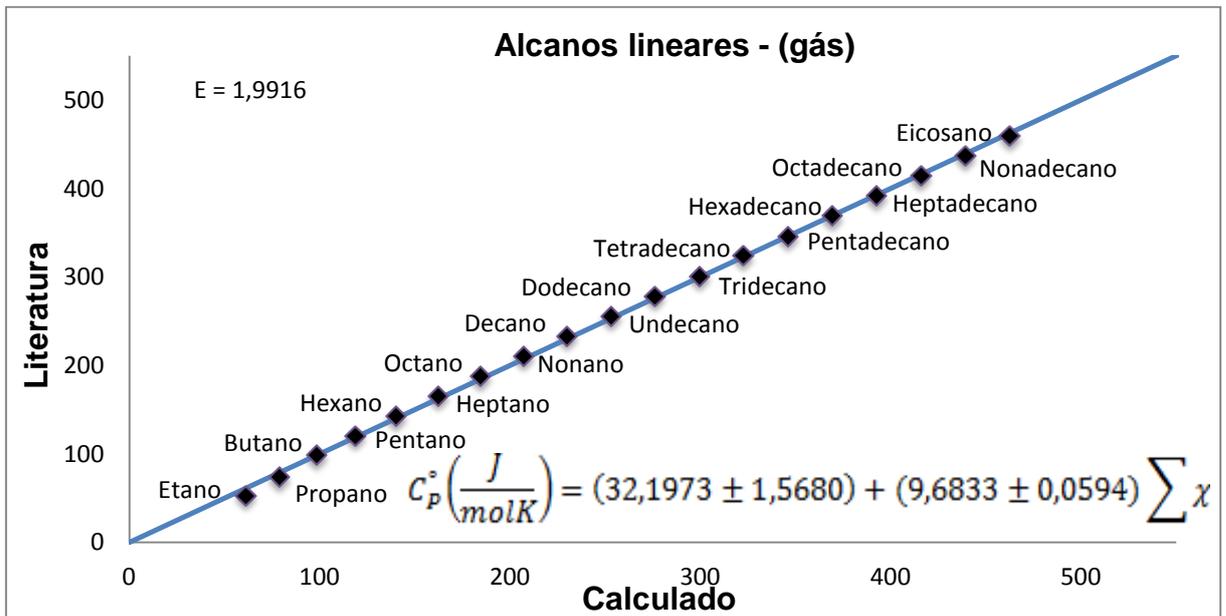


Figura 4. 13 - Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

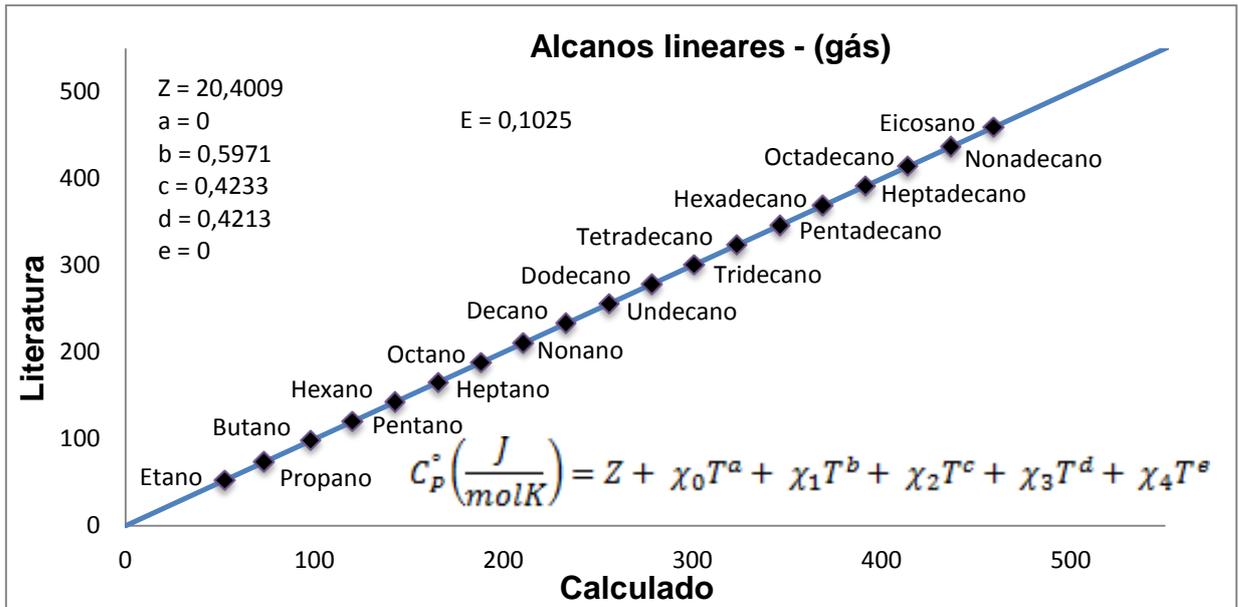


Figura 4. 14 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alcanos gasosos, utilizando  $\chi$ 's de ordem de zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

A comparação das Figuras 4.12 e 4.13 mostra que, para a correlação da capacidade calorífica a 298 K, o índice de conectividade de ordem zero, utilizado como variável no modelo 1, apresenta um desempenho melhor, quando comparado, ao somatório dos índices de conectividades, utilizado como variável no modelo 2.

Adicionalmente, a dependência da capacidade calorífica com a temperatura é bem descrita pelo modelo 6, com um erro médio relativo obtido inferior a 0,5%. O modelo 6 é uma expansão polinomial de ordem fracionária que utiliza como variáveis os índice de conectividade até a ordem 4.

Para alcanos ramificados, gasosos os resultados para  $C_P$  são apresentados nas Figuras 4.15 e 4.16 utilizando os modelos 2 e 3, respectivamente. Os

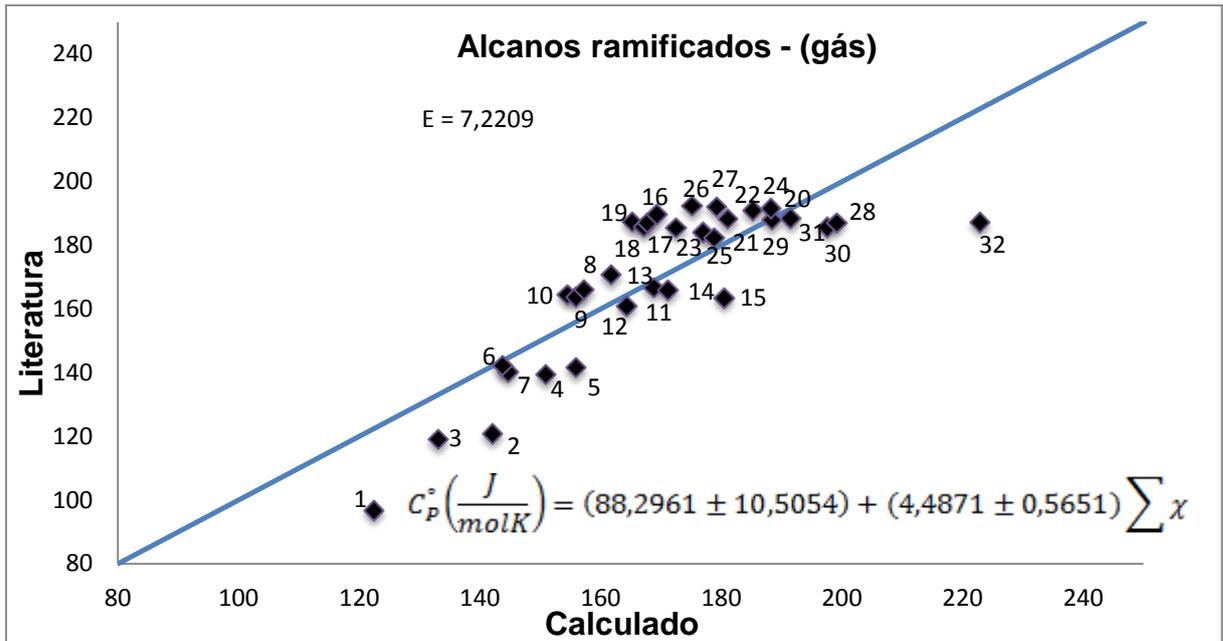


Figura 4. 15 - Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos ramificados gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

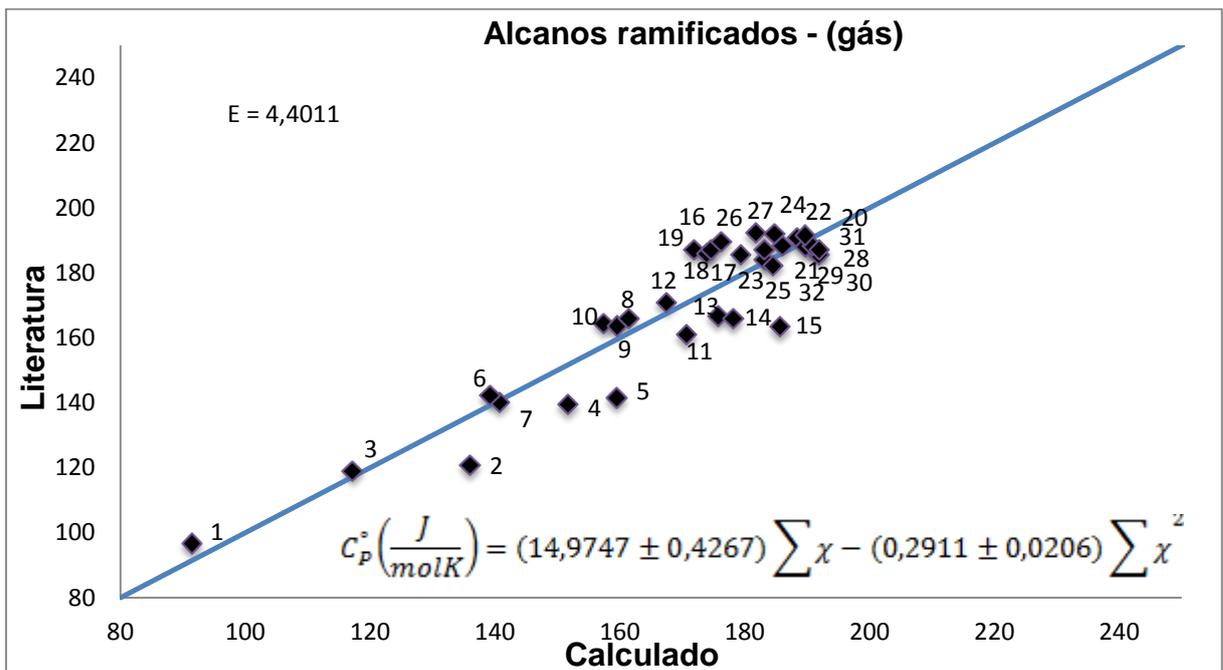


Figura 4. 16 - Modelo 3 para capacidade calorífica de alcanos ramificados gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

Tabela 4. 1 – Alcanos ramificados

ALCANOS RAMIFICADOS	
1. Metil-propano	17. 3-Metil-heptano
2. 2,2-Dimetil-propano	18. 4-Metil-heptano
3. 2-Metil-butano	19. 3-Etil-hexano

4. 2,3-Dimetil-butano	20. 2,2-Dimetil-hexano
5. 2,2-Dimetil-propano	21. 2,3-Dimetil-hexano
6. 3-Metil-pentano	22. 2,4-Dimetil-hexano
7. 2-Metil-pentano	23. 2,5-Dimetil-hexano
8. 2-Metil-hexano	24. 3,3-Dimetil-hexano
9. 3-Metil-hexano	25. 3,4-Dimetil-hexano
10. 3-Etil-pentano	26. 2-Metil-3-Etil-pentano
11. 2,2-Dimetil-pentano	27. 3-Metil-3-Etil-pentano
12. 2,3-Dimetil-pentano	28. 2,2,3-Trimetil-pentano
13. 2,4-Dimetil-pentano	29. 2,2,4-Trimetil-pentano
14. 3,3-Dimetil-pentano	30. 2,3,3-Trimetil-pentano
15. 2,2,3-Trimetil-butano	31. 2,3,4-Trimetil-pentano
16. 2-Metil-heptano	32. 2,2,3,3-Tetrametil-butano

---

Como pode ser observado, a introdução do termo quadrático, leva a melhorias significativas (Figura 4.16) com uma diminuição do erro médio relativo de 7,22% para 4,40 %.

Para alcoóis gasosos, as correlações para o cálculo de  $C_p$  são apresentadas nas Figuras 4.17 e 4.18. A Figura 4.17 mostra que modelo 4 mostrou-se apropriado, com um erro relativo médio inferior a 1,30%. Para a dependência de  $C_p$  com a temperatura a Figura 4.18 mostra que modelo 6 empregado apresenta um desempenho bom com um erro médio relativo de cerca 9,50%.

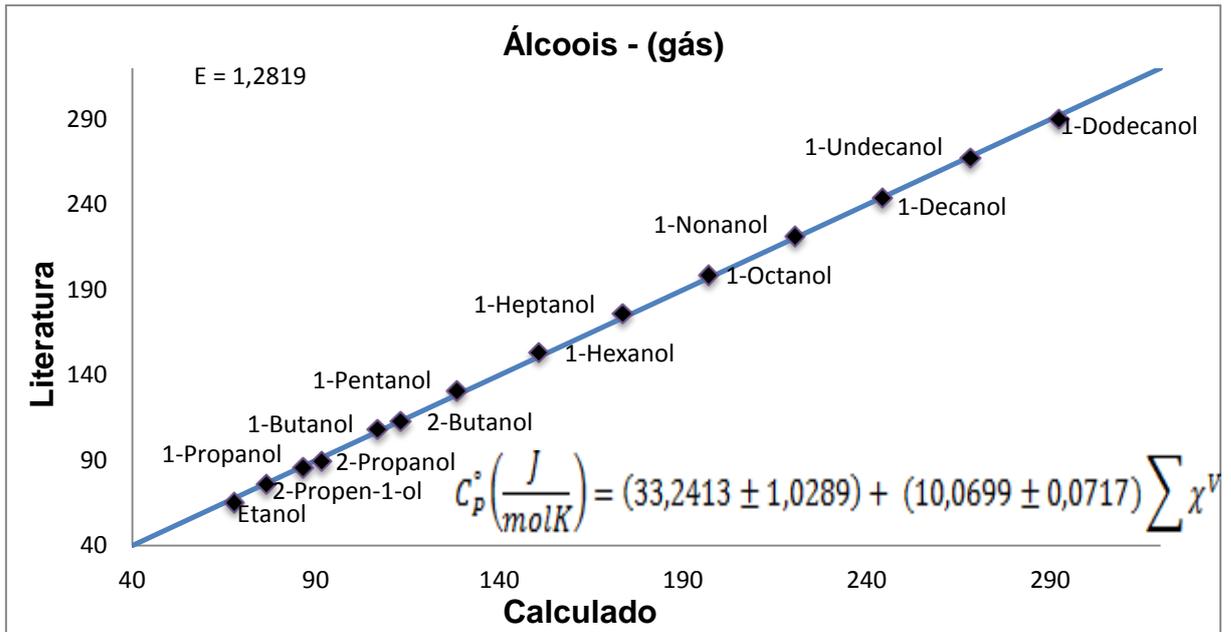


Figura 4. 17 - Modelo 4 para capacidade calorífica de álcoois gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

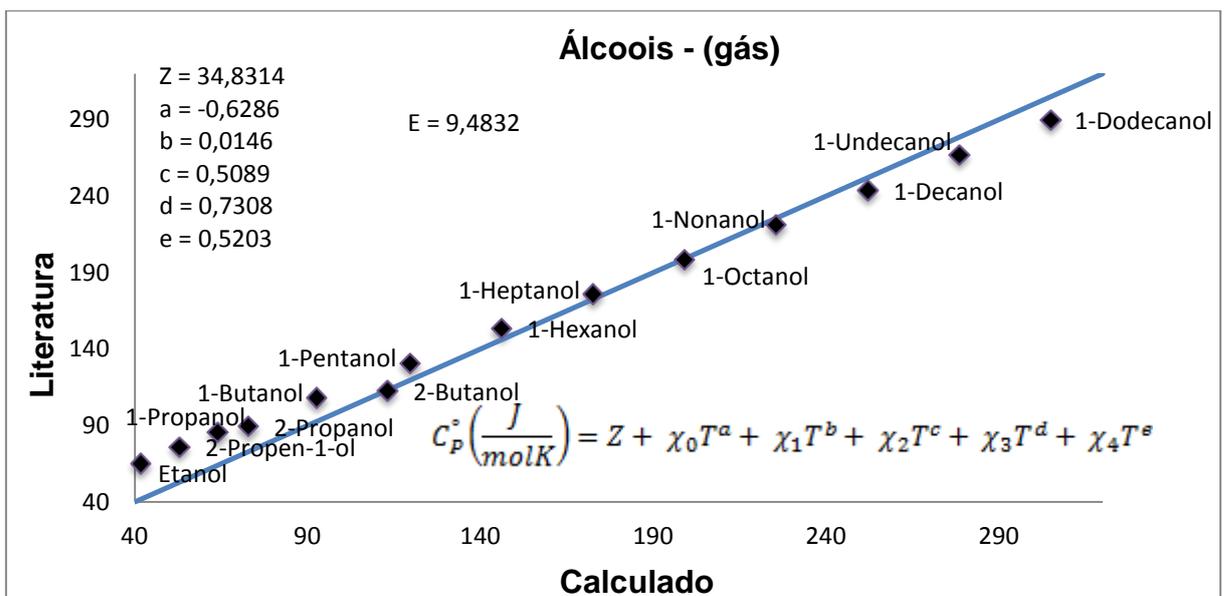


Figura 4. 18 - Modelo 6 para capacidade calorífica de álcoois gasosos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem de zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

A correlação de capacidade calorífica para ésteres gasosos, de cadeia pequena, é mostrada na Figura 4.19. Esta mesma correlação é extrapolada aos ésteres gasosos de cadeias longas (Figura 4.20). O modelo 4 mostrou-se apropriado, com um erro médio de 1,75%. Para a correlação da dependência de  $C_p$  dos ésteres gasosos com a temperatura, o modelo 6 mostrou um bom desempenho, com um erro relativo médio de 0,60% (Figuras 4.21 e 4.22).

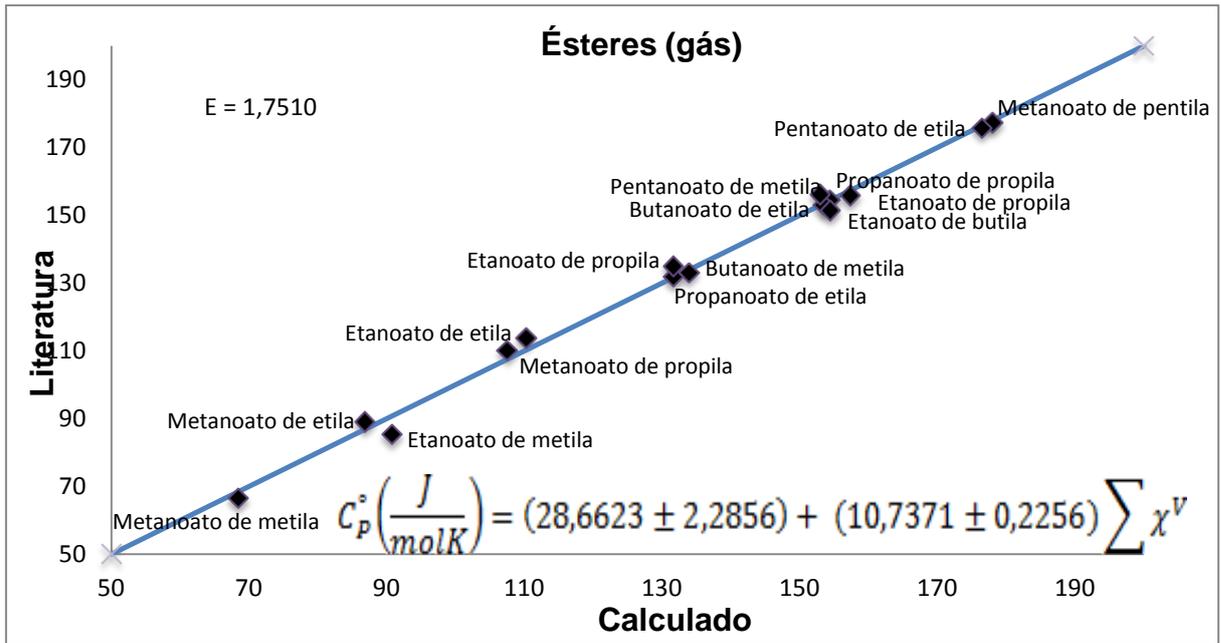


Figura 4. 19 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

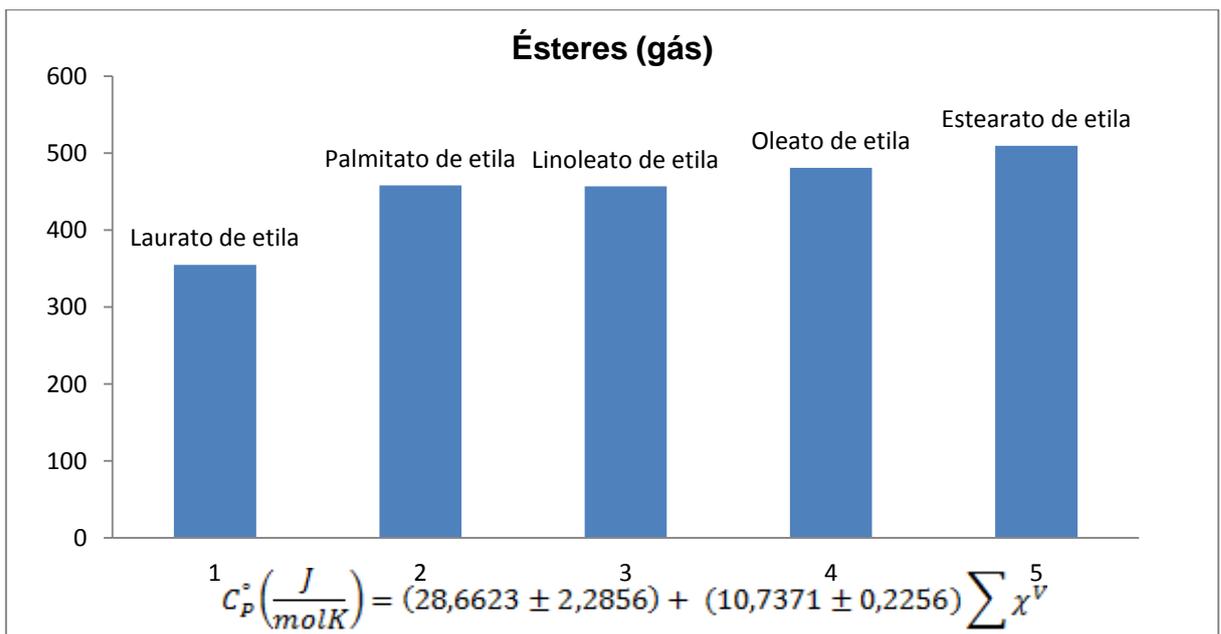


Figura 4. 20 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

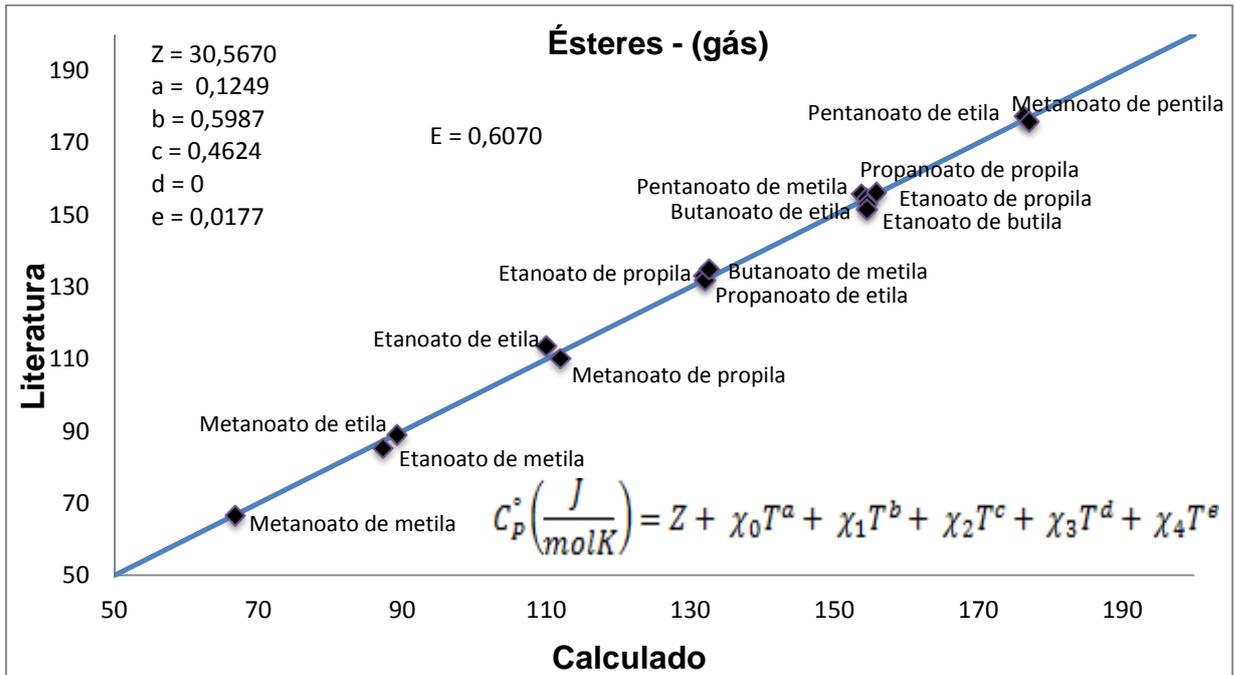


Figura 4. 21 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

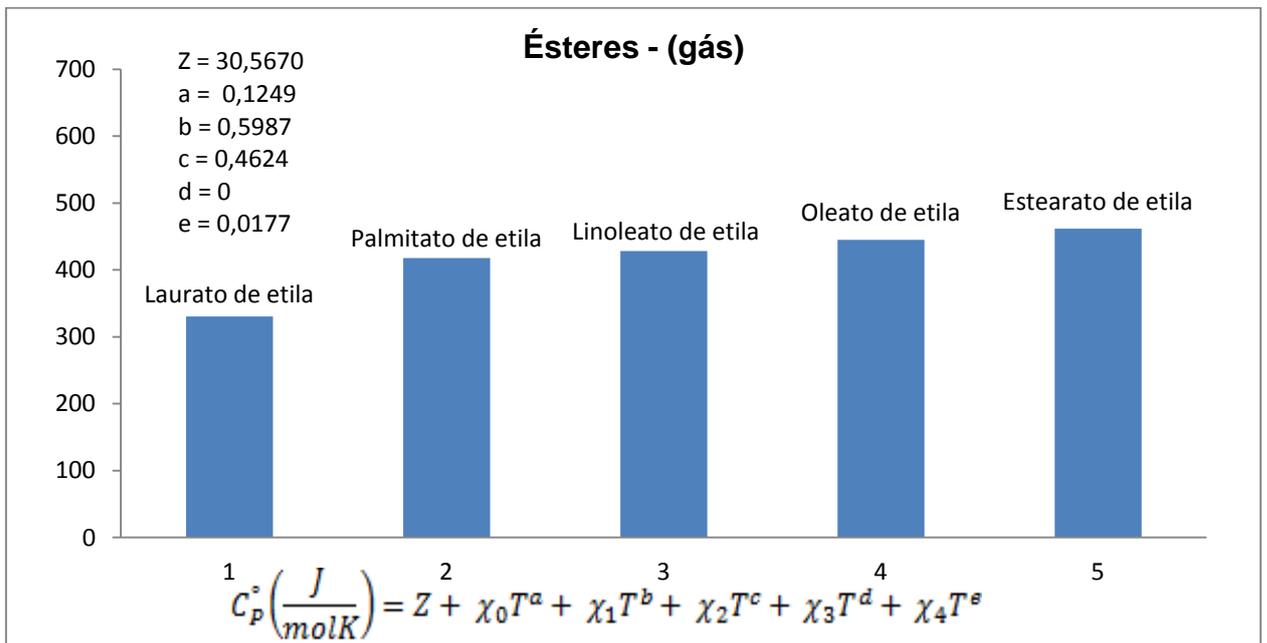


Figura 4. 22 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

Correlações para a capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos são ilustradas nas Figuras 4.23, 4.24 e 4.25. Nas Figura 4.23 e 4.24 é usado o modelo 4 para  $C_p$  a 298 K e na Figura 4.25, onde o modelo 6 (dependência de  $C_p$  com a

temperatura) foi empregado. Ambas as correlações mostraram um ótimo desempenho com erros relativos pequenos.

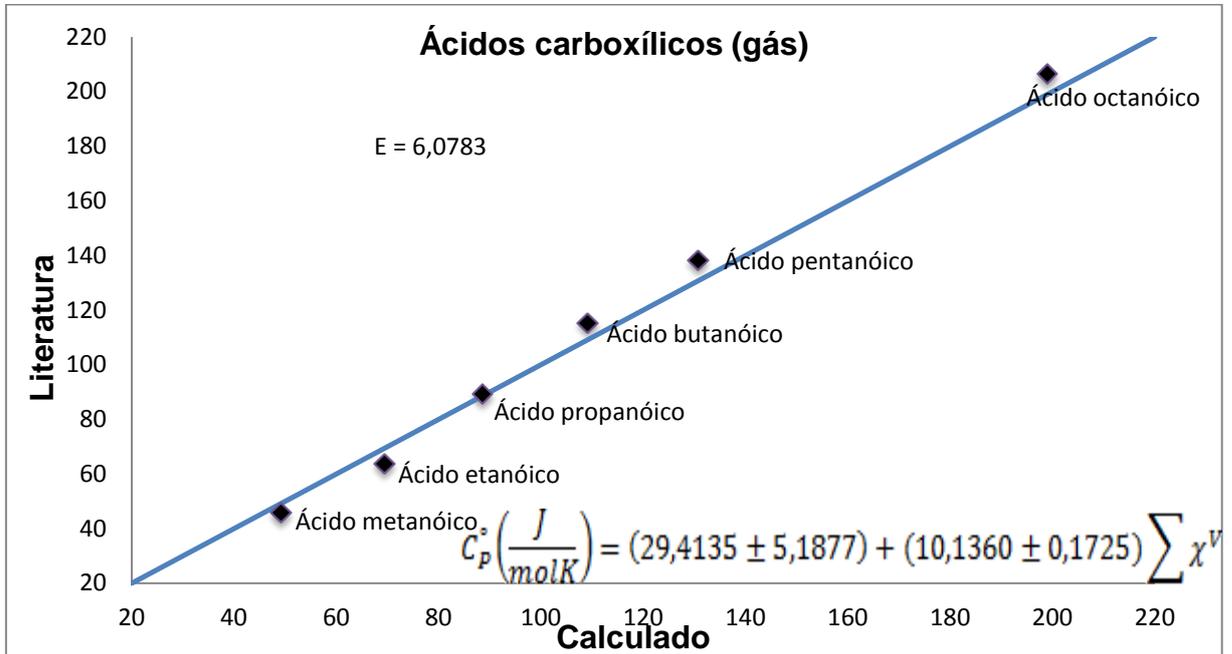


Figura 4. 23 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias curtas, utilizando a soma dos  $\chi^s$  e  $\chi^v$  de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

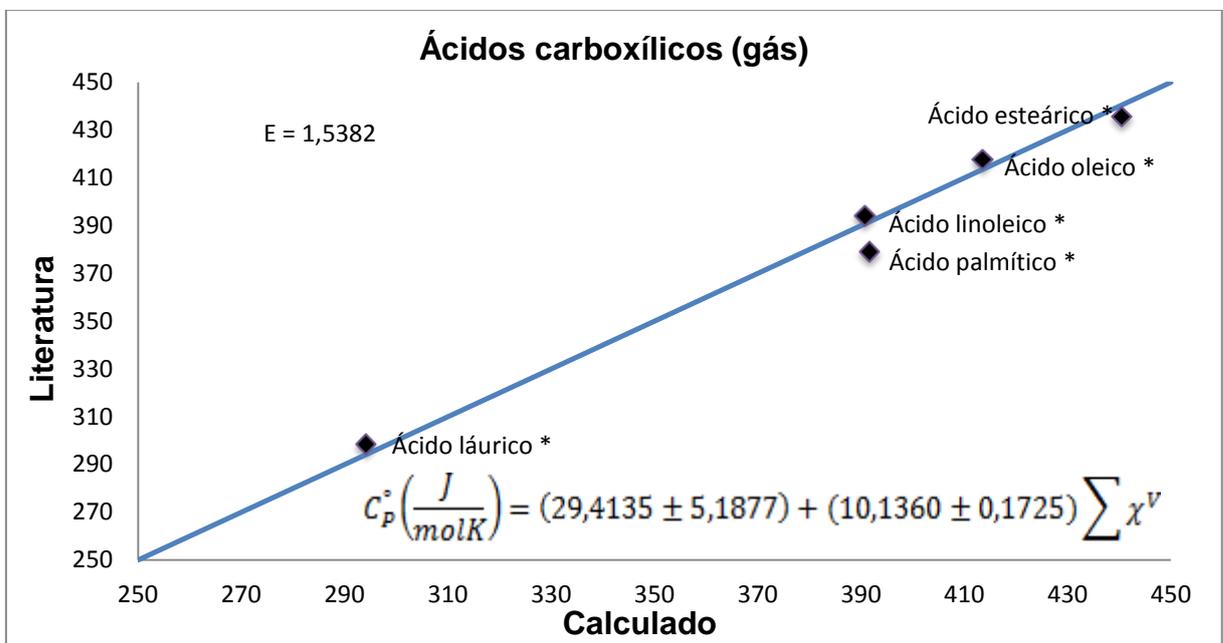


Figura 4. 24 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi^s$  e  $\chi^v$  de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

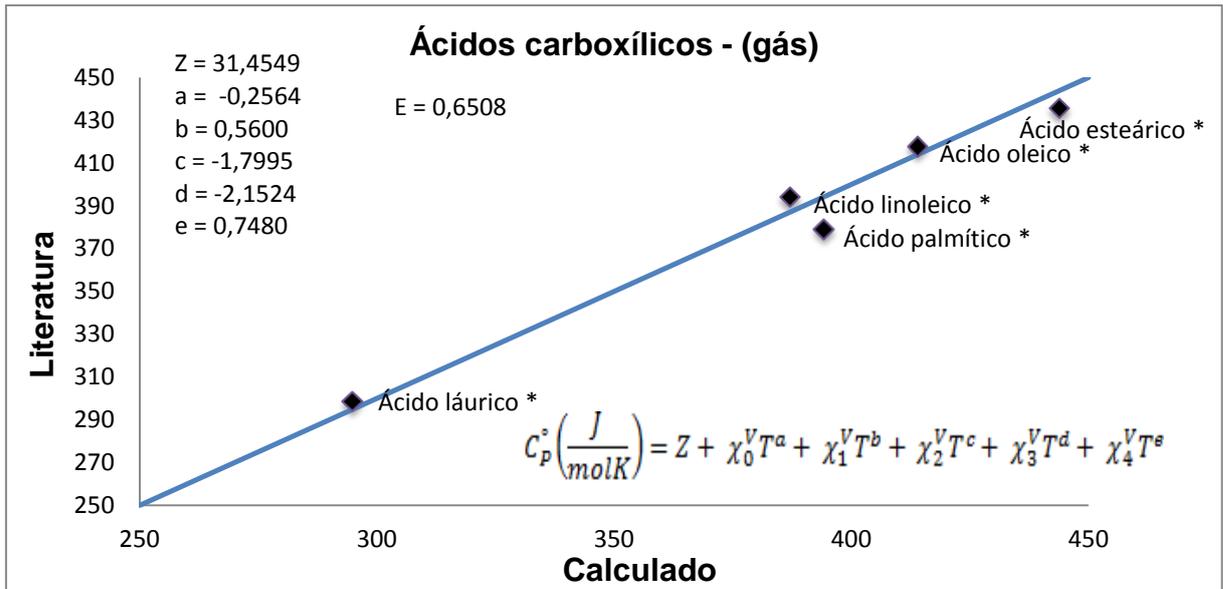


Figura 4. 25 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando  $\chi$ 's de valência ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

#### 4.2.2. Capacidade calorífica a pressão constante de líquidos

O mesmo formalismo utilizado para gases também foi empregado para líquidos. Para todas as famílias de compostos investigadas neste trabalho, a mesma discussão a respeito da capacidade calorífica dos gases vale também para os líquidos. Os resultados são apresentados nas Figuras 4.26 a 4.40. Para os ácidos carboxílicos, além dos modelos 4 e 6, o modelo 5 (modelo quadrático) foi utilizado, obtendo-se uma correlação com um erro médio relativo menor que 1%, mas com o uso de 5 parâmetros.

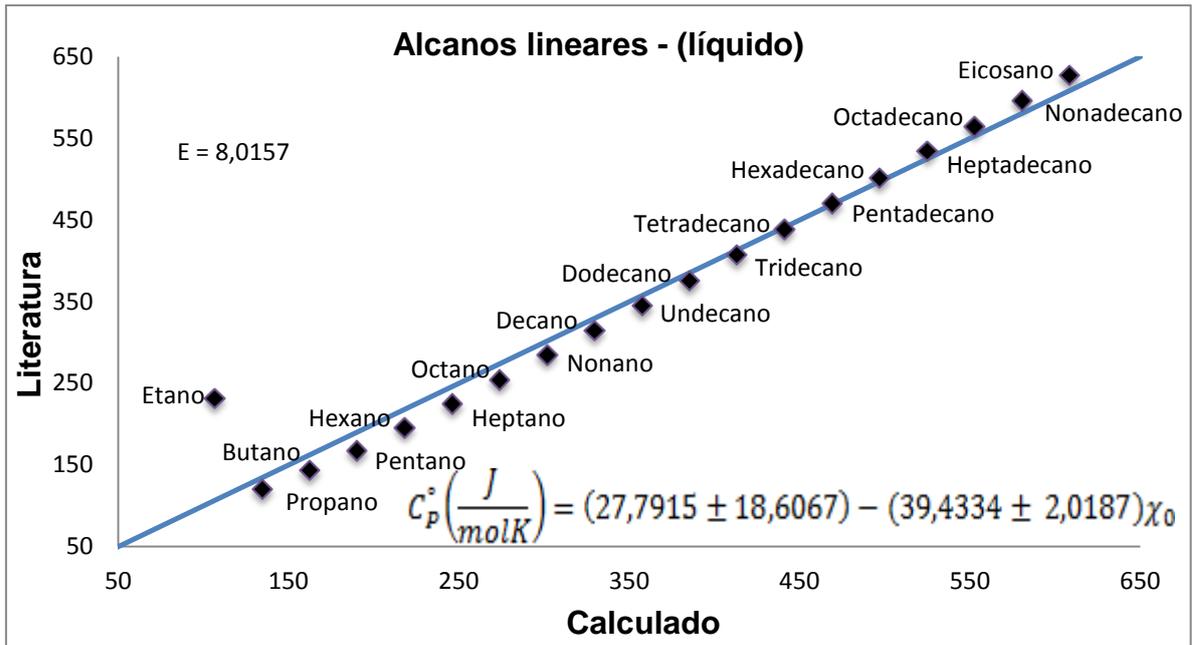


Figura 4. 26 - Modelo 1 para capacidade calorífica de alcanos líquidos, utilizando  $\chi$  de ordem zero, a 298,15 K.

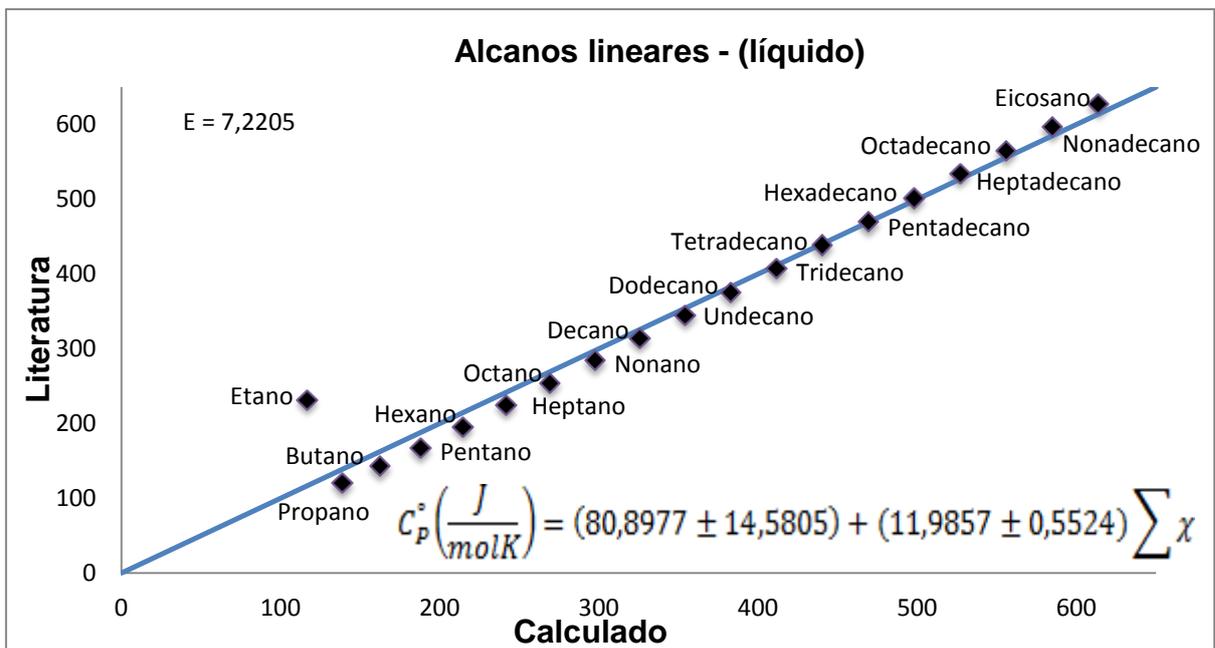


Figura 4. 27 – Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos líquidos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

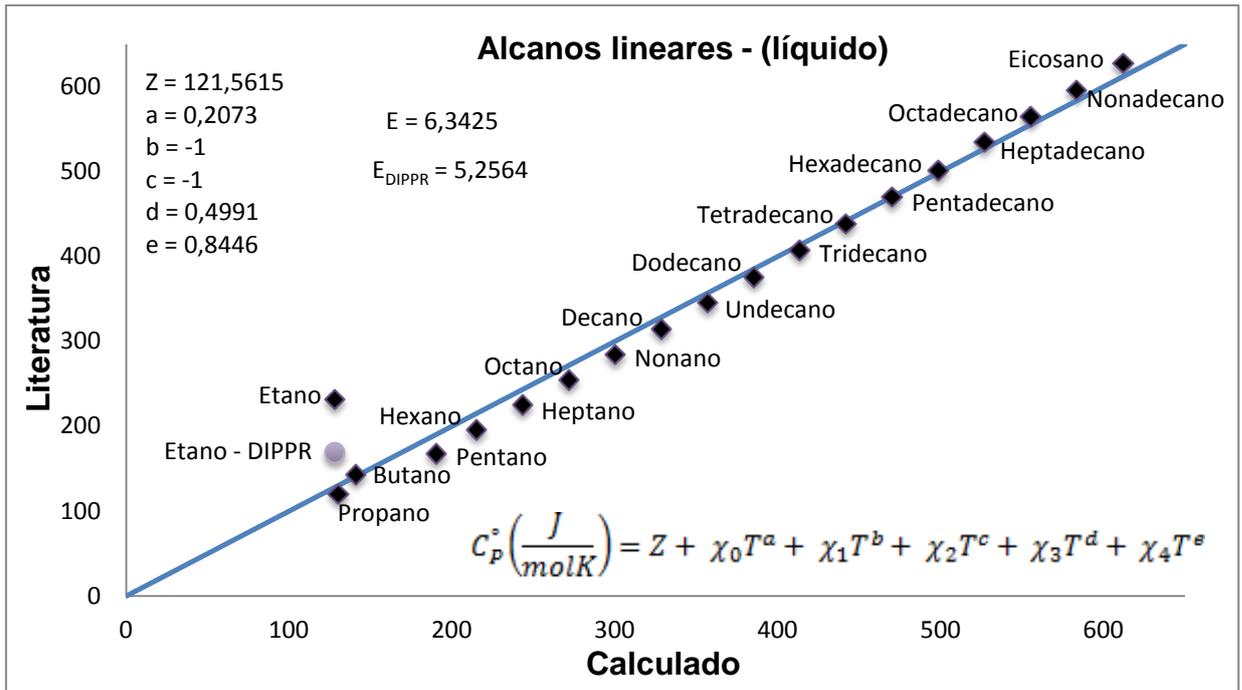


Figura 4. 28 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alcanos líquidos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

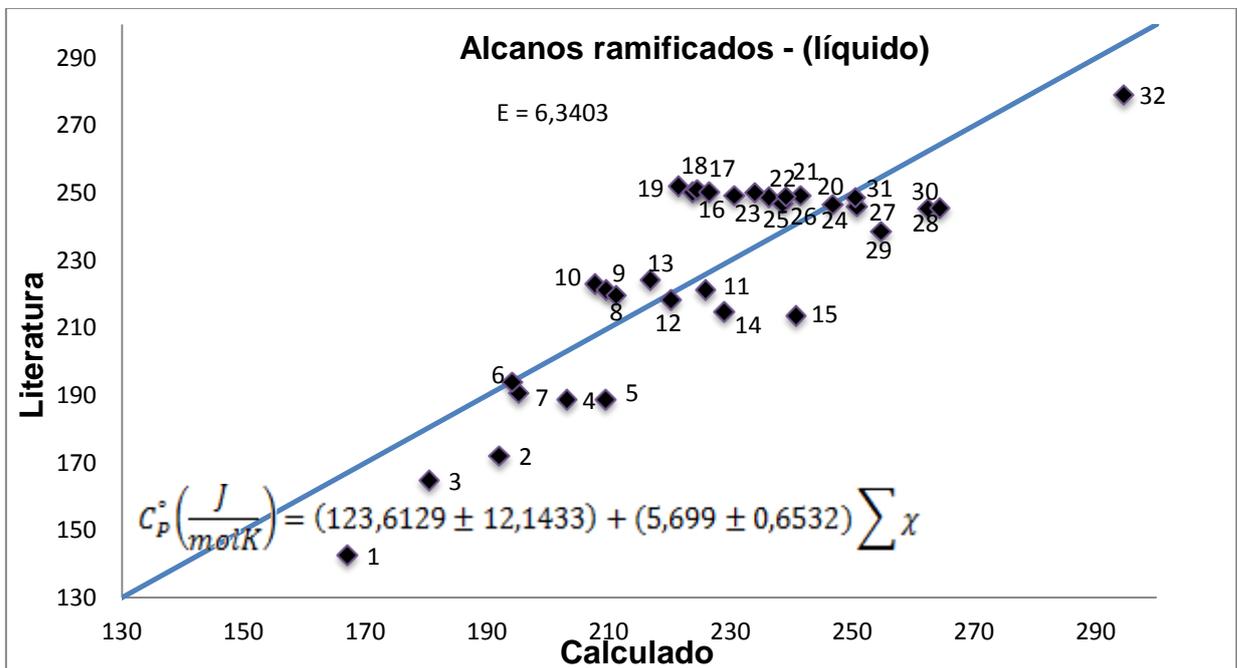


Figura 4. 29 - Modelo 2 para capacidade calorífica de alcanos ramificados líquidos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

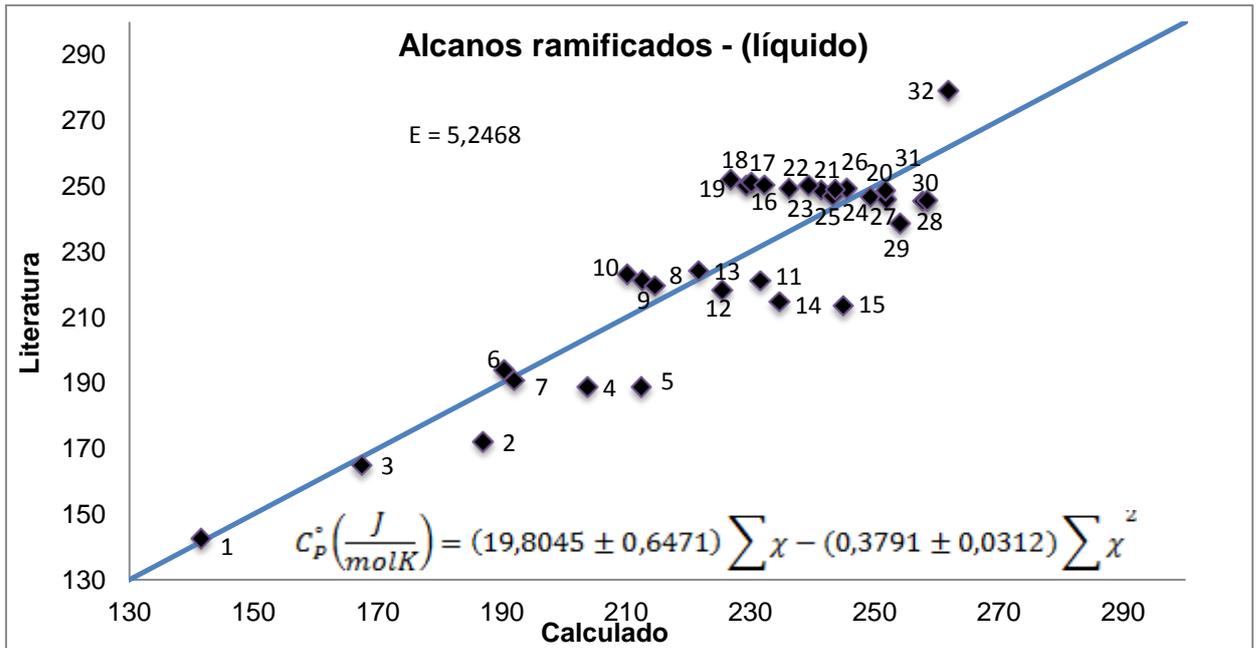


Figura 4. 30 - Modelo 3 para capacidade calorífica de alcanos ramificados líquidos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

Tabela 4. 1 – Alcanos ramificados

ALCANOS RAMIFICADOS	
1. Metil-propano	17. 3-Metil-heptano
2. 2,2-Dimetil-propano	18. 4-Metil-heptano
3. 2-Metil-butano	19. 3-Etil-hexano
4. 2,3-Dimetil-butano	20. 2,2-Dimetil-hexano
5. 2,2-Dimetil-propano	21. 2,3-Dimetil-hexano
6. 3-Metil-pentano	22. 2,4-Dimetil-hexano
7. 2-Metil-pentano	23. 2,5-Dimetil-hexano
8. 2-Metil-hexano	24. 3,3-Dimetil-hexano
9. 3-Metil-hexano	25. 3,4-Dimetil-hexano
10. 3-Etil-pentano	26. 2-Metil-3-Etil-pentano
11. 2,2-Dimetil-pentano	27. 3-Metil-3-Etil-pentano
12. 2,3-Dimetil-pentano	28. 2,2,3-Trimetil-pentano
13. 2,4-Dimetil-pentano	29. 2,2,4-Trimetil-pentano
14. 3,3-Dimetil-pentano	30. 2,3,3-Trimetil-pentano
15. 2,2,3-Trimetil-butano	31. 2,3,4-Trimetil-pentano

16. 2-Metil-heptano

32. 2,2,3,3-Tetrametil-butano

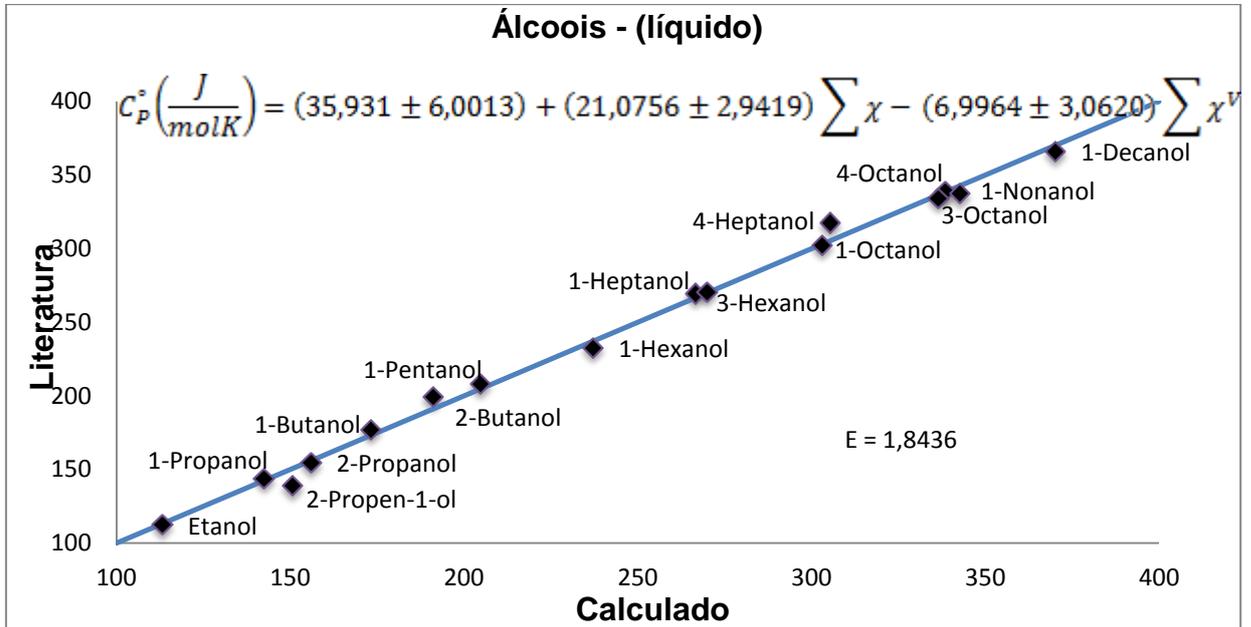


Figura 4. 31 - Modelo 4 para capacidade calorífica de álcoois líquidos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

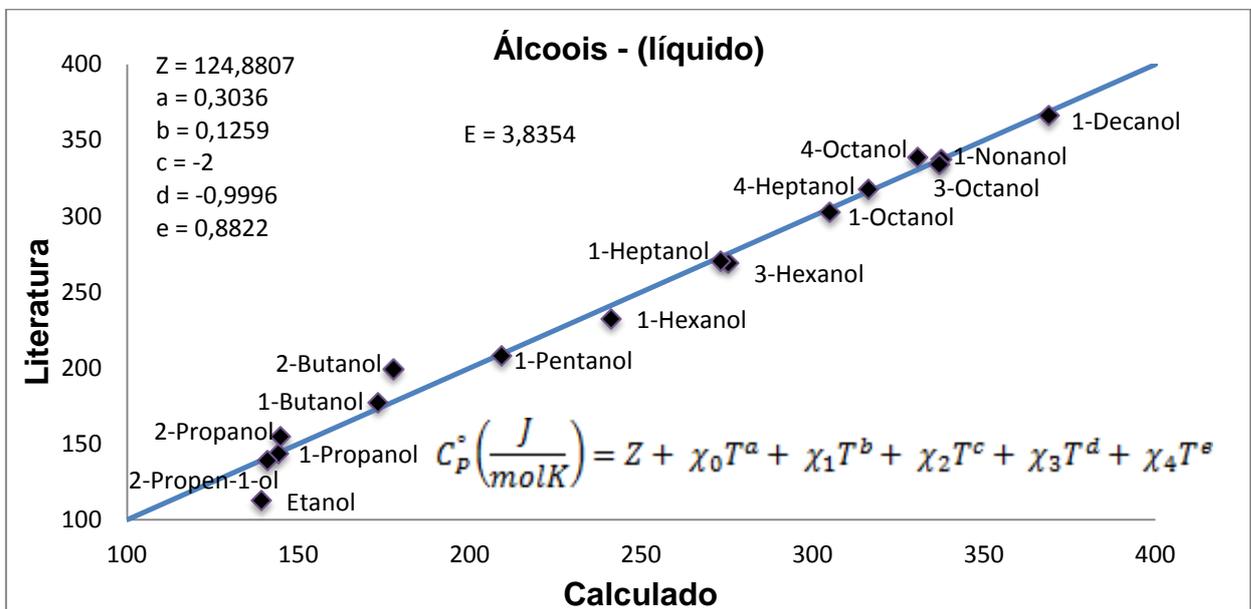


Figura 4. 32 - Modelo 6 para capacidade calorífica de álcoois líquidos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

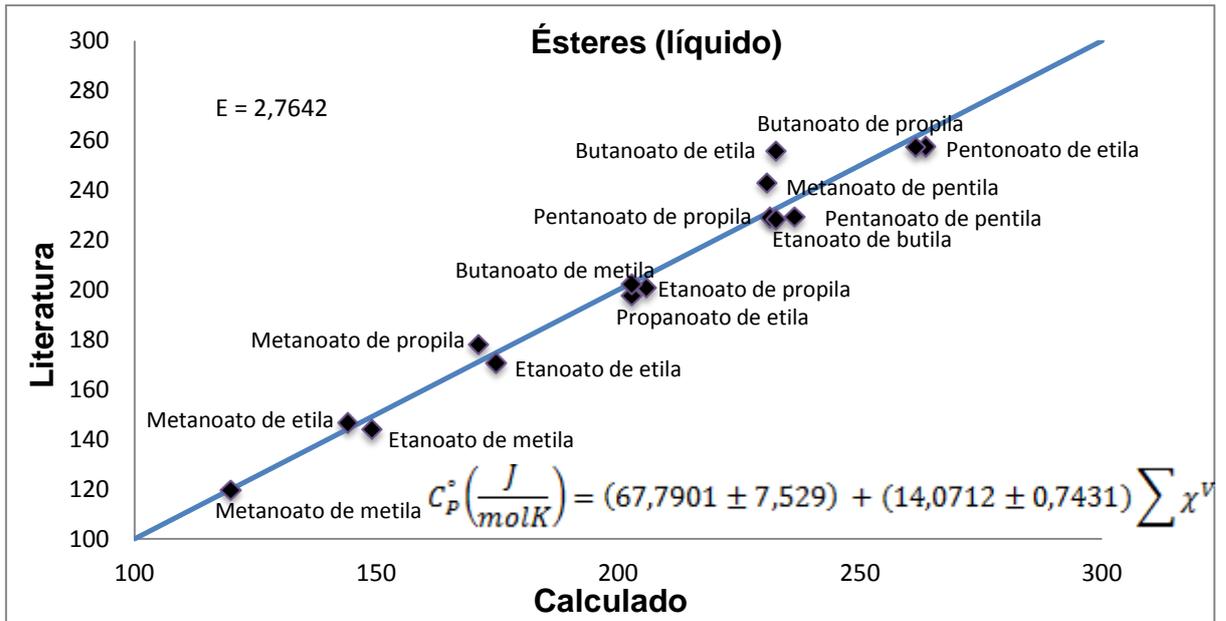


Figura 4. 33 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

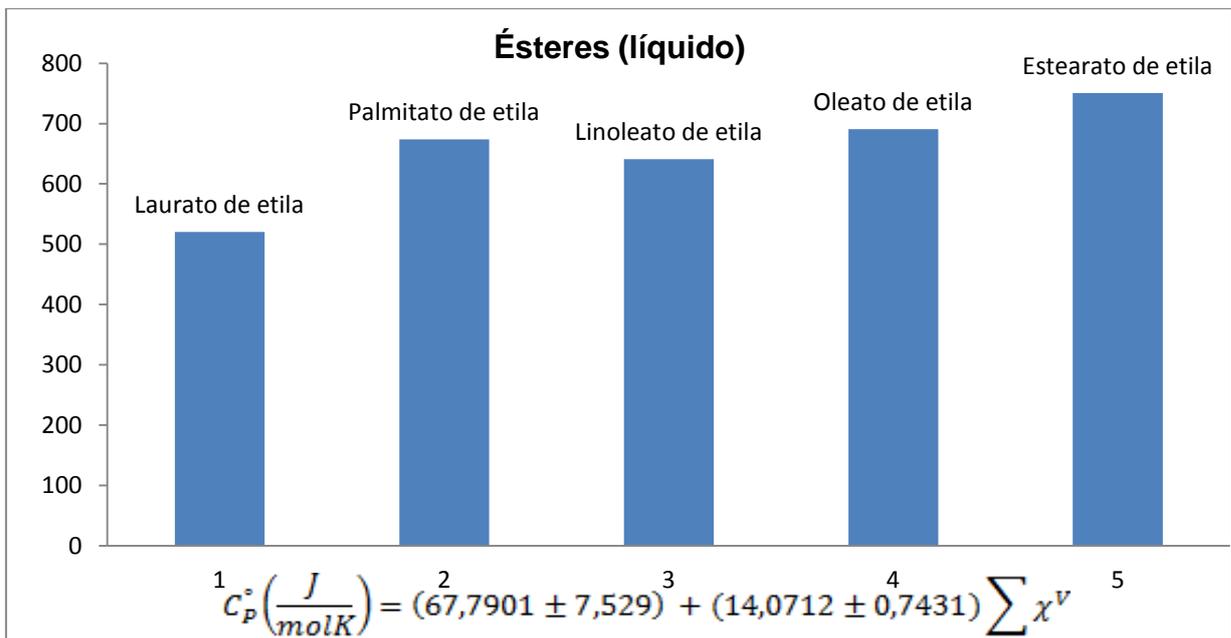


Figura 4. 34 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

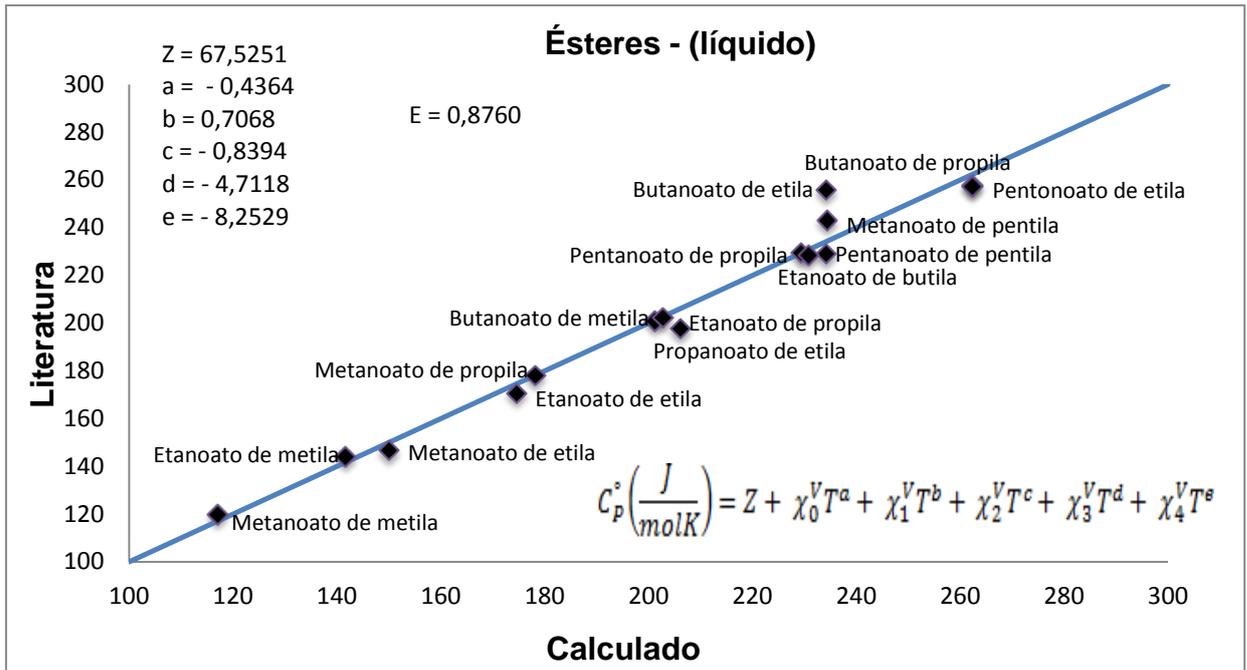


Figura 4. 35 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias pequenas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

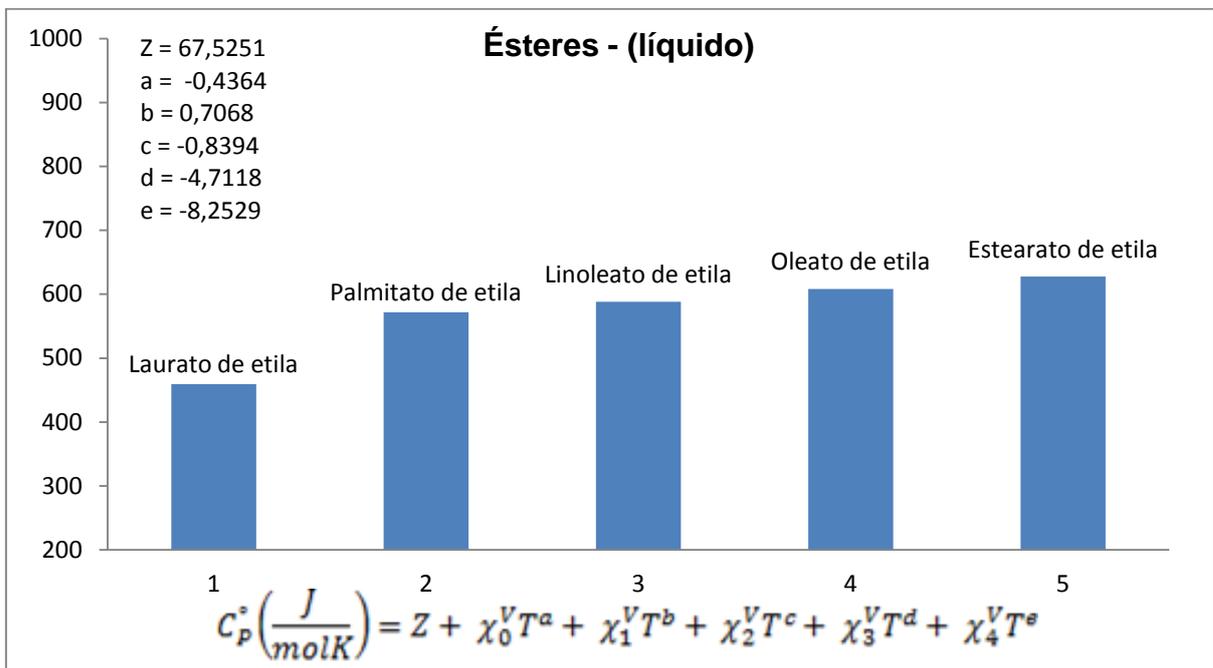


Figura 4. 36 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ésteres líquidos de cadeias longas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

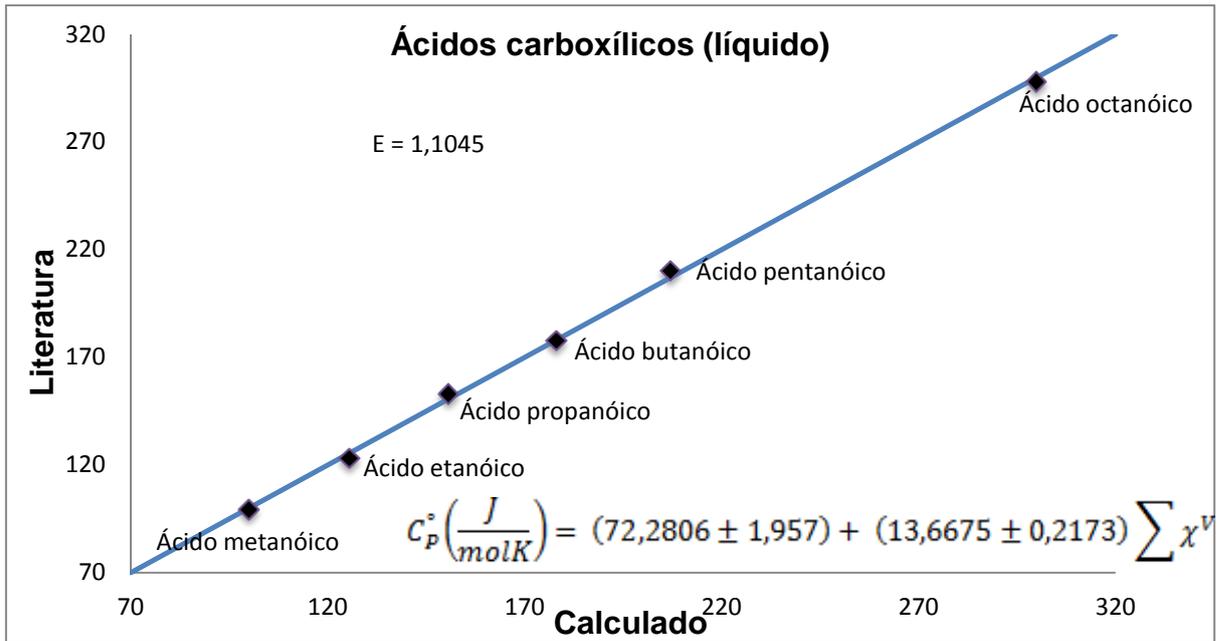


Figura 4. 37 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

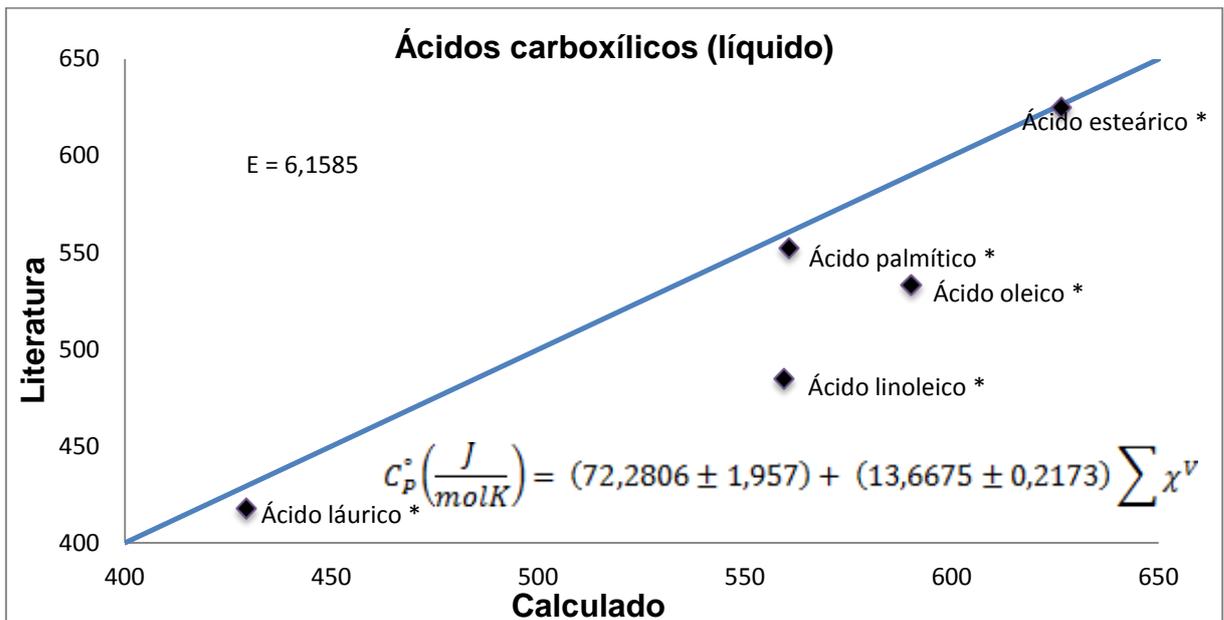


Figura 4. 38 - Modelo 4 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

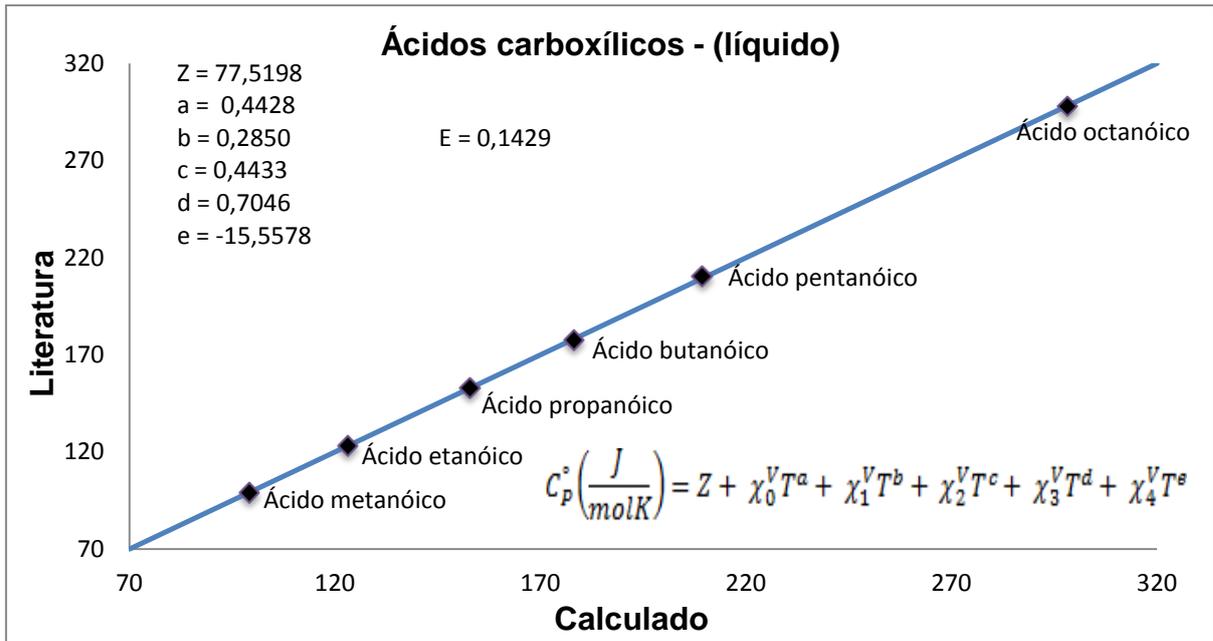


Figura 4. 39 – Modelo 6 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias pequenas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

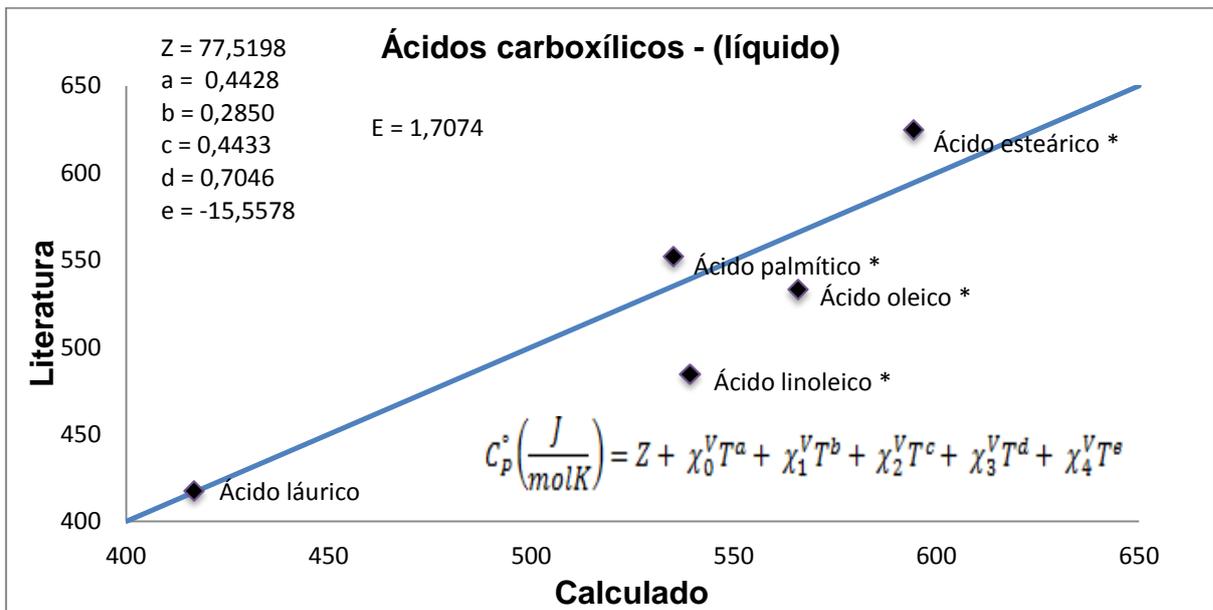


Figura 4. 40 - Modelo 6 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias longas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

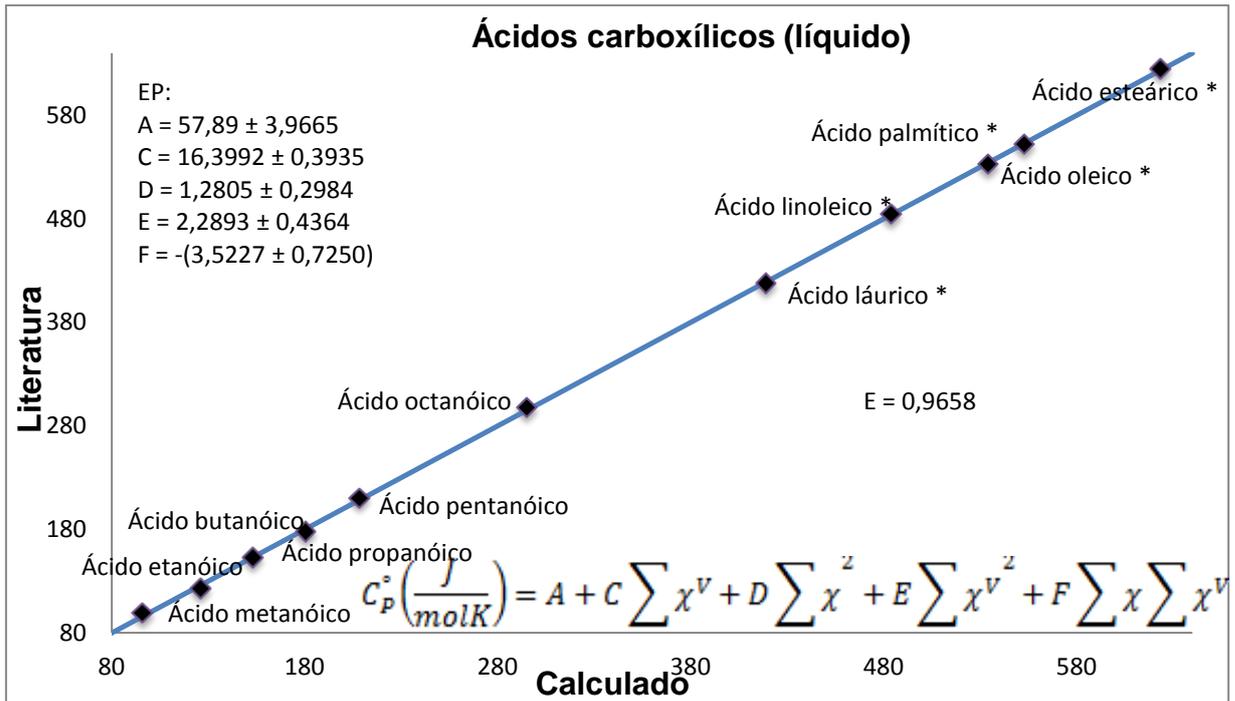


Figura 4. 41 - Modelo 5 para capacidade calorífica de ácidos carboxílicos líquidos de cadeias pequenas e longas, utilizando a soma dos  $\chi^V$ 's e  $\chi^Z$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

#### 4.3. CALOR DE VAPORIZAÇÃO

O calor de vaporização foi correlacionado usando os modelos 1, 2 (modelos lineares e 3 (modelo quadrático) para alcanos, resultando em bons resultados com um erro médio relativo de no máximo 5% (Figuras 4.41, 4.42 e 4.43). A mesma análise vale para as demais famílias de compostos (alcanos ramificados, alcoóis, ésteres e ácidos carboxílicos), como pode ser observado nas Figuras 4.45 a 4.53.

Para a correlação do calor de vaporização de ácidos carboxílicos o modelo 4, com 3 parâmetros, utilizado para ácidos de cadeias curtas (Figura 4.50) foi utilizado para ácidos de cadeias longas. Enquanto o modelo apresenta um desvio médio relativo de 9% para de ácidos carboxílicos de cadeia curta, o mesmo modelo possui um erro médio de 174% para ácidos de cadeias longas. É importante salientar que para ácidos carboxílicos de cadeias longas os dados da literatura foram obtidos usando modelos do DIPPR.

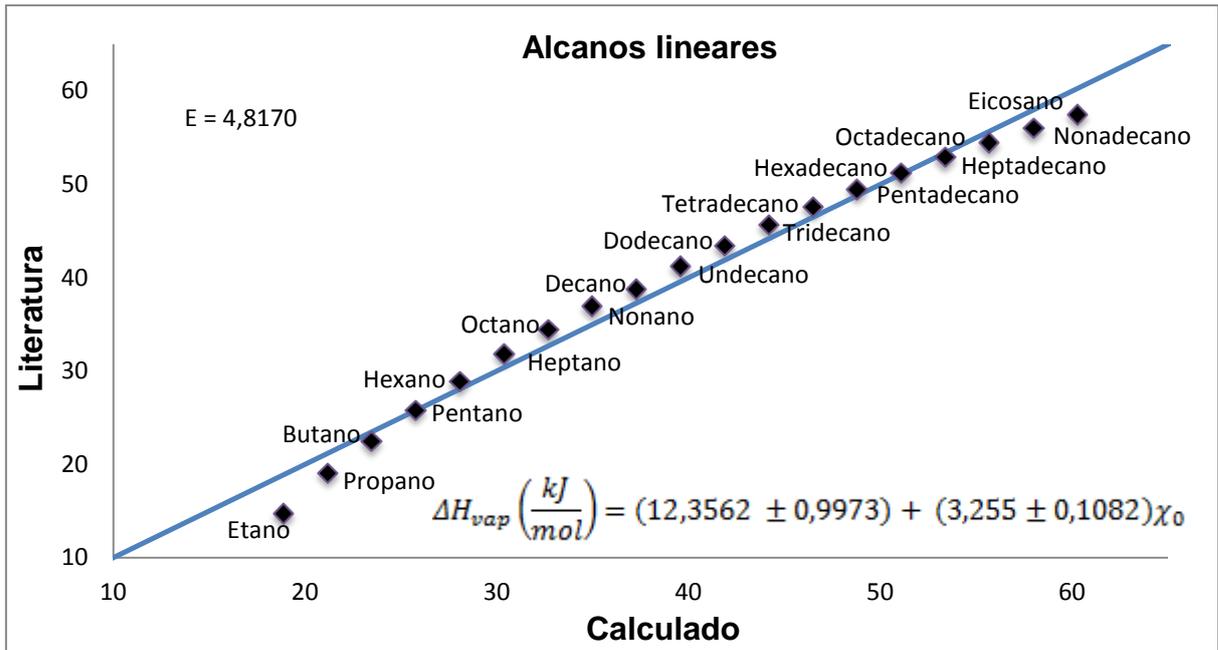


Figura 4. 42 - Modelo 1 para calor de vaporização de alcanos, utilizando  $\chi$  de ordem zero, a 298,15 K.

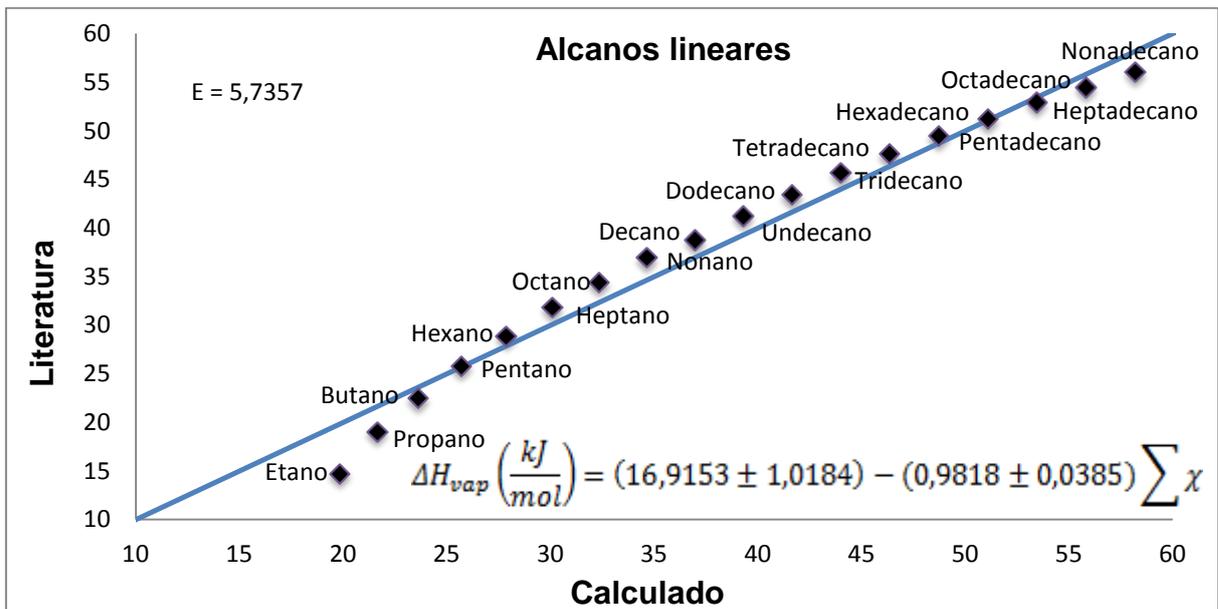


Figura 4. 43 - Modelo 2 para calor de vaporização de alcanos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

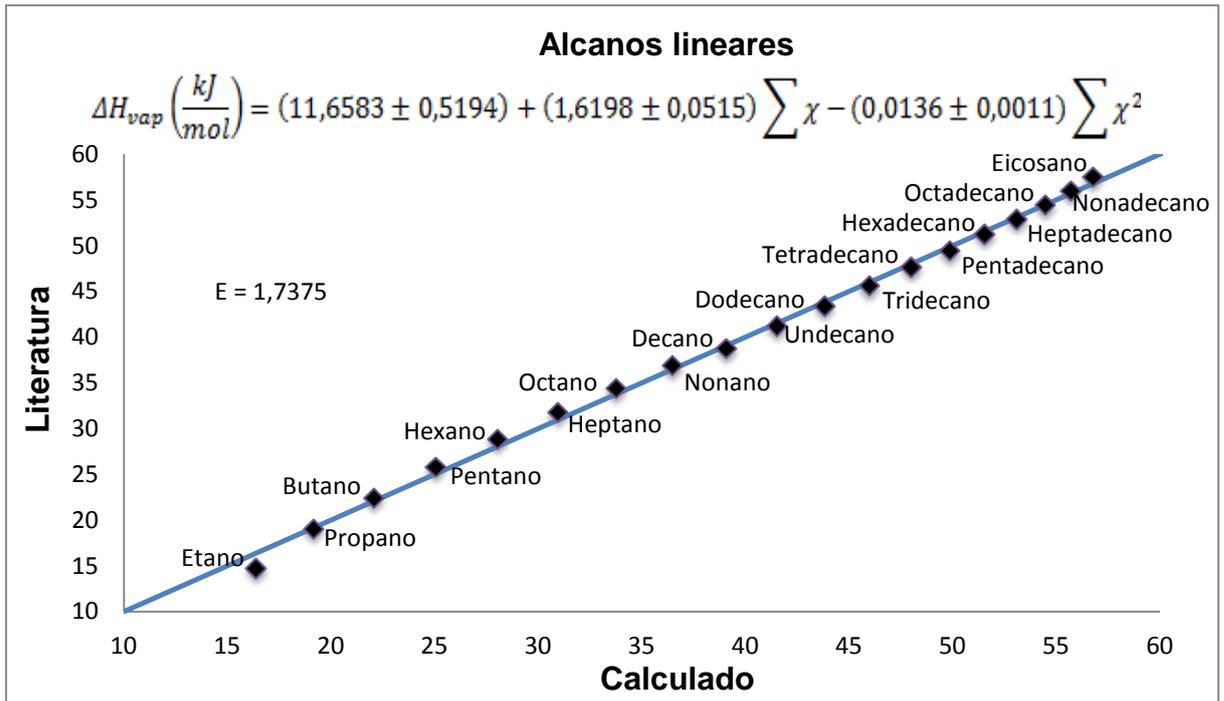


Figura 4. 44 - Modelo 3 para calor de vaporização de alcanos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

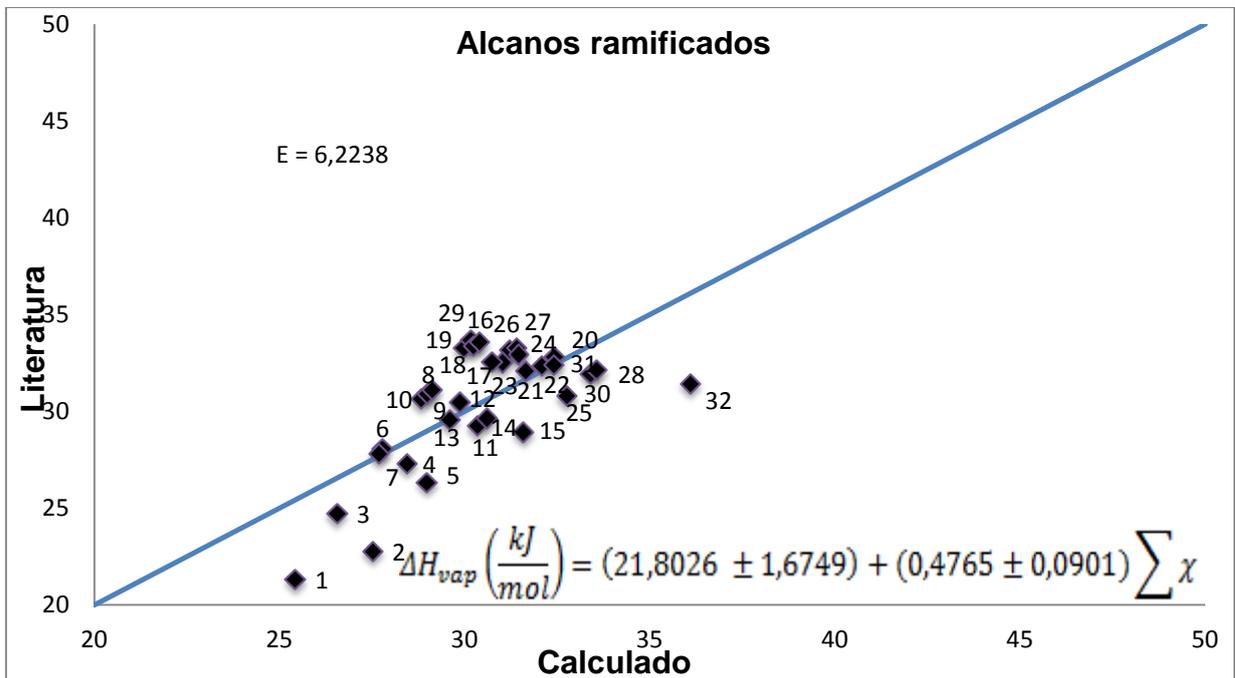


Figura 4. 45 - Modelo 2 para calor de vaporização de alcanos ramificados, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

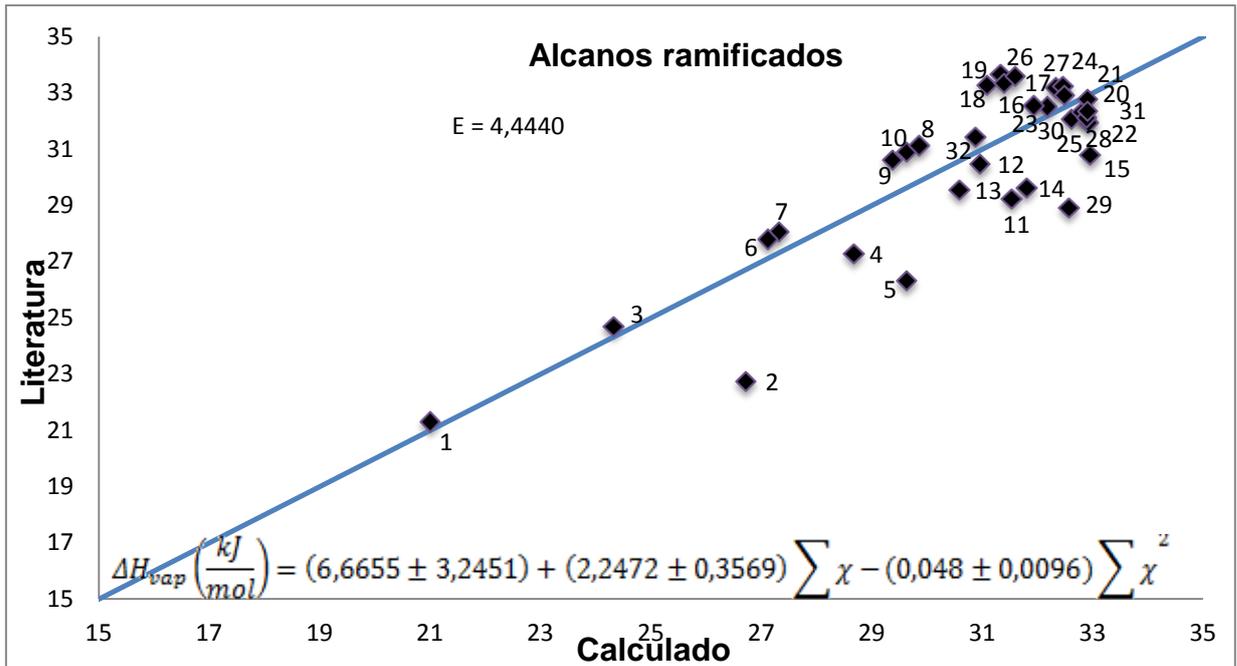


Figura 4. 46 - Modelo 3 para calor de vaporização de alcanos ramificados, utilizando um modelo quadrático com a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens e o quadrado desta soma, a 298,15 K.

Tabela 4. 1 – Alcanos ramificados

ALCANOS RAMIFICADOS	
1. Metil-propano	17. 3-Metil-heptano
2. 2,2-Dimetil-propano	18. 4-Metil-heptano
3. 2-Metil-butano	19. 3-Etil-hexano
4. 2,3-Dimetil-butano	20. 2,2-Dimetil-hexano
5. 2,2-Dimetil-propano	21. 2,3-Dimetil-hexano
6. 3-Metil-pentano	22. 2,4-Dimetil-hexano
7. 2-Metil-pentano	23. 2,5-Dimetil-hexano
8. 2-Metil-hexano	24. 3,3-Dimetil-hexano
9. 3-Metil-hexano	25. 3,4-Dimetil-hexano
10. 3-Etil-pentano	26. 2-Metil-3-Etil-pentano
11. 2,2-Dimetil-pentano	27. 3-Metil-3-Etil-pentano
12. 2,3-Dimetil-pentano	28. 2,2,3-Trimetil-pentano
13. 2,4-Dimetil-pentano	29. 2,2,4-Trimetil-pentano
14. 3,3-Dimetil-pentano	30. 2,3,3-Trimetil-pentano
15. 2,2,3-Trimetil-butano	31. 2,3,4-Trimetil-pentano

16. 2-Metil-heptano

32. 2,2,3,3-Tetrametil-butano

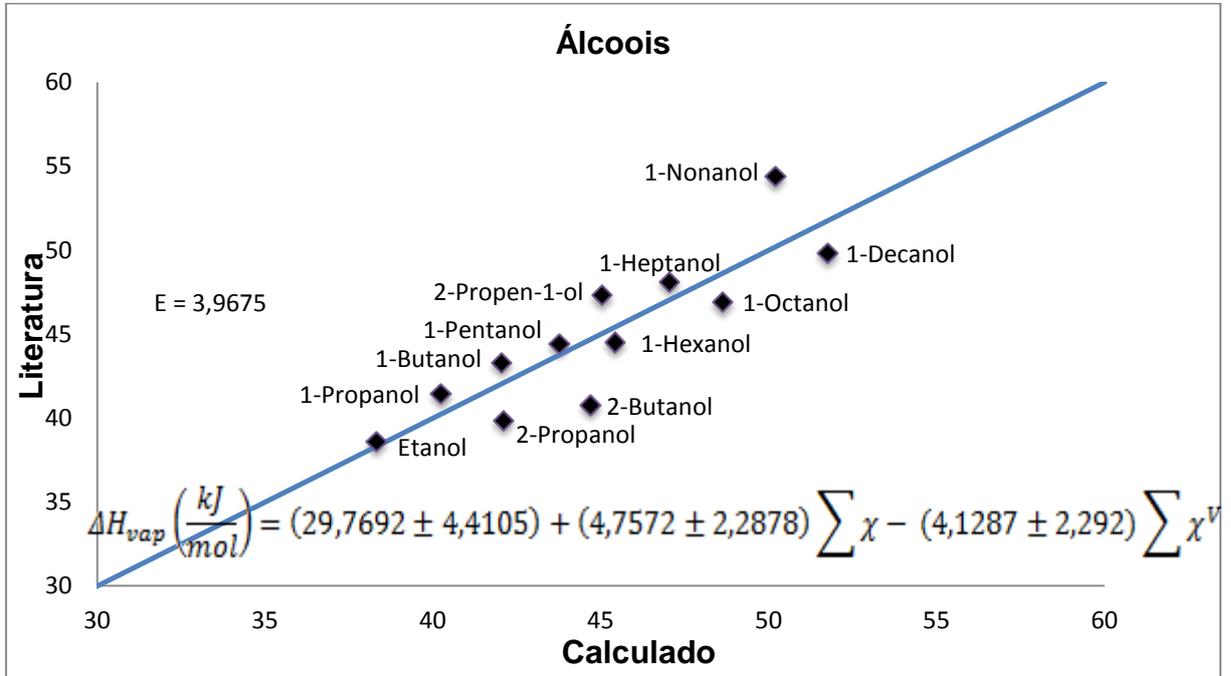


Figura 4. 47 - Modelo 4 para calor de vaporização de álcoois gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

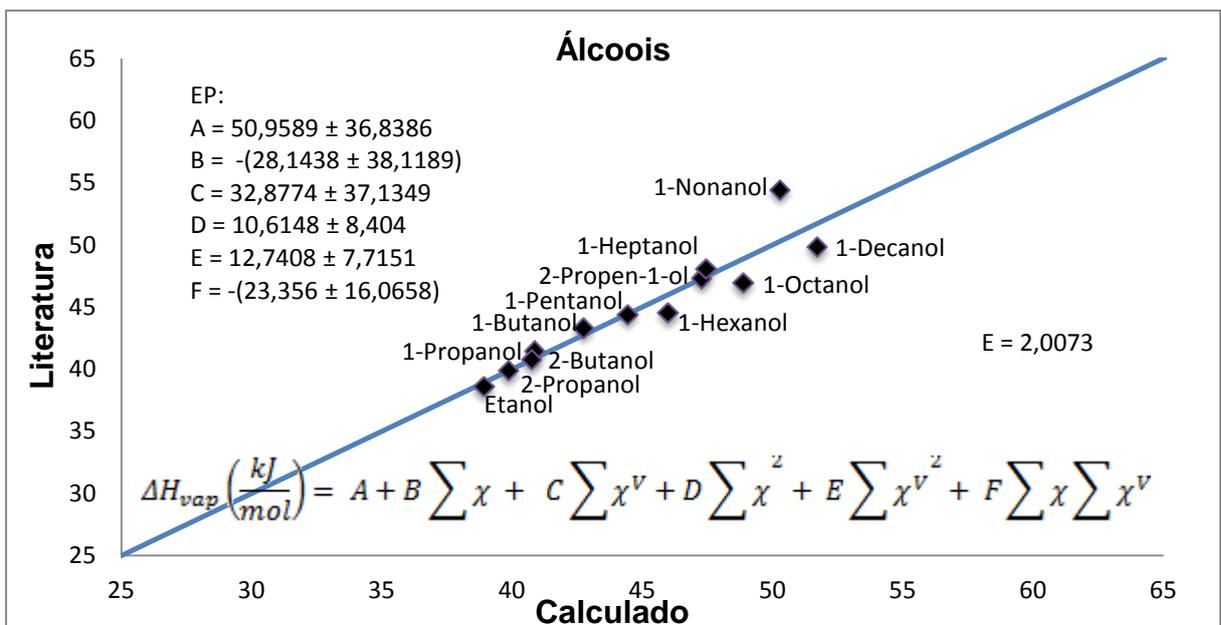


Figura 4. 48 - Modelo 5 para calor de vaporização de álcoois gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

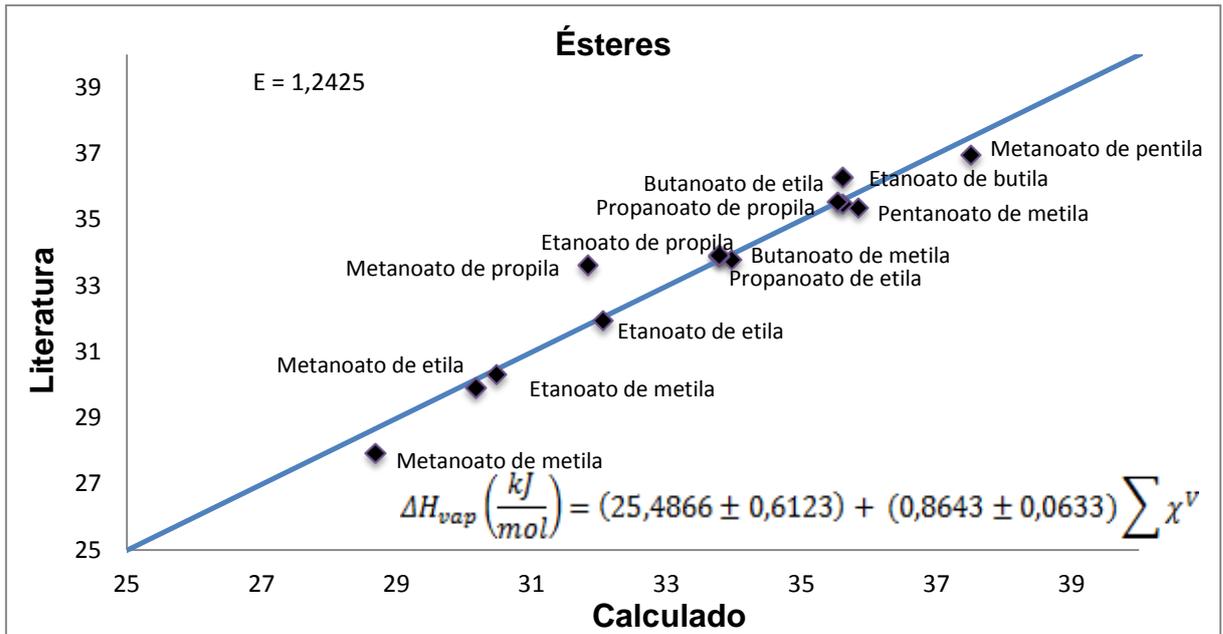


Figura 4. 49 - Modelo 4 para calor de vaporização de ésteres de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

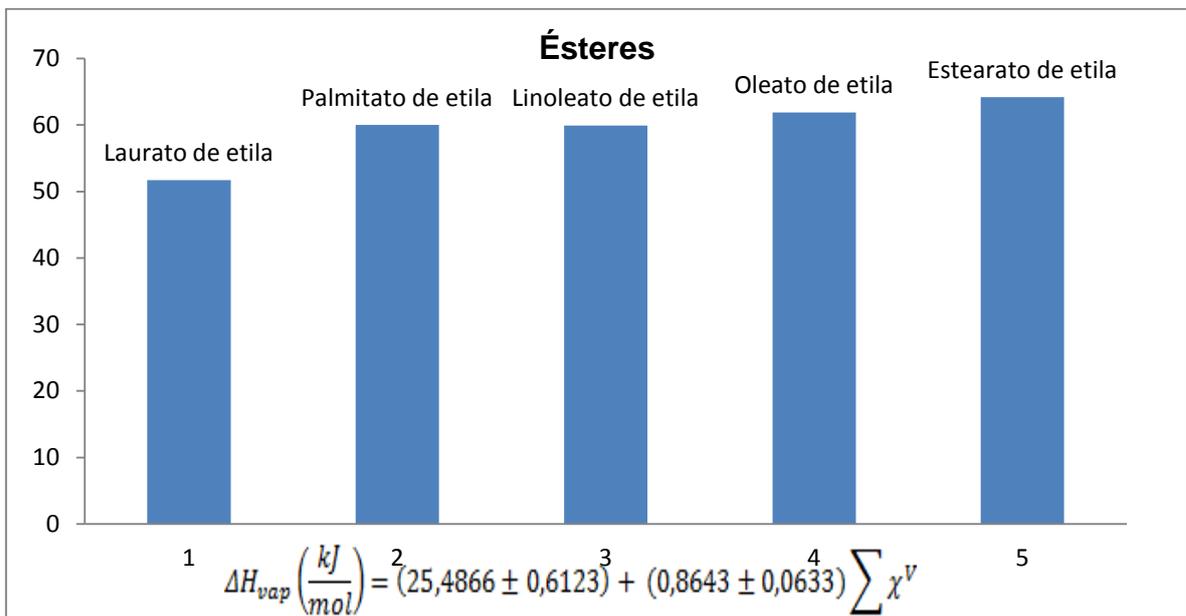


Figura 4. 50 - Modelo 4 para calor de vaporização de ésteres de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

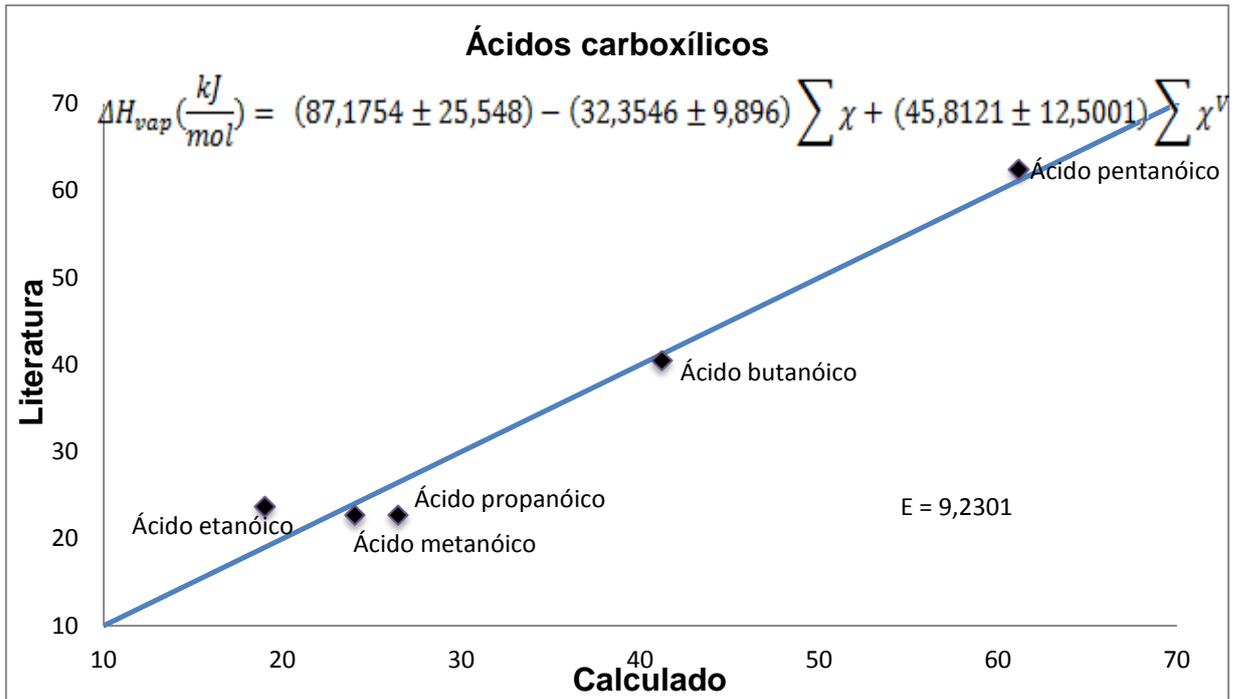


Figura 4. 51 - Modelo 4 para calor de vaporização de ácidos carboxílicos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

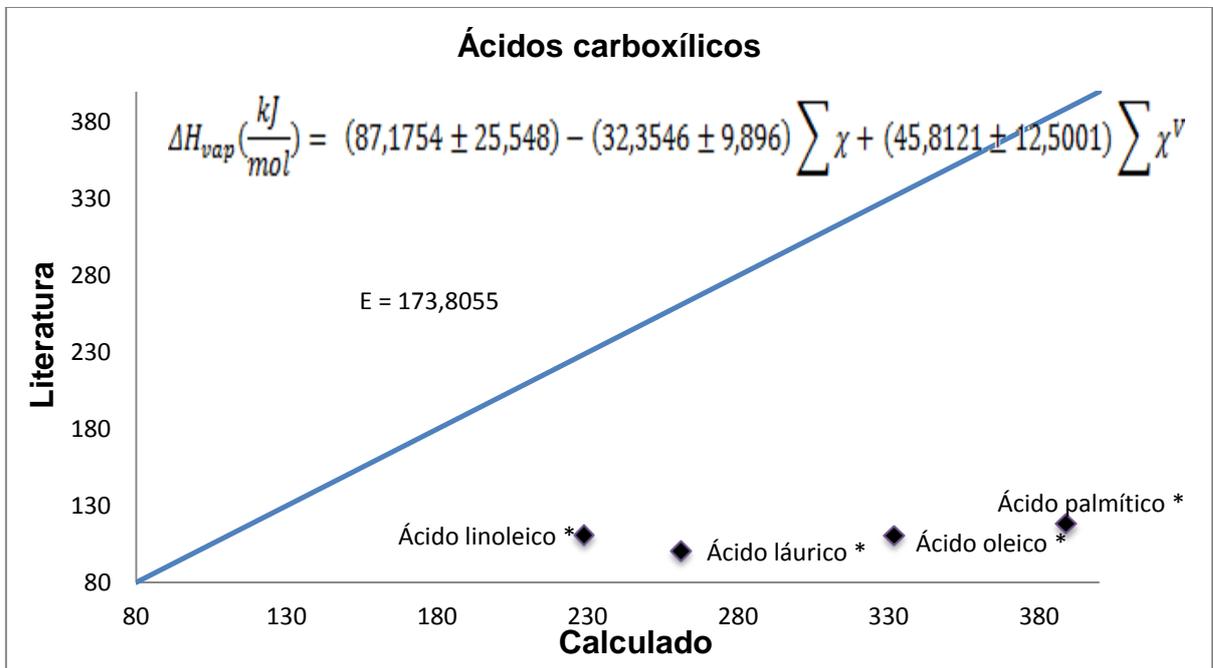


Figura 4. 52 - Modelo 4 para calor de vaporização de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

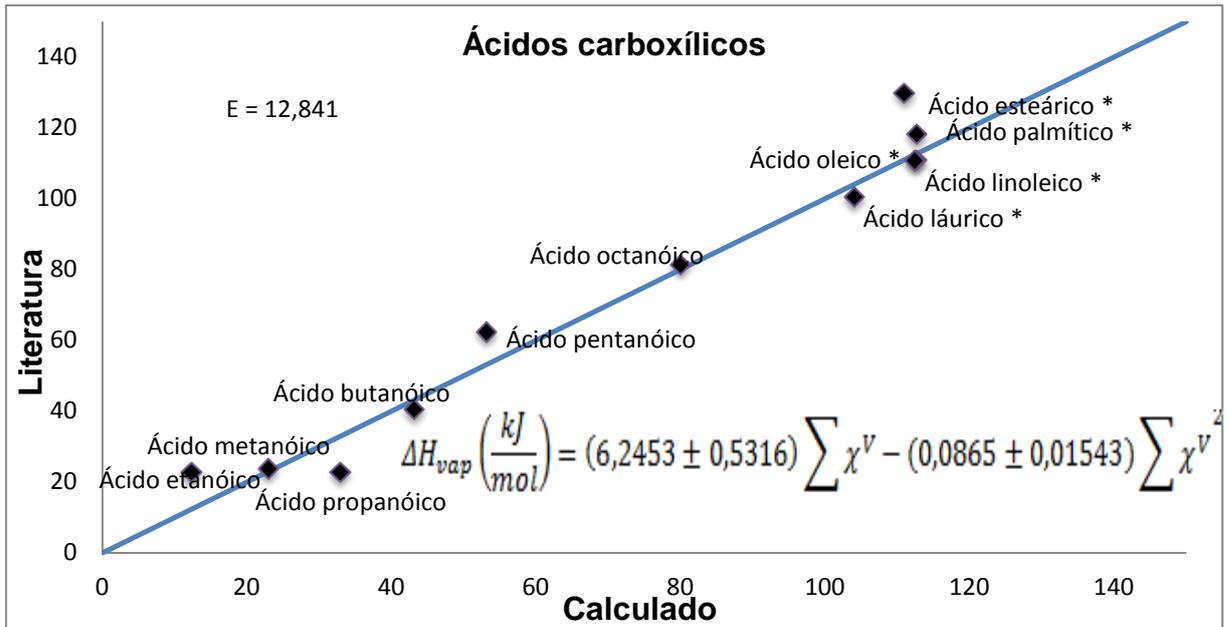


Figura 4. 53 - Modelo 5 para calor de vaporização de ácidos carboxílicos gasosos a 298,15 K.

#### 4.4. ENERGIA LIVRE DE GIBBS PADRÃO DE FORMAÇÃO

Para a energia livre de formação foram utilizados os modelos lineares (modelos 2 e 4) para todos os compostos, exceto para os ácidos carboxílicos onde o modelo quadrático (modelo 5) mostrou um melhor desempenho.

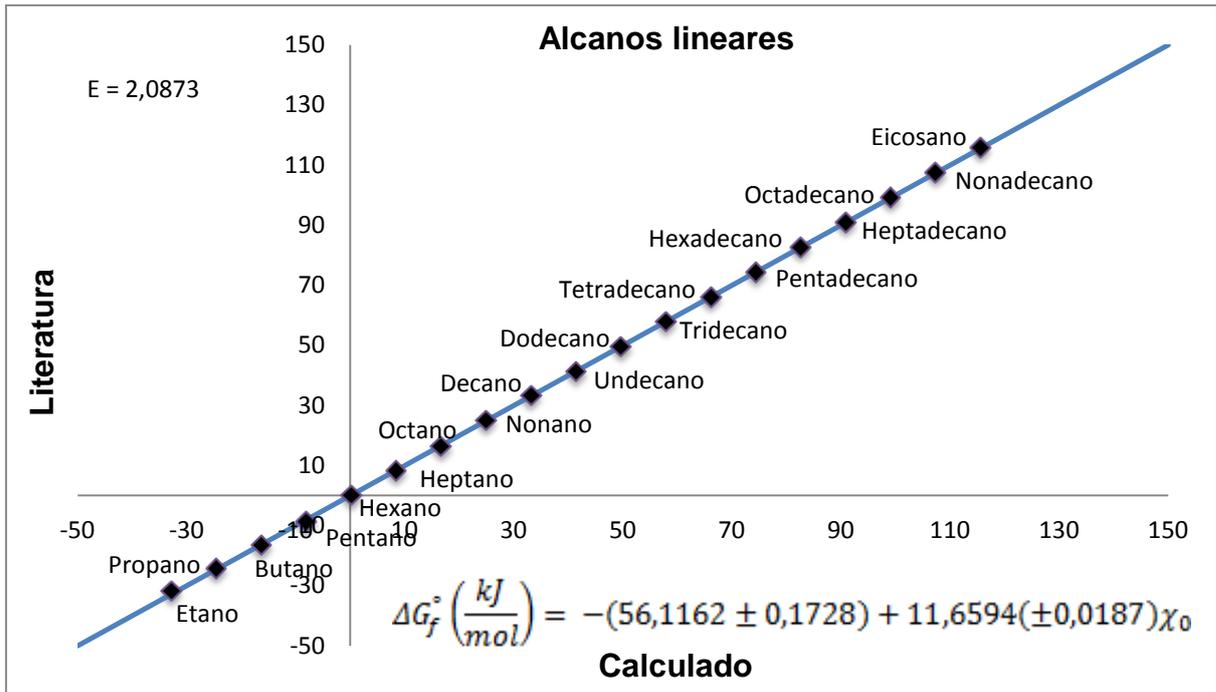


Figura 4. 54 - Modelo 1 para energia de Gibbs de formação de alcanos gasosos, utilizando  $\chi$  de ordem zero, a 298,15 K.

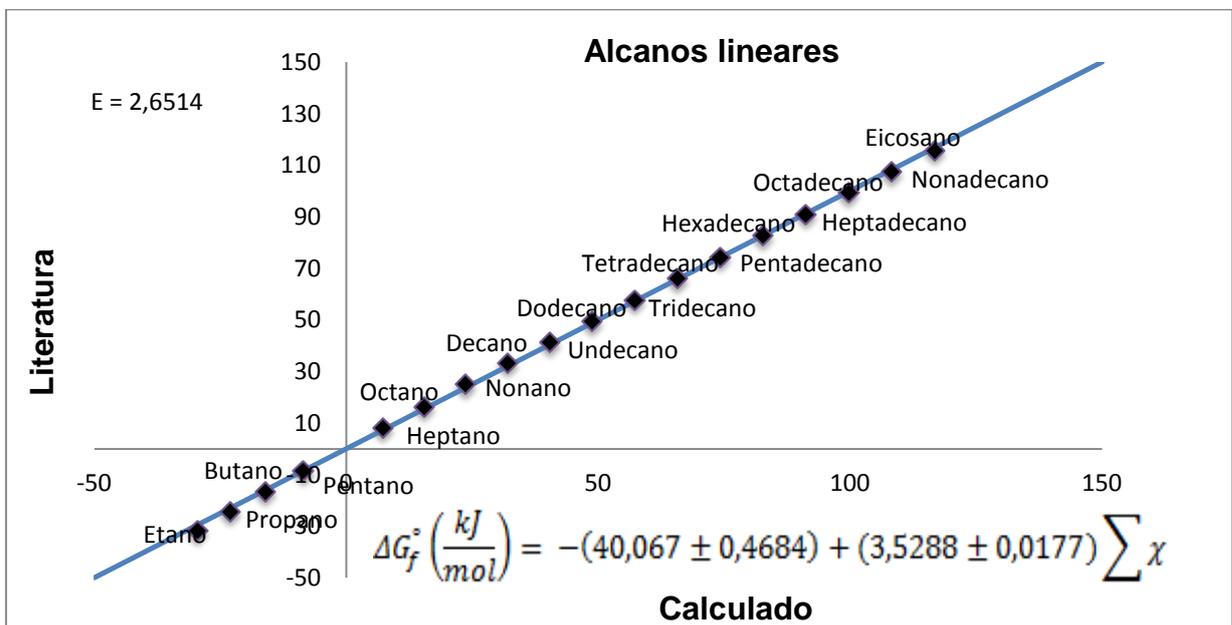


Figura 4. 55 - Modelo 2 para energia de Gibbs de formação de alcanos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's de todas as ordens, a 298,15 K.

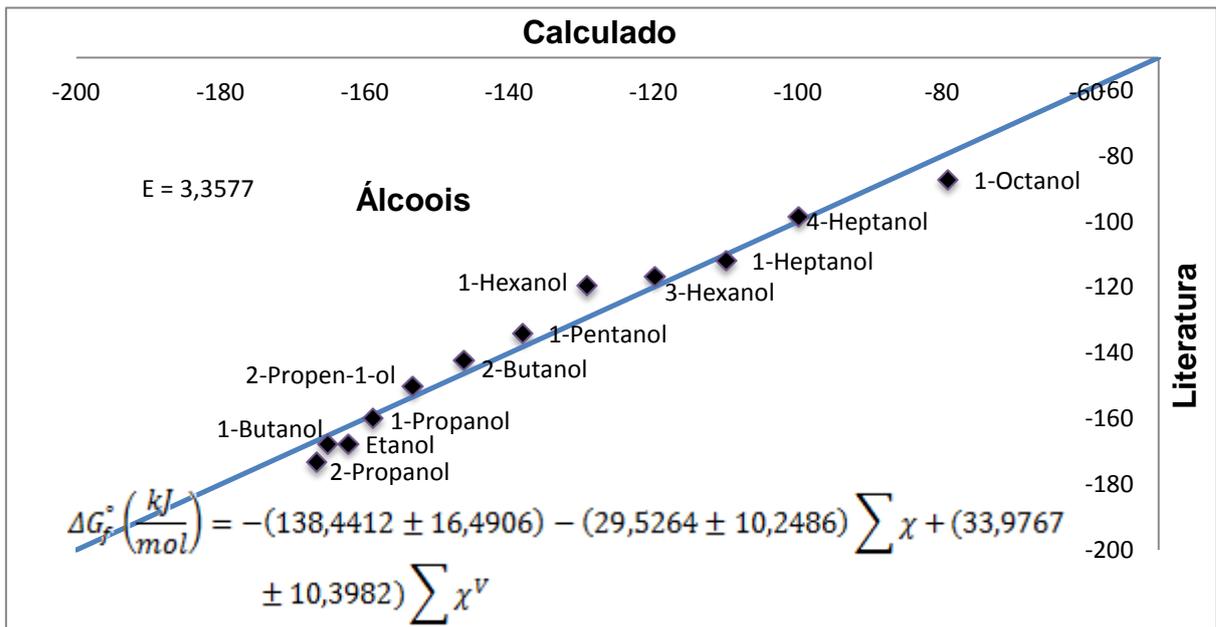


Figura 4. 56 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de álcoois gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

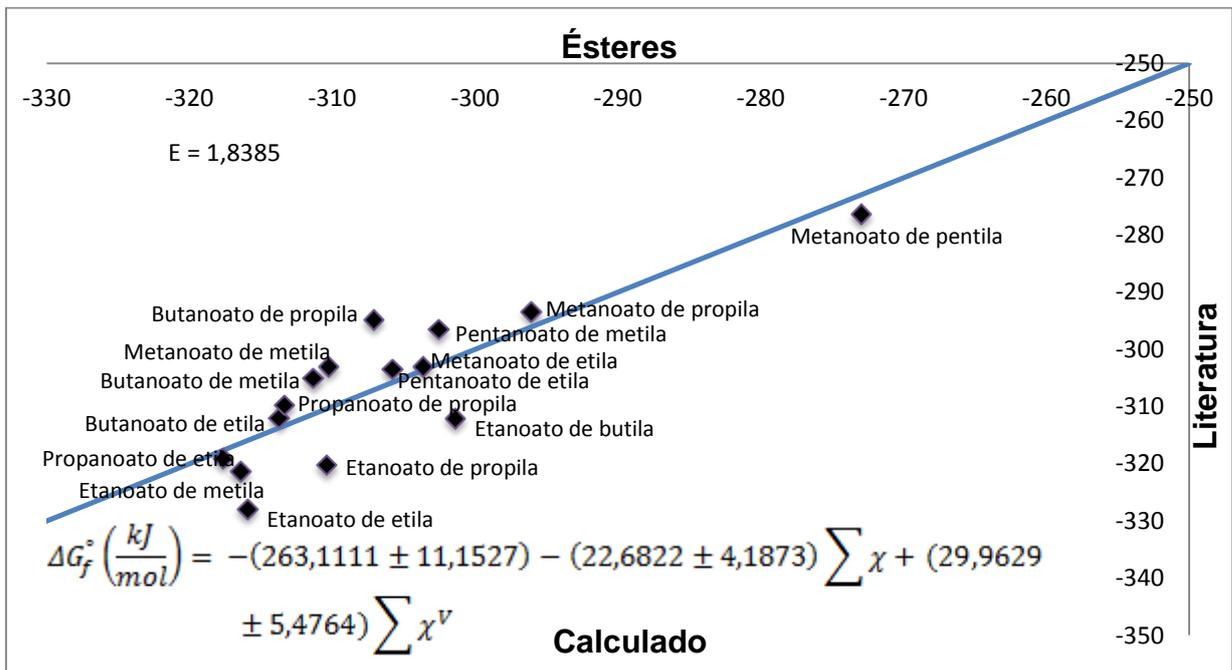


Figura 4. 57 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de ésteres gasosos de cadeias pequenas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

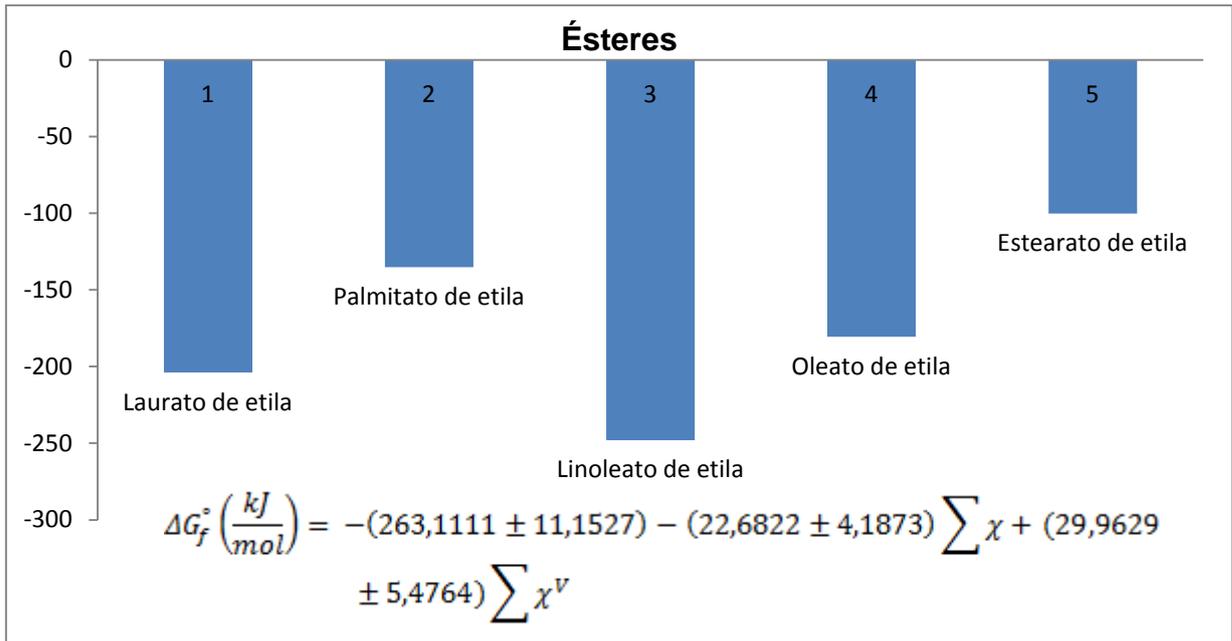


Figura 4. 58 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de ésteres gasosos de cadeias longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi^V$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

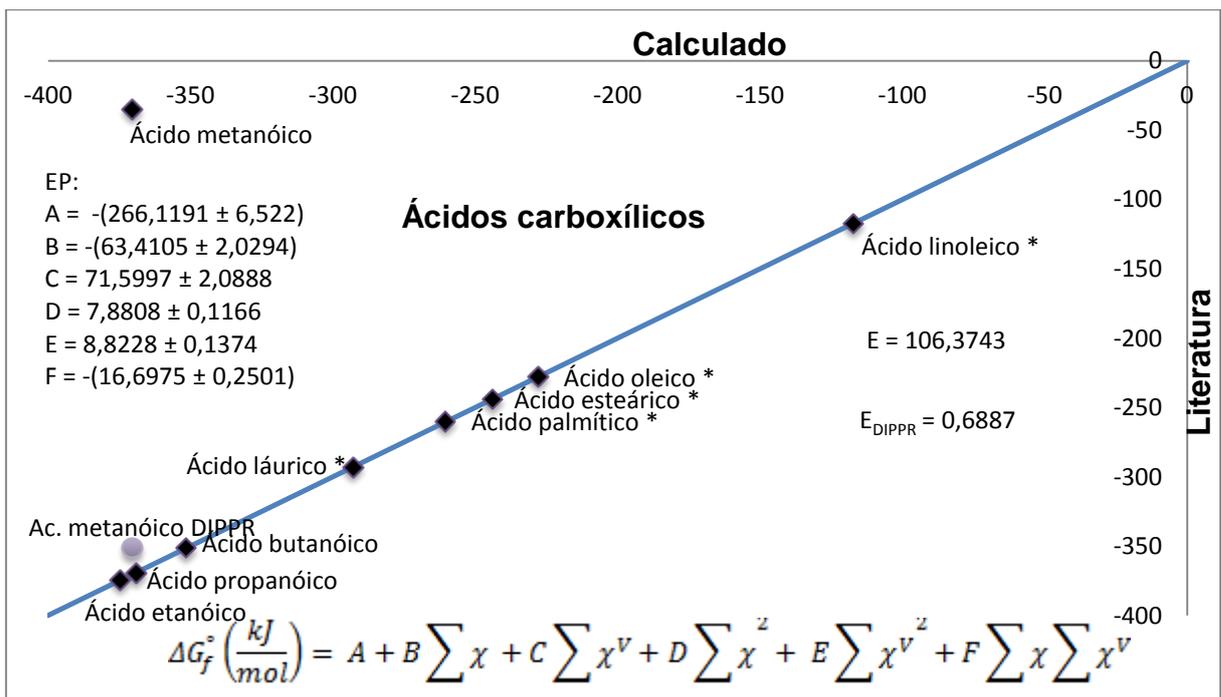


Figura 4. 59 - Modelo 5 para energia de Gibbs de formação de ácidos carboxílicos gasosos de cadeias pequenas e longas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi^V$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

## 5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

### 5.1. CONCLUSÕES

Foram obtidas importantes correlações entre os índices de conectividade molecular e as propriedades incluindo calor de formação, capacidade calorífica, calor de vaporização e energia de Gibbs de formação, reforçando ainda mais a questão de a estrutura molecular é responsável por suas propriedades.

Foram utilizados 6 diferentes modelos para as propriedades apresentadas. Sendo que o modelo 1 apresentou melhores resultados para calor padrão de formação e energia livre de Gibbs padrão de formação de alcanos lineares. O modelo 3 se mostrou mais adequado para obtenção de calor padrão de formação, capacidade calorífica de gases ideais e de líquidos de alcanos ramificados e calor de vaporização de alcanos lineares e ramificados. O modelo 4 teve melhor desempenho para calor de vaporização de ésteres; capacidade calorífica de alcoóis líquidos e gasosos e para energia livre de Gibbs padrão de formação de alcoóis e de ésteres. O modelo 5 se adequou melhor ao cálculo de calor de formação e calor de vaporização de alcoóis e de ácidos carboxílicos e na obtenção da capacidade calorífica de líquido e energia livre de Gibbs padrão de formação de ácidos carboxílicos. E o sexto modelo teve resultados melhores para alcanos lineares, ésteres e ácidos carboxílicos gasosos e alcanos lineares e ésteres líquidos. No entanto, de maneira geral o modelo 4, com três parâmetros numéricos, mostrou um bom desempenho para grande parte dos diagramas.

Seria interessante a aplicação do método deste trabalho na substituição do método de contribuição de grupos, pois além da molécula ser considerada como um todo no cálculo das propriedades, um número pequeno de parâmetros é usado.

Como mostrado para os ésteres, o modelo aplicado aos ésteres de cadeia curta são extrapolados aos ésteres de cadeia longa, que não são encontrados na literatura facilmente. A obtenção das propriedades dos ésteres etílicos apresentada é uma importante contribuição deste estudo, já que o biodiesel é composto por ésteres de cadeias longas. A extrapolação pode, ainda, ser estendida a outras famílias de compostos orgânicos.

## 5.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Obtenção de outras propriedades, como a pressão de vapor.

Cálculo de parâmetros de equações de estado (SAFT, PCSAFT).

Uma análise aprofundada e detalhada entre os índices de conectividade e as propriedades de isômeros, já que este índice, como diferencial entre os outros, possibilita a distinção entre isômeros.

## REFERÊNCIAS

CONSTATINOU, L.; GANI, R. New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds. **AIChE Journal**, 40, 1697 – 1710, 1994.

GORDON, M.; SCANTLEBURY, G. R. **Trans. Faraday Soc.** 60, 605 (1964).

JOBACK, K. G.; REID R. C. Estimation of pure-component properties from group-contributions. **Chemical Engineering Communications**, 57, 233 – 243, 1987.

KIER, B.; HALL, L. H. **Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research**, Academic Press, New York (1976).

NDIAYE, P.M.; NEVES, P.J.; DACOSTA, J.B.N.; CARNEIRO, J.W.M. Top - um programa de cálculo de descritores topológicos para uso em correlações entre estrutura e atividade. **Química Nova**, 21 (6) 1998.

PLATT, J. R. **Phys. Chem.**, 56, 328, 1952.

POLING, B.E.; PRAUSNITZ, J.M.; O'CONNELL, J.P. **The properties of gas and liquid**, Mc Graw Hill 5<sup>th</sup> ed., 2001.

RANDIC, M. **J. Am. Chem. Soc.** 97, 6609, 1975.

SYLVESTER, J. J., **Am. J. Math.** 1, 64, 1874.

TERON, L. R. **Termodinâmica química aplicada**, Manole Ltda 1<sup>a</sup> ed., 2009.

a) WIENER, J. **Am. Chem. Soc.** 17, 2636, 1947. b) WIENER, J. **Phys. Chem.** 52, 1082, 1948.

## APÊNDICE A

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE ALCENOS, ALCINOS,  
ÉTERES E CETONAS.

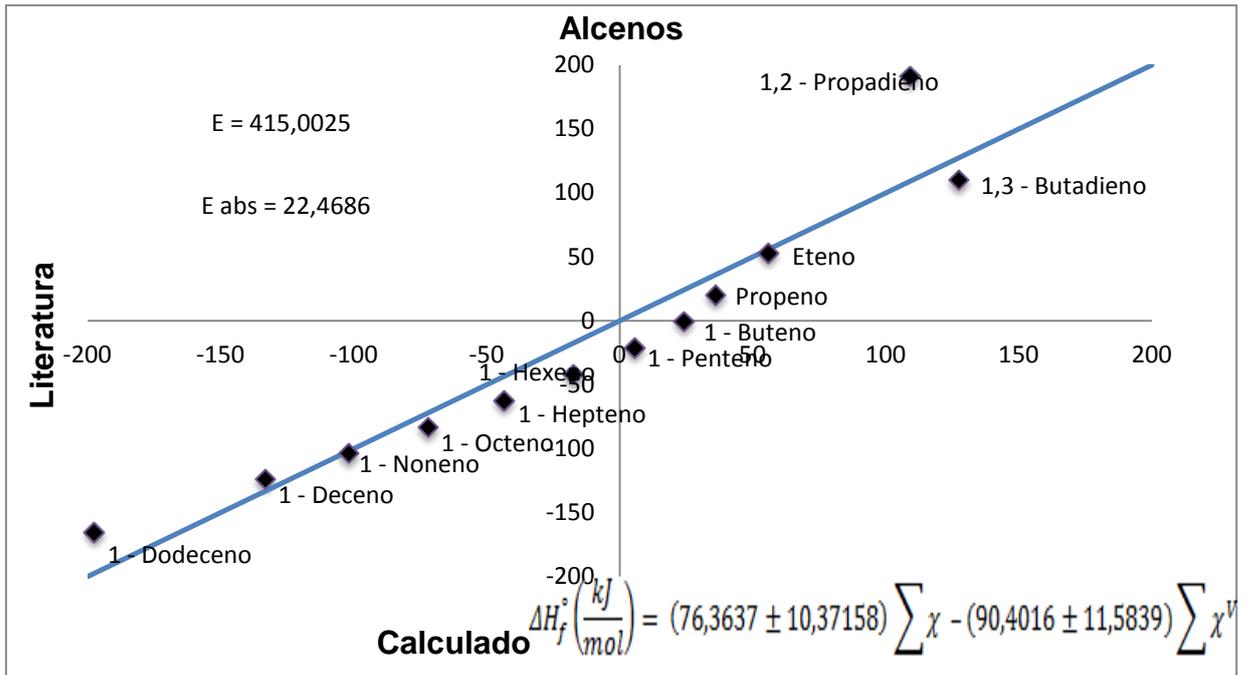


Figura A. 1 – Modelo 4 para calor de formação de alcenos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de Valência de todas as ordens, a 298,15 K.

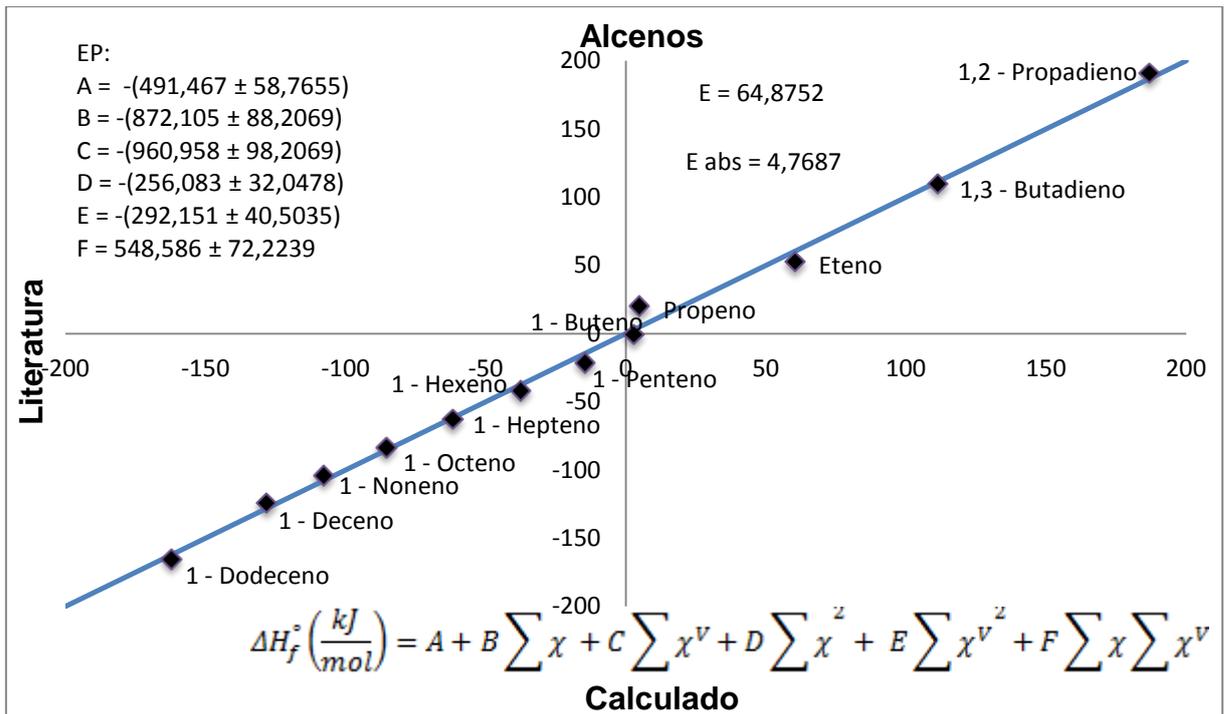


Figura A.2 – Modelo 5 para calor de formação de alcenos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

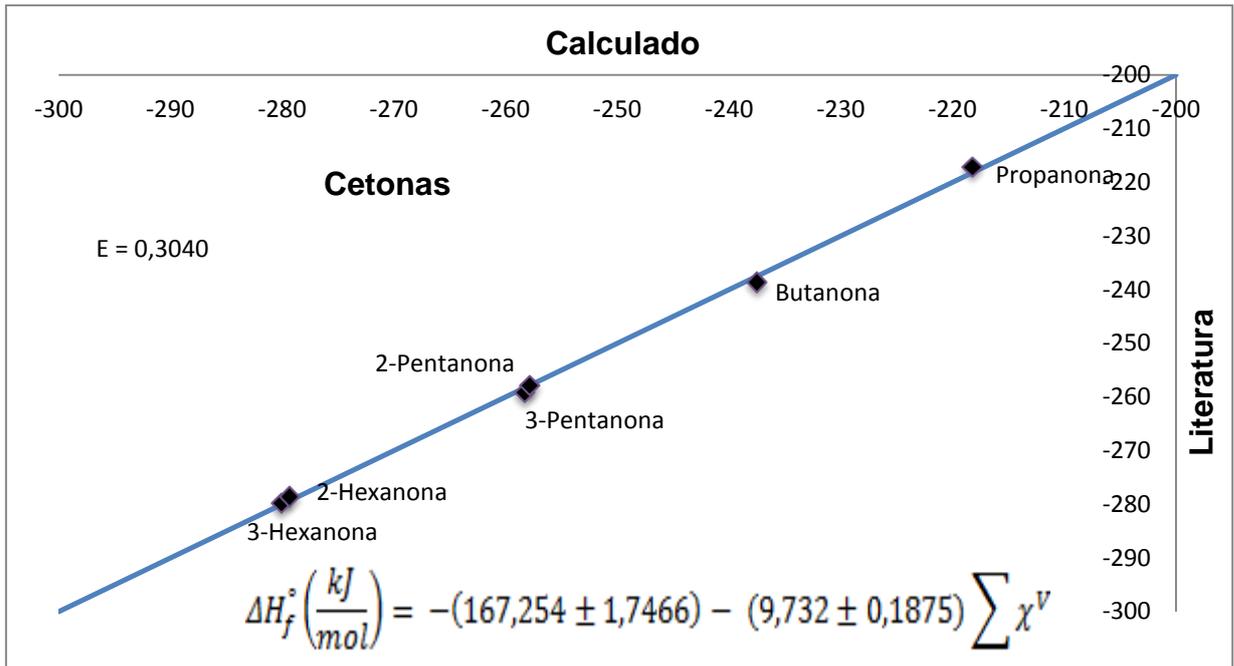


Figura A.3 - Modelo 4 para calor de formação de cetonas gasosas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

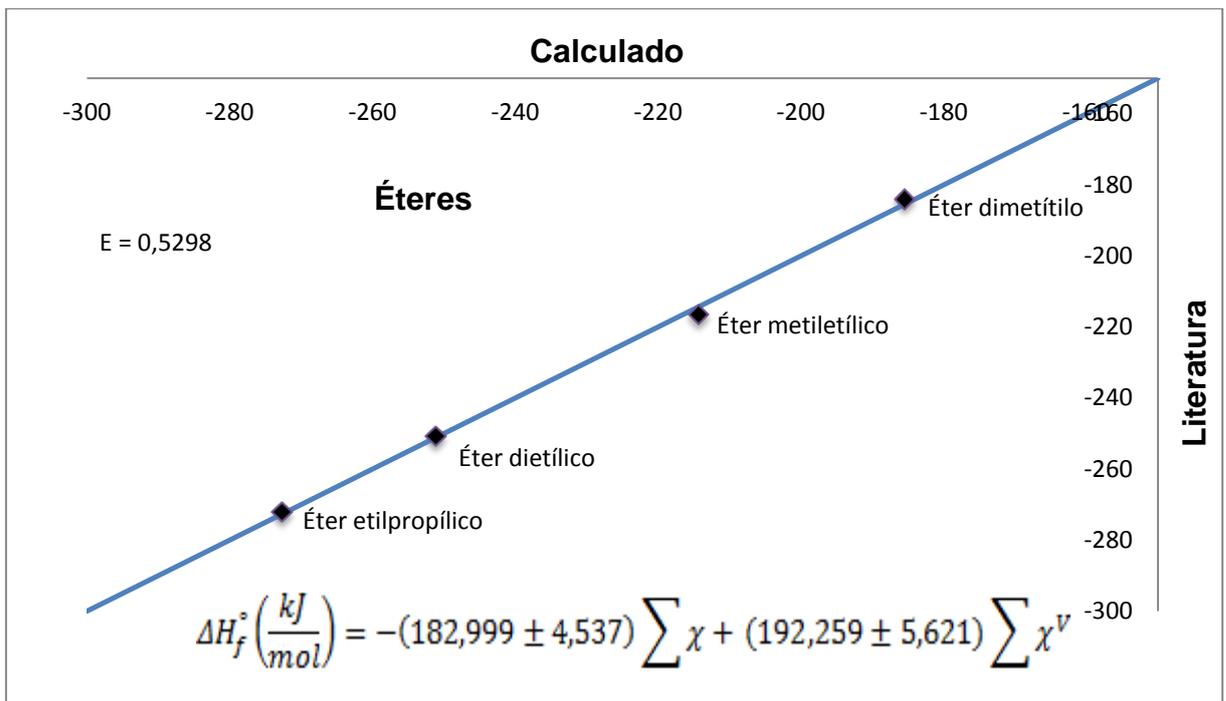


Figura A.4 - Modelo 4 para calor de formação de éteres gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

## CAPACIDADE CALORÍFICA DE GASES

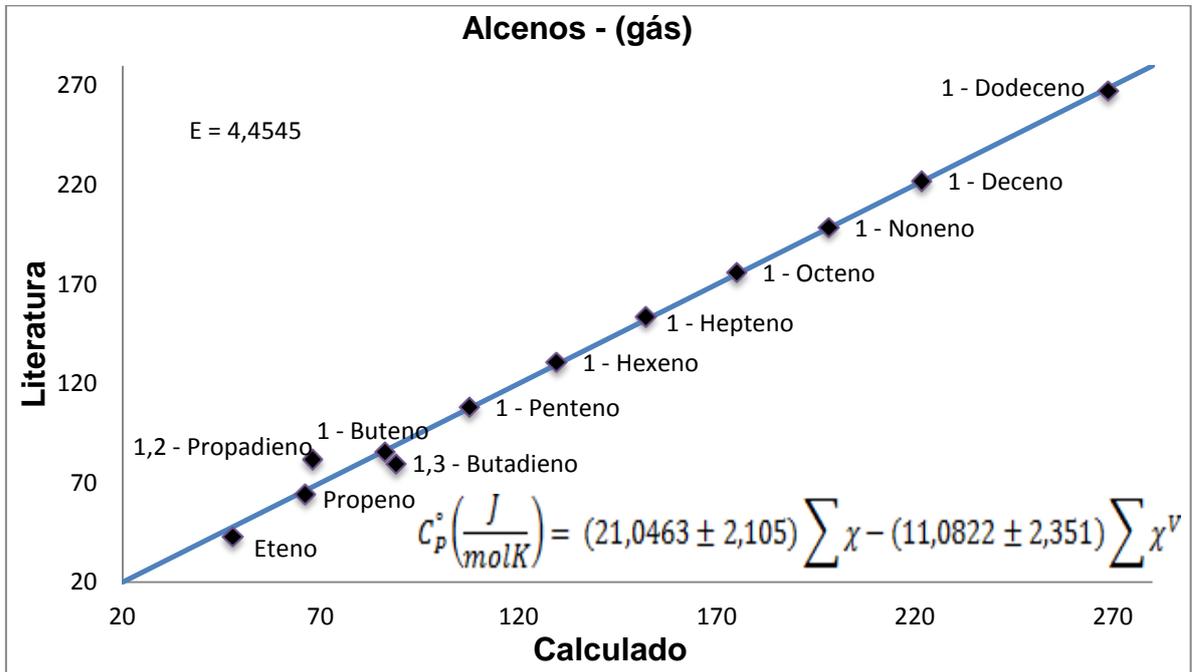


Figura A.5 - Modelo 4 para capacidade calorífica de alcenos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

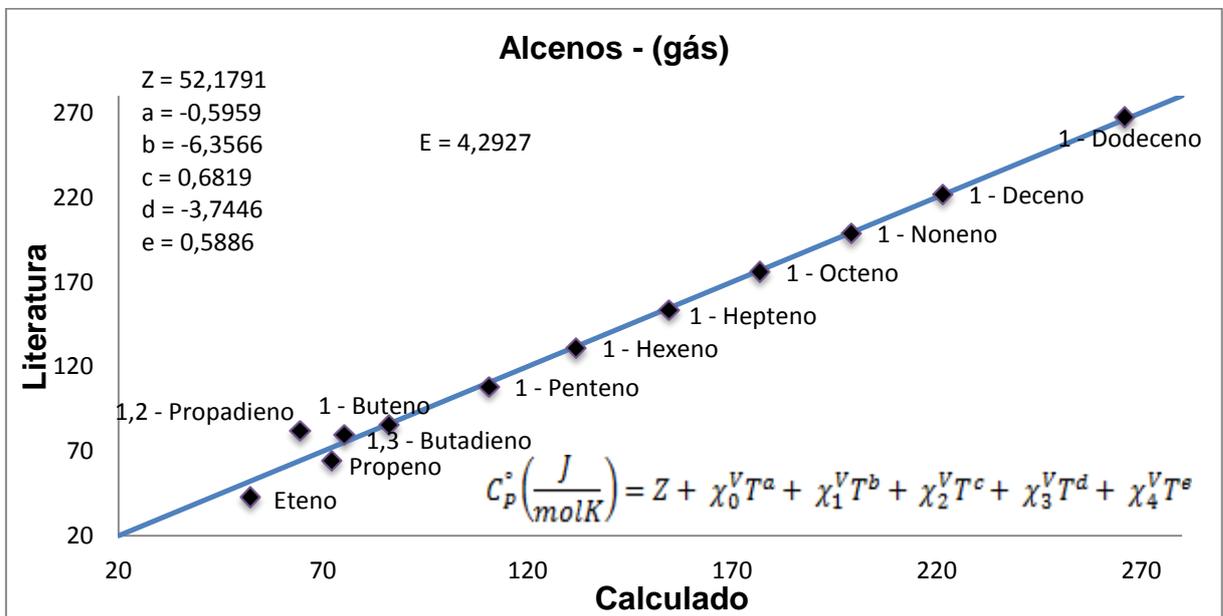


Figura A.6 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alcenos gasosos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

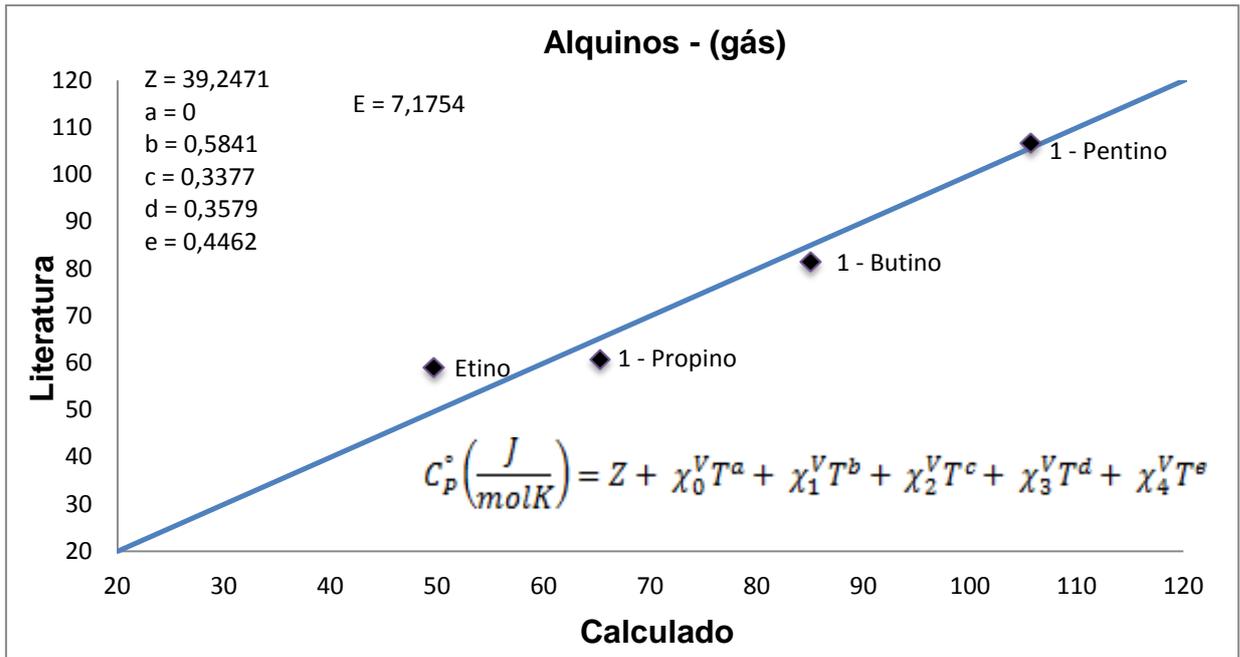


Figura A.7 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alquinos gasosos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

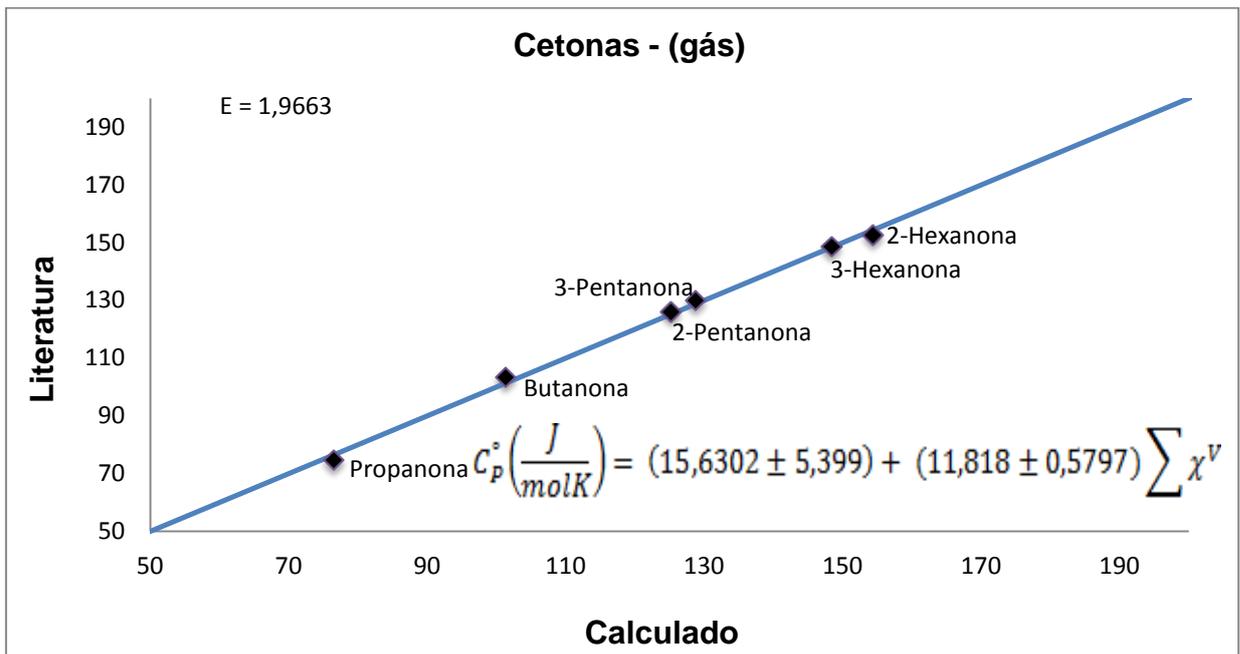


Figura A.8 - Modelo 4 para capacidade calorífica de cetonas gasosas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

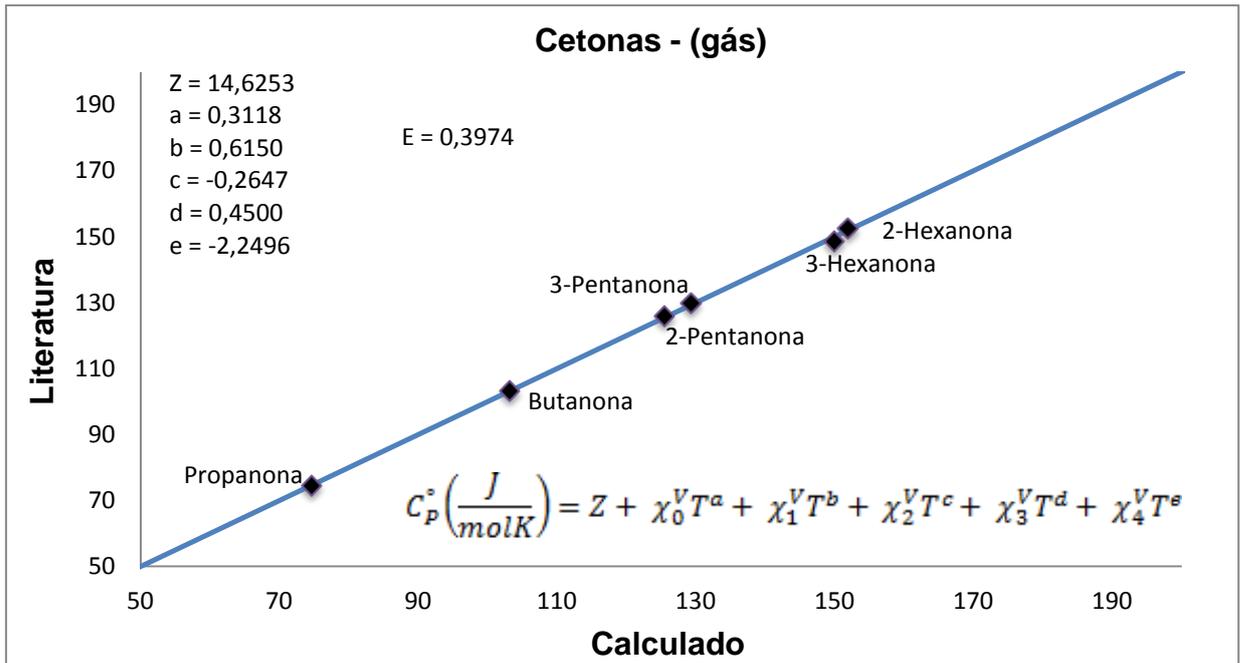


Figura A.9 - Modelo 6 para capacidade calorífica de cetonas gasosas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

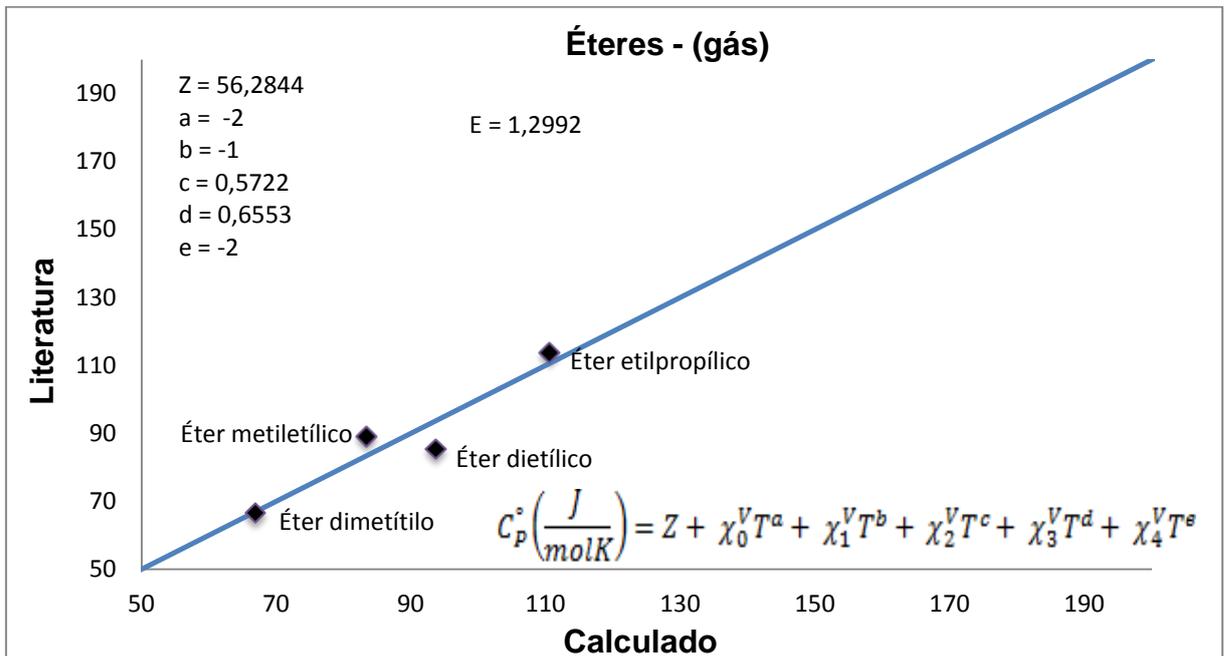


Figura A.10 - Modelo 6 para capacidade calorífica de éteres gasosos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

## CAPACIDADE CALORÍFICA DE LÍQUIDOS

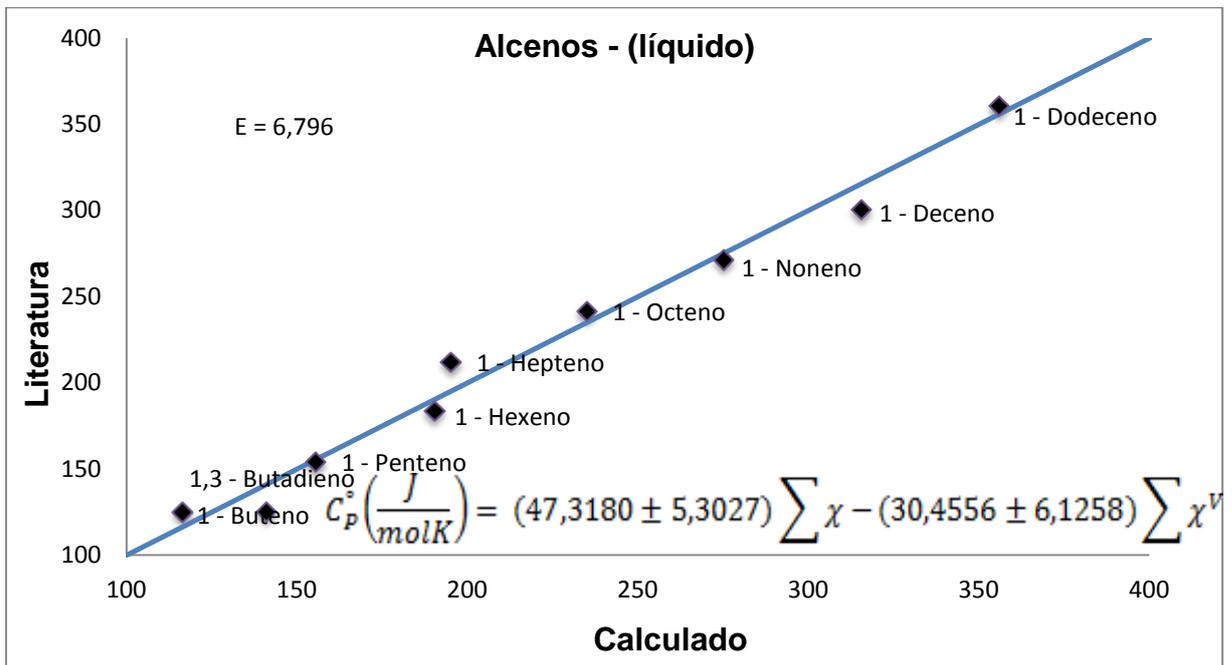


Figura A.11 - Modelo 4 para capacidade calorífica de alcenos líquidos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

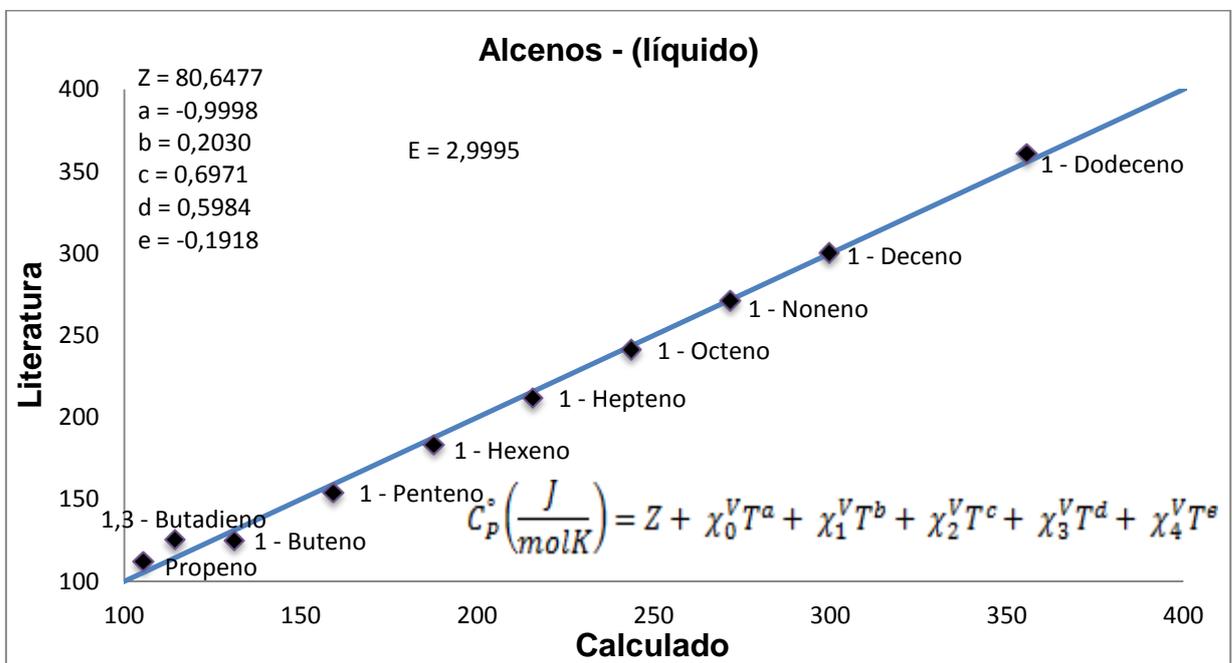


Figura A.12 - Modelo 6 para capacidade calorífica de alcenos líquidos, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

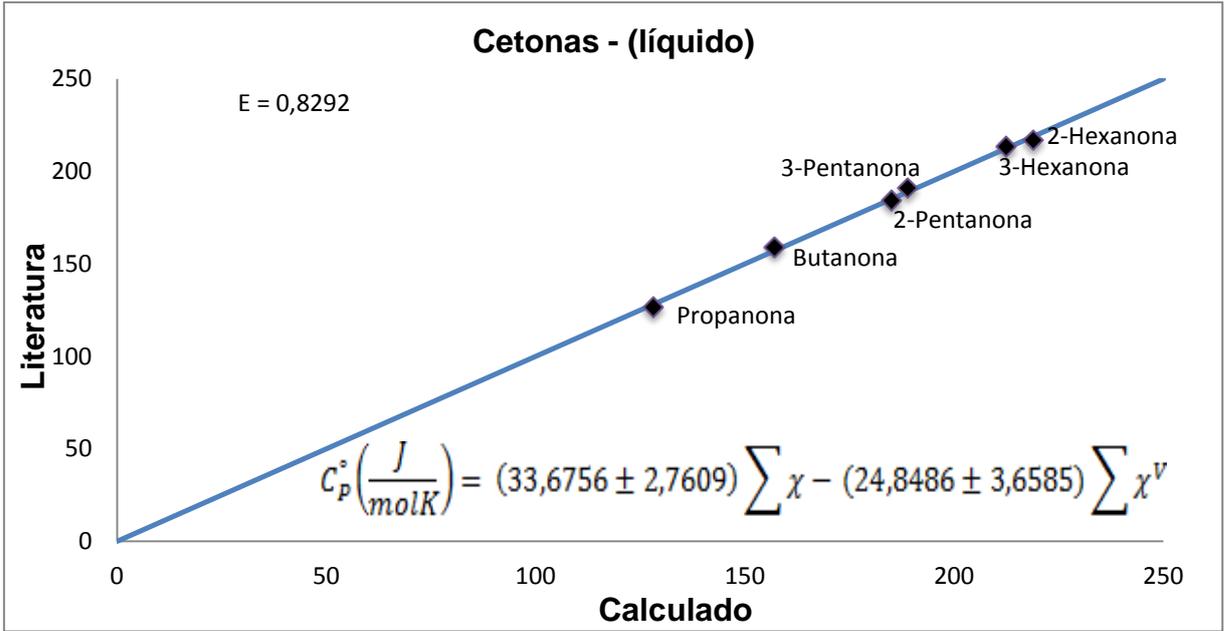


Figura A.13 - Modelo 4 para capacidade calorífica de cetonas líquidas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

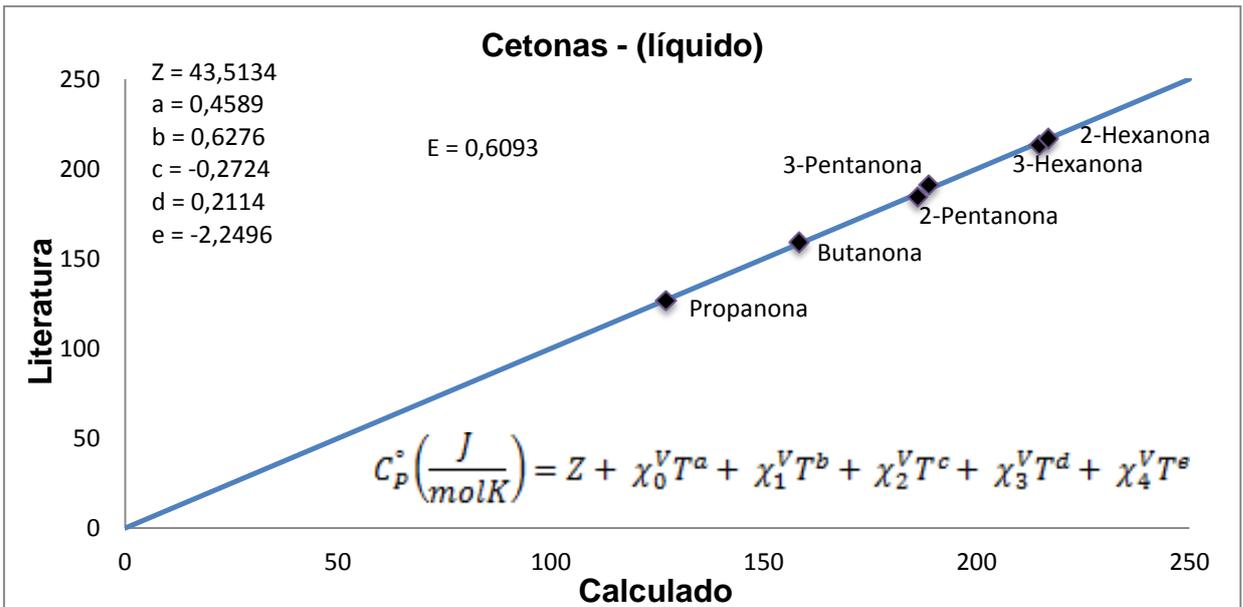


Figura A.14 - Modelo 6 para capacidade calorífica de cetonas líquidas, utilizando  $\chi$ 's de valência de ordem zero a ordem quatro e temperatura, a 298,15 K.

## CALOR DE VAPORIZAÇÃO

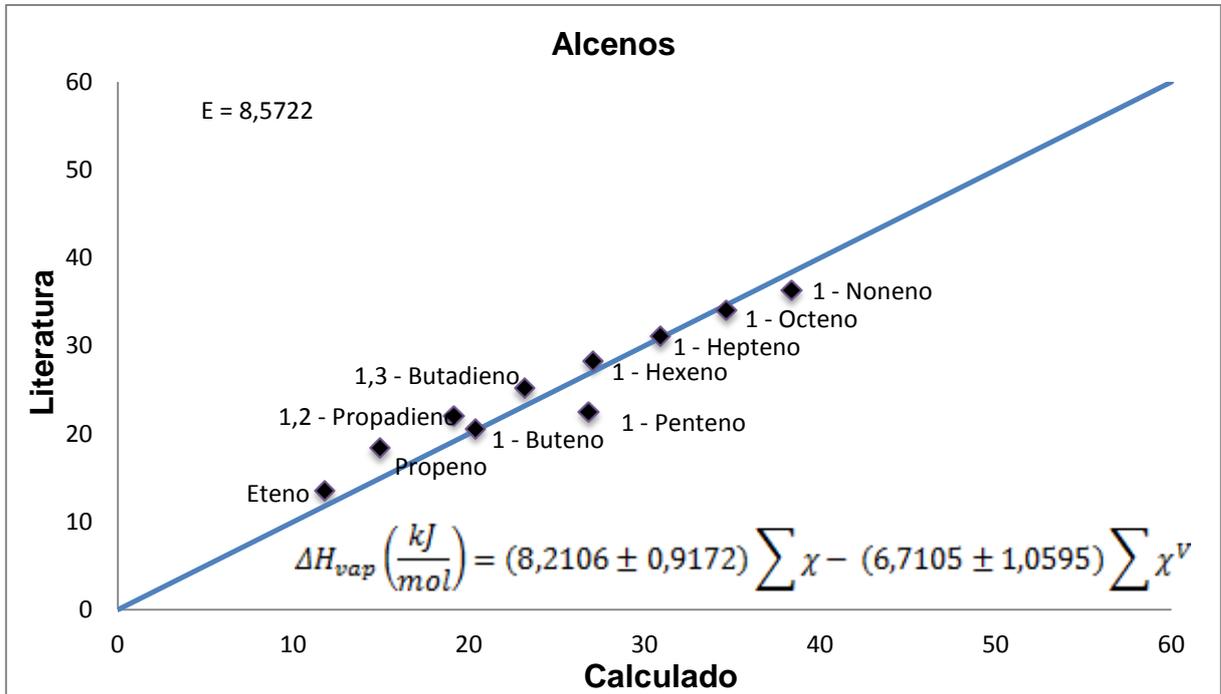


Figura A.15 - Modelo 4 para calor de vaporização de alcenos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de Valência de todas as ordens, a 298,15 K.

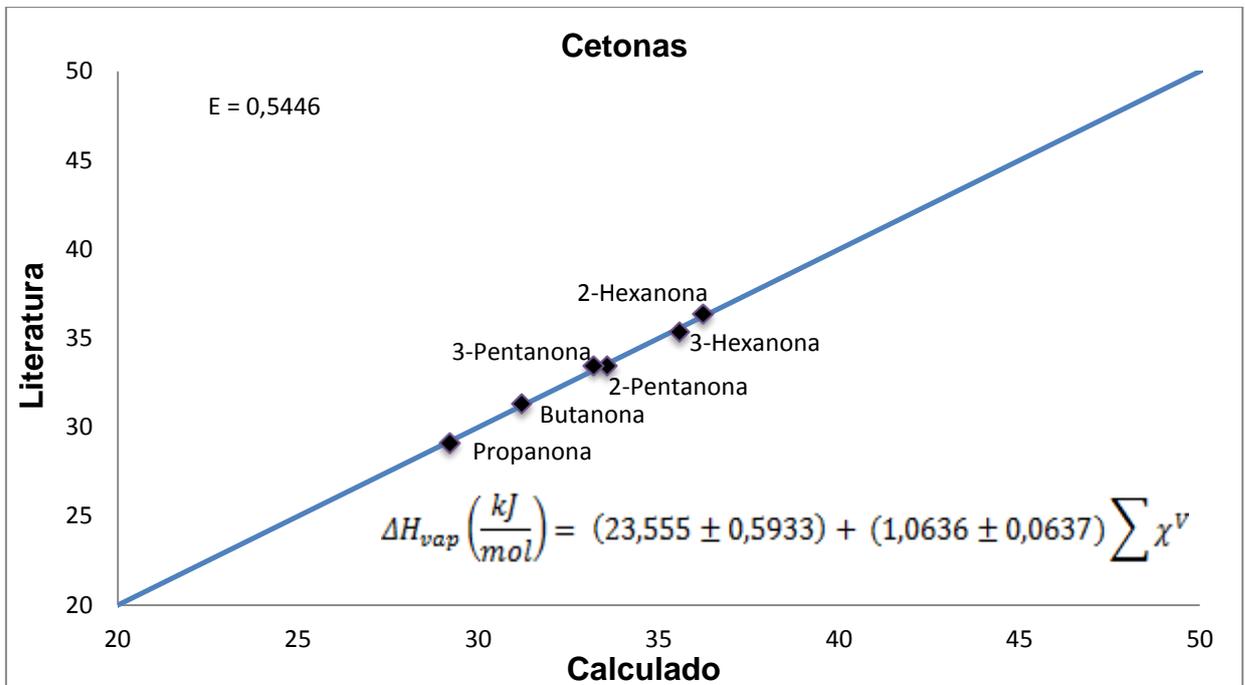


Figura A.16 - Modelo 4 para calor de vaporização de cetonas gasosas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de Valência de todas as ordens, a 298,15 K.

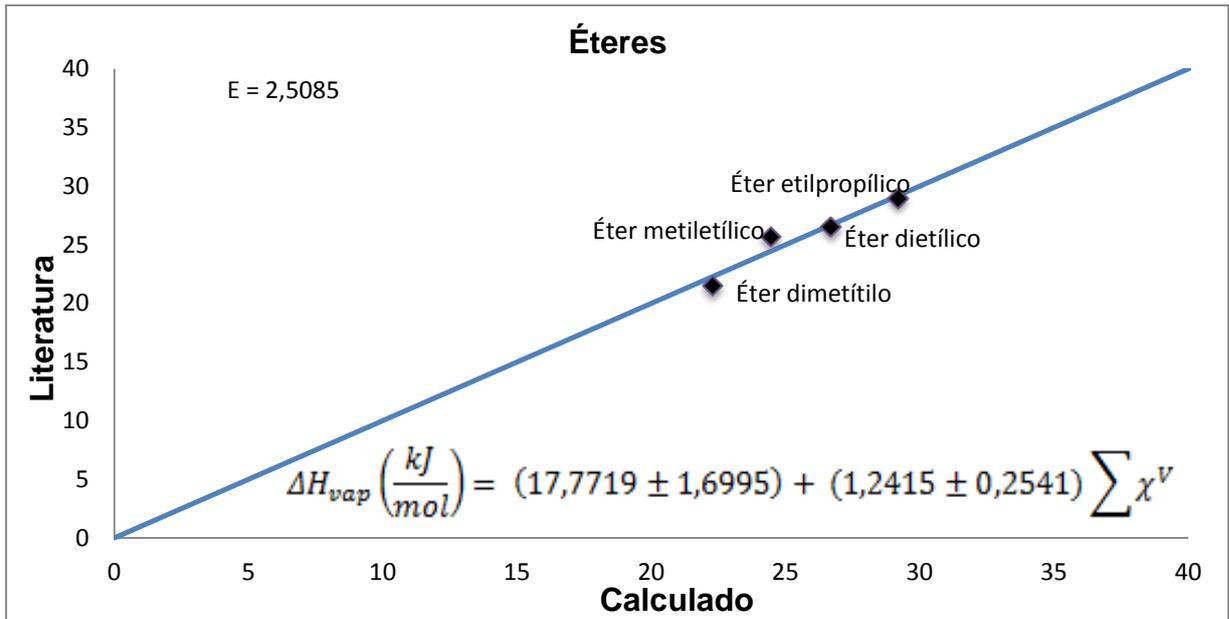


Figura A.17 - Modelo 4 para calor de vaporização de éteres gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de Valência de todas as ordens, a 298,15 K.

### ENERGIA DE GIBBS DE FORMAÇÃO

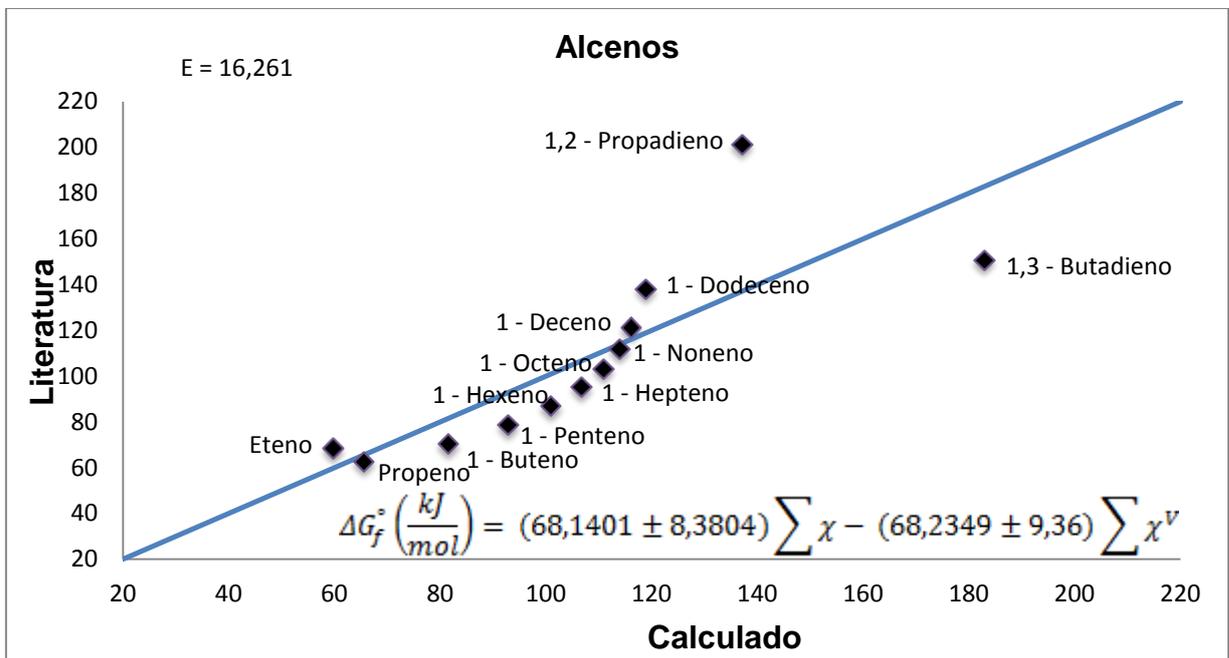


Figura A.18 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de alcenos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

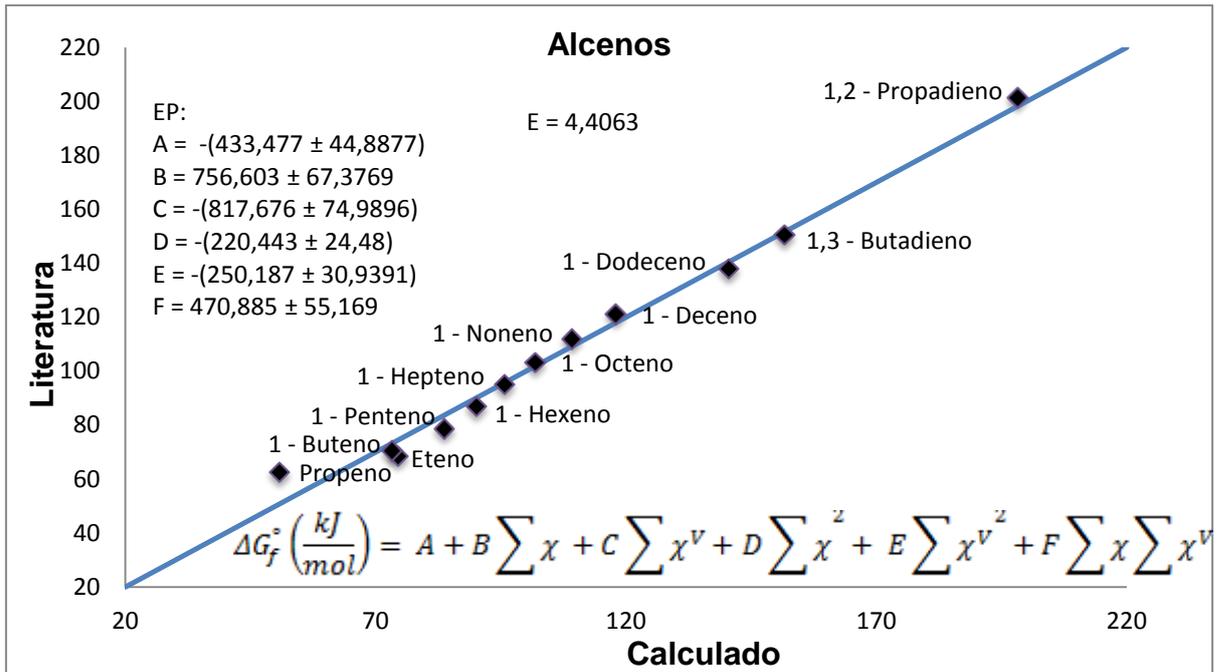


Figura A.19 - Modelo 5 para energia de Gibbs de formação de alcenos gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

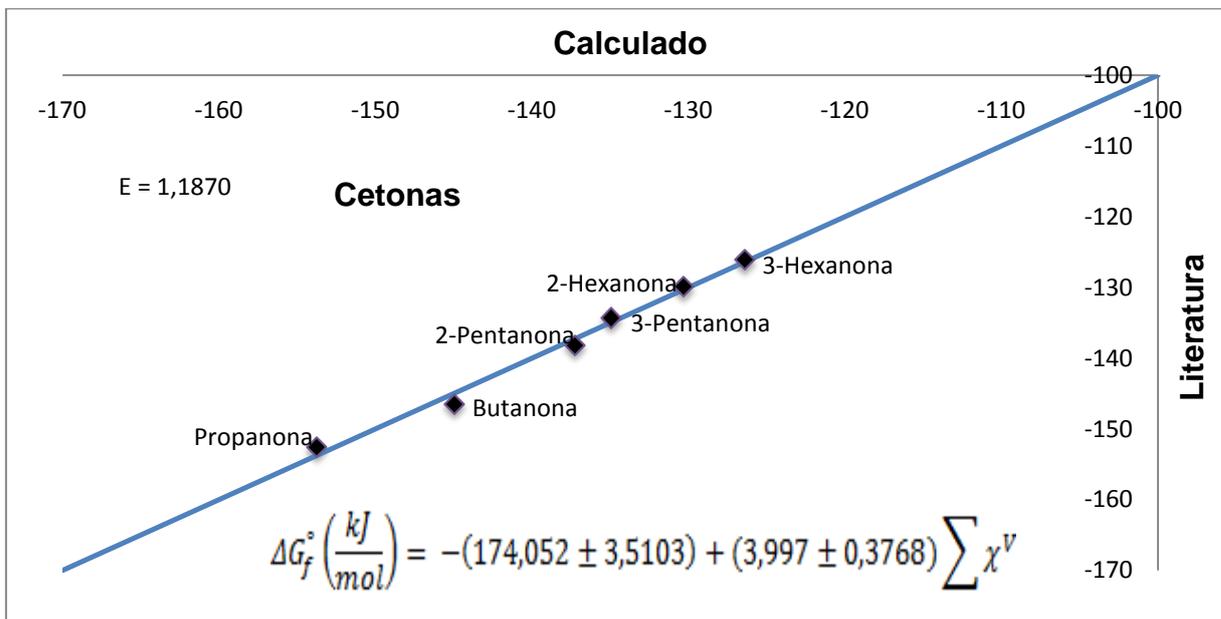


Figura A.20 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de cetonas gasosas, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

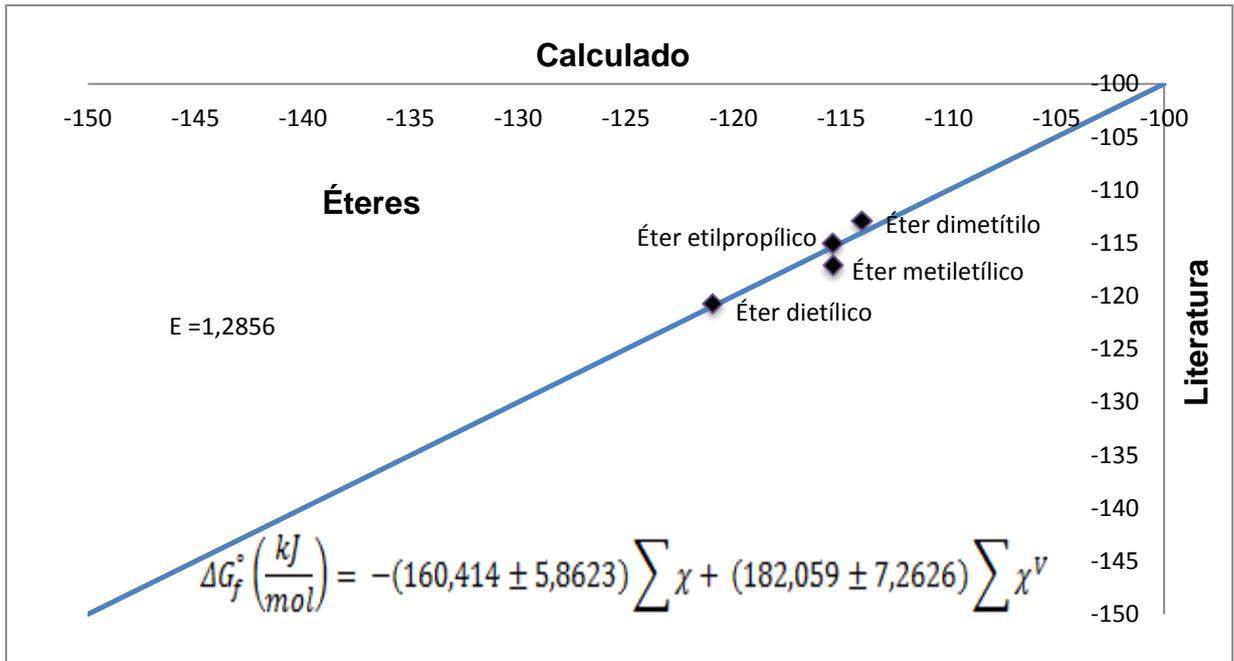


Figura A.21 - Modelo 4 para energia de Gibbs de formação de éteres gasosos, utilizando a soma dos  $\chi$ 's e  $\chi^v$ 's de valência de todas as ordens, a 298,15 K.

**APÊNDICE B**  
**ÍNDICES DE CONECTIVIDADE DOS COMPOSTOS UTILIZADOS**  
**NESTE TRABALHO.**

Tabela B.1 - Índices de conectividade de alcanos lineares

ALCANOS LINEARES												
Composto	Etano	Propano	Butano	Pentano	Hexano	Heptano	Octano	Nonano	Decano	Undecano	Dodecano	Tridecano
$\chi_0$	2	2,7071	3,4142	4,1213	4,8284	5,5355	6,2426	6,9497	7,6569	8,364	9,0711	9,7782
$\chi_1$	1	1,4142	1,9142	2,4142	2,9142	3,4142	3,9142	4,4142	4,9142	5,4142	5,9142	6,4142
$\chi_2$		0,7071	1	1,3536	1,7071	2,0607	2,4142	2,7678	3,1213	3,4749	3,8284	4,182
$\chi_3$			0,5	0,7071	0,9571	1,2071	1,4571	1,7071	1,9571	2,2071	2,4571	2,7071
$\chi_4$				0,3536	0,5	0,6768	0,8536	1,0303	1,2071	1,3839	1,5607	1,7374
$\chi_5$					0,25	0,3536	0,4786	0,6036	0,7286	0,8536	0,9786	1,1036
$\chi_6$						0,1768	0,25	0,3384	0,4268	0,5152	0,6036	0,6919
$\chi_7$							0,125	0,1768	0,2393	0,3018	0,3643	0,4268
$\chi_8$								0,0884	0,125	0,1692	0,2134	0,2576
$\chi_9$									0,0625	0,0884	0,1196	0,1509
$\chi_{10}$										0,0442	0,0625	0,0846
$\chi_{11}$											0,0313	0,0442
$\chi_{12}$												0,0221

Composto	Tetradecano	Pentadecano	Hexadecano	Heptadecano	Octadecano	Nonadecano	Eicosano
$\chi_0$	10,4853	11,1924	11,8995	12,6066	13,3137	14,0208	14,7279

$\chi_1$	6,9142	7,4142	7,9142	8,4142	8,9142	9,4142	9,9142
$\chi_2$	4,5355	4,8891	5,2426	5,5962	5,9497	6,3033	6,6569
$\chi_3$	2,9571	3,2071	3,4571	3,7071	3,9571	4,2071	4,4571
$\chi_4$	1,9142	2,091	2,2678	2,4445	2,6213	2,7981	2,9749
$\chi_5$	1,2286	1,3536	1,4786	1,6036	1,7286	1,8536	1,9786
$\chi_6$	0,7803	0,8687	0,9571	1,0455	1,1339	1,2223	1,3107
$\chi_7$	0,4893	0,5518	0,6143	0,6768	0,7393	0,8018	0,8643
$\chi_8$	0,3018	0,346	0,3902	0,4344	0,4786	0,5227	0,5669
$\chi_9$	0,1821	0,2134	0,2446	0,2759	0,3071	0,3384	0,3696
$\chi_{10}$	0,1067	0,1288	0,1509	0,173	0,1951	0,2172	0,2393
$\chi_{11}$	0,0598	0,0754	0,0911	0,1067	0,1223	0,1379	0,1536
$\chi_{12}$	0,0313	0,0423	0,0533	0,0644	0,0754	0,0865	0,0975
$\chi_{13}$	0,0156	0,0221	0,0299	0,0377	0,0455	0,0533	0,0612
$\chi_{14}$		0,011	0,0156	0,0211	0,0267	0,0322	0,0377
$\chi_{15}$			0,0078	0,011	0,015	0,0189	0,0228
$\chi_{16}$				0,0055	0,0078	0,0106	0,0133
$\chi_{17}$					0,0039	0,0055	0,0075
$\chi_{18}$						0,0028	0,0039
$\chi_{19}$							0,002

---

Tabela B.2 - Índices de conectividade de alcanos ramificados.

ALCANOS RAMIFICADOS							
Composto	2-Metil-propano	2,2-Dimetilpropano	2-Metilbutano	2,3-Dimetilbutano	2,2-Dimetilbutano	3-Metilpentano	2-Metilpentano
$\chi_0$	3,5774	4,5	4,2845	5,1547	5,2071	4,9916	4,9916
$\chi_1$	1,7321	2	2,2701	2,6427	2,5607	2,8081	2,7701
$\chi_2$	1,7321	3	1,8021	2,488	2,9142	1,9217	2,1825
$\chi_3$	0,5774	2	1,2247	2	2,6213	1,6825	1,2743
$\chi_4$		0,5	0,4082	1,3333	1,4142	0,866	0,866
$\chi_5$				0,3333	0,3536	0,2887	0,2887

Composto	2-Metil-hexano	3-Metil-hexano	3-Etil Pentano	2,2-Dimetil-pentano	2,3-Dimetil-pentano	2,4-Dimetil-pentano	3,3-Dimetil-pentano
$\chi_0$	5,6987	5,6987	5,6987	5,9142	5,8618	5,8618	5,9142
$\chi_1$	3,2701	3,3081	3,3461	3,0607	3,1807	3,1259	3,1213
$\chi_2$	2,5361	2,3021	2,0908	3,3107	2,6295	3,0234	2,8713
$\chi_3$	1,5433	1,7671	1,9362	2,5607	2,3511	1,7593	3,1213
$\chi_4$	0,901	1,1897	1,4784	1,8536	1,7475	1,4142	2,2071
$\chi_5$	0,6124	0,6124	0,6124	1	0,9428	0,9428	1
$\chi_6$	0,2041	0,2041	0,2041	0,25	0,2357	0,2357	0,25

Composto	2,2,3-Trimetil-butano	2-Metil-heptano	3-Metil-heptano	4-Metil-heptano	3-Etil-hexano	2,2-Dimetil-hexano	2,3-Dimetil-hexano
$\chi_0$	6,0774	6,4058	6,4058	6,4058	6,4058	6,6213	6,5689
$\chi_1$	2,9434	3,7701	3,8081	3,8081	3,8461	3,5607	3,6807
$\chi_2$	3,5207	2,8896	2,6556	2,6825	2,4712	3,6642	3,01
$\chi_3$	3,3868	1,7933	2,0361	1,8516	2,0557	2,841	2,4511
$\chi_4$	2,8868	1,0913	1,2495	1,5382	1,6578	1,8107	1,9958
$\chi_5$	1,4434	0,6371	0,8413	0,8413	1,0454	1,3107	1,2357
$\chi_6$	0,2887	0,433	0,433	0,433	0,433	0,7071	0,6667
$\chi_7$		0,1443	0,1443	0,1443	0,1443	0,1768	0,1667

Composto	2,4-Dimetil-hexano	2,5-Dimetil-hexano	3,3-Dimetil-hexano	3,4-Dimetil-hexano	2-Metil-3-etil-pentano	3-Metil-3-etil-pentano
$\chi_0$	6,5689	6,5689	6,6213	6,5689	6,5689	6,6213
$\chi_1$	3,6639	3,6259	3,6213	3,7187	3,7187	3,682
$\chi_2$	3,143	3,365	3,2678	2,7711	2,8206	2,8713
$\chi_3$	2,2676	2,1379	3,091	2,7307	2,4916	3,4874
$\chi_4$	1,6624	1,244	2,5607	2,0809	2,3696	2,9571
$\chi_5$	1,2357	1	1,5607	1,4714	1,4714	1,8107
$\chi_6$	0,6667	0,6667	0,7071	0,6667	0,6667	0,7071
$\chi_7$	0,1667	0,1667	0,1768	0,1667	0,1667	0,1768

Tabela B.3 - Índices de conectividade de alcenos

ALCENOS												
Composto	Eteno		Propeno		1,2-Propadieno		1 Buteno		1,3 Butadieno		1 Penteno	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	2	1,4142	2,7071	2,2845	2,7071	1,9142	3,4142	2,9916	3,4142	2,5689	4,1213	3,6987
$\chi_1$	1	0,5	1,4142	0,9856	1,4142	0,7071	1,9142	1,5236	1,9142	1,1498	2,4142	2,0236
$\chi_2$			0,7071	0,4082	0,7071	0,25	1	0,6969	1	0,4714	1,3536	1,0774
$\chi_3$							0,5	0,2887	0,5	0,1667	0,7071	0,4928
$\chi_4$											0,3536	0,2041

Composto	1-Hexeno		1-Hepteno		1-Octeno		1-Noneno		1-Deceno		1-Dodeceno	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	4,8284	4,4058	5,5355	5,1129	6,2426	5,82	6,9497	6,5271	7,6569	7,2342	9,0711	8,6484
$\chi_1$	2,9142	2,5236	3,4142	3,0236	3,9142	3,5236	4,4142	4,0236	4,9142	4,5236	5,9142	5,5236
$\chi_2$	1,7071	1,4309	2,0607	1,7845	2,4142	2,138	2,7678	2,4916	3,1213	2,8451	3,8284	3,5522
$\chi_3$	0,9571	0,7618	1,2071	1,0118	1,4571	1,2618	1,7071	1,5118	1,9571	1,7618	2,4571	2,2618
$\chi_4$	0,5	0,3485	0,6768	0,5387	0,8536	0,7155	1,0303	0,8922	1,2071	1,069	1,5607	1,4226
$\chi_5$	0,25	0,1443	0,3536	0,2464	0,4786	0,3809	0,6036	0,5059	0,7286	0,6309	0,9786	0,8809
$\chi_6$			0,1768	0,1021	0,25	0,1742	0,3384	0,2693	0,4268	0,3577	0,6036	0,5345
$\chi_7$					0,125	0,0722	0,1768	0,1232	0,2393	0,1905	0,3643	0,3155

$\chi_8$	0,0884	0,051	0,125	0,0871	0,2134	0,1789
$\chi_9$			0,0625	0,0361	0,1196	0,0952
$\chi_{10}$					0,0625	0,0436
$\chi_{11}$					0,0313	0,018

Tabela B.4 - Índices de conectividade de alquinos.

ALQUINOS								
Composto	Etino		1-Propino		1-Butino		1-Pentino	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	2	1,1547	2,7071	2,0774	3,4142	2,7845	4,1213	3,4916
$\chi_1$	1	0,3333	1,4142	0,7887	1,9142	1,3493	2,4142	1,8493
$\chi_2$			0,7071	0,2887	1	0,5577	1,3536	0,9541
$\chi_3$					0,5	0,2041	0,7071	0,3943
$\chi_4$							0,3536	0,1443

Tabela B.5 - Índices de conectividade de álcoois.

ÁLCOOIS												
Composto	Etanol		1-Propanol		2-Propanol		2-Propen-1-ol		1-Butanol		2-Butanol	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	2,7071	2,1543	3,4142	2,8614	3,5774	3,0246	3,4142	2,4388	4,1213	3,5685	4,2845	3,7317

$\chi_1$	1,4142	1,0233	1,9142	1,5233	1,7321	1,4129	1,9142	1,1327	2,4142	2,0233	2,2701	1,9509
$\chi_2$	0,7071	0,3162	1	0,7236	1,7321	1,0937	1	0,4712	1,3536	1,0772	1,8021	1,2573
$\chi_3$			0,5	0,2236	0,5774	0,2582	0,5	0,1291	0,7071	0,5117	1,2247	0,7734
$\chi_4$									0,3536	0,1581	0,4082	0,1826

Composto	1-Pentanol		1-Hexanol		3-Hexanol		1-Heptanol		4-Heptanol		1-Octanol	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	4,8284	4,2756	5,5355	4,9827	5,6987	5,1459	6,2426	5,6899	6,4058	5,853	6,9497	6,397
$\chi_1$	2,9142	2,5233	3,4142	3,0233	3,3081	2,9889	3,9142	3,5233	3,8081	3,4889	4,4142	4,0233
$\chi_2$	1,7071	1,4307	2,0607	1,7843	2,3021	1,8507	2,4142	2,1378	2,6825	2,2312	2,7678	2,4914
$\chi_3$	0,9571	0,7617	1,2071	1,0117	1,7671	1,2222	1,4571	1,2617	1,8516	1,3729	1,7071	1,5117
$\chi_4$	0,5	0,3618	0,6768	0,5386	1,1897	0,7577	0,8536	0,7154	1,5382	0,9934	1,0303	0,8921
$\chi_5$	0,25	0,1118	0,3536	0,2558	0,6124	0,3867	0,4786	0,3808	0,8413	0,5358	0,6036	0,5058
$\chi_6$			0,1768	0,0791	0,2041	0,0913	0,25	0,1809	0,433	0,2734	0,3384	0,2693
$\chi_7$							0,125	0,0559	0,1443	0,0645	0,1768	0,1279
$\chi_8$											0,0884	0,0395

Composto	3-Octanol		4-Octanol		1-Nonanol		1-Decanol		1-Undecanol		1-Dodecanol	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	7,1129	6,5601	7,1129	6,5601	7,6569	7,1041	8,364	7,8112	9,0711	8,5183	9,7782	9,2254
$\chi_1$	4,3081	3,9889	4,3081	3,9889	4,9142	4,5233	5,4142	5,0233	5,9142	5,5233	6,4142	6,0233

$\chi_2$	3,0092	2,5579	3,0361	2,5847	3,1213	2,8449	3,4749	3,1985	3,8284	3,552	4,182	3,9056
$\chi_3$	2,2861	1,7412	2,1206	1,6419	1,9571	1,7617	2,2071	2,0117	2,4571	2,2617	2,7071	2,5117
$\chi_4$	1,4397	1,0545	1,598	1,0999	1,2071	1,0689	1,3839	1,2457	1,5607	1,4225	1,7374	1,5992
$\chi_5$	0,8835	0,6111	1,0877	0,7024	0,7286	0,6308	0,8536	0,7558	0,9786	0,8808	1,1036	1,0058
$\chi_6$	0,5949	0,3789	0,5949	0,3789	0,4268	0,3577	0,5152	0,4461	0,6036	0,5345	0,6919	0,6228
$\chi_7$	0,3062	0,1933	0,3062	0,1933	0,2393	0,1904	0,3018	0,2529	0,3643	0,3154	0,4268	0,3779
$\chi_8$	0,1021	0,0456	0,1021	0,0456	0,125	0,0905	0,1692	0,1346	0,2134	0,1788	0,2576	0,223
$\chi_9$					0,0625	0,028	0,0884	0,064	0,1196	0,0952	0,1509	0,1265
$\chi_{10}$							0,0442	0,0198	0,0625	0,0452	0,0846	0,0673
$\chi_{11}$									0,0313	0,014	0,0442	0,032
$\chi_{12}$											0,0221	0,0099

Composto	1-Tetradecanol		1-Pentadecanol		1-Hexadecanol		1-Heptadecanol		1-Octadecanol		1-Nonadecanol	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	10,4853	9,9325	11,1924	10,6396	11,8995	11,3467	12,6066	12,0538	13,3137	12,7609	14,0208	13,468
$\chi_1$	6,9142	6,5233	7,4142	7,0233	7,9142	7,5233	8,4142	8,0233	8,9142	8,5233	9,4142	9,0233
$\chi_2$	4,5355	4,2591	4,8891	4,6127	5,2426	4,9662	5,5962	5,3198	5,9497	5,6734	6,3033	6,0269
$\chi_3$	2,9571	2,7617	3,2071	3,0117	3,4571	3,2617	3,7071	3,5117	3,9571	3,7617	4,2071	4,0117
$\chi_4$	1,9142	1,776	2,091	1,9528	2,2678	2,1296	2,4445	2,3063	2,6213	2,4831	2,7981	2,6599
$\chi_5$	1,2286	1,1308	1,3536	1,2558	1,4786	1,3808	1,6036	1,5058	1,7286	1,6308	1,8536	1,7558
$\chi_6$	0,7803	0,7112	0,8687	0,7996	0,9571	0,888	1,0455	0,9764	1,1339	1,0648	1,2223	1,1532
$\chi_7$	0,4893	0,4404	0,5518	0,5029	0,6143	0,5654	0,6768	0,6279	0,7393	0,6904	0,8018	0,7529

$\chi_8$	0,3018	0,2672	0,346	0,3114	0,3902	0,3556	0,4344	0,3998	0,4786	0,444	0,5227	0,4882
$\chi_9$	0,1821	0,1577	0,2134	0,189	0,2446	0,2202	0,2759	0,2515	0,3071	0,2827	0,3384	0,314
$\chi_{10}$	0,1067	0,0894	0,1288	0,1115	0,1509	0,1336	0,173	0,1557	0,1951	0,1778	0,2172	0,1999
$\chi_{11}$	0,0598	0,0476	0,0754	0,0632	0,0911	0,0789	0,1067	0,0945	0,1223	0,1101	0,1379	0,1257
$\chi_{12}$	0,0313	0,0226	0,0423	0,0337	0,0533	0,0447	0,0644	0,0558	0,0754	0,0668	0,0865	0,0779
$\chi_{13}$	0,0156	0,007	0,0221	0,016	0,0299	0,0238	0,0377	0,0316	0,0455	0,0394	0,0533	0,0472
$\chi_{14}$			0,011	0,0049	0,0156	0,0113	0,0211	0,0168	0,0267	0,0224	0,0322	0,028
$\chi_{15}$					0,0078	0,0035	0,011	0,008	0,015	0,0119	0,0189	0,016
$\chi_{16}$							0,0055	0,0025	0,0078	0,0057	0,0106	0,008
$\chi_{17}$									0,0039	0,0017	0,0055	0,004
$\chi_{18}$											0,0028	0,001

Tabela B.6 - Índices de conectividade de cetonas.

Composto	CETONAS											
	Propanona		Butanona		2-Pentanona		3-Pentanona		2-Hexanona		3-Hexanona	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	3,5774	2,9082	4,2845	3,6154	4,9916	4,3225	4,9916	4,3225	5,6987	5,0296	5,6987	5,0296
$\chi_1$	1,7321	1,2041	2,2701	1,7648	2,7701	2,2648	2,8081	2,3254	3,2701	2,7648	3,3081	2,8254
$\chi_2$	1,7321	0,9082	1,8021	1,0556	2,1825	1,452	1,9217	1,2458	2,5361	1,8056	2,3021	1,6422
$\chi_3$	0,5774	0,2041	1,2247	0,6422	1,2743	0,7464	1,6825	0,8907	1,5433	1,0267	1,7671	1,0252
$\chi_4$			0,4082	0,1443	0,866	0,4541	0,866	0,4541	0,901	0,5278	1,1897	0,6298
$\chi_5$					0,2887	0,1021	0,2887	0,1021	0,6124	0,3211	0,6124	0,3211

$\chi_6$ 

0,2041 0,0722 0,2041 0,0722

Composto	2-Heptanona		2-Octanona		2-Nonanona		2-Decanona		2-Undecanona		2-Dodecanona	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	3,7701	4,9647	4,2701	3,7648	4,7701	4,2648	5,2701	4,7648	5,7701	5,2648	6,2701	5,7648
$\chi_1$	2,8896	2,9692	3,2432	2,5127	3,5967	2,8662	3,9503	3,2198	4,3038	3,5733	4,6574	3,9269
$\chi_2$	1,7933	1,8487	2,0433	1,5267	2,2933	1,7767	2,5433	2,0267	2,7933	2,2767	3,0433	2,5267
$\chi_3$	1,0913	1,1894	1,268	0,9028	1,4448	1,0796	1,6216	1,2563	1,7984	1,4331	1,9751	1,6099
$\chi_4$	0,6371	0,716	0,7716	0,5134	0,8966	0,6384	1,0216	0,7634	1,1466	0,8884	1,2716	1,0134
$\chi_5$	0,433	0,4179	0,4505	0,2639	0,5456	0,363	0,634	0,4514	0,7224	0,5398	0,8108	0,6282
$\chi_6$	0,1443	0,2254	0,3062	0,1606	0,3186	0,1866	0,3858	0,2567	0,4483	0,3192	0,5108	0,3817
$\chi_7$			0,1021	0,0361	0,2165	0,1135	0,2253	0,1319	0,2728	0,1815	0,317	0,2257
$\chi_8$					0,0722	0,0255	0,1531	0,0803	0,1593	0,0933	0,1929	0,1283
$\chi_9$							0,051	0,018	0,1083	0,0568	0,1126	0,066
$\chi_{10}$									0,0361	0,0128	0,0765	0,0401
$\chi_{11}$											0,0255	0,009

Composto	2-Tridecanona		2-Tetradecanona		2-Pentadecanona		2-Hexadecanona		2-Heptadecanona		2-Octadecanona	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	10,6484	9,9793	11,3555	10,6864	12,0626	11,3935	12,7697	12,1006	13,4768	12,8077	14,184	13,5149
$\chi_1$	6,7701	6,2648	7,2701	6,7648	7,7701	7,2648	8,2701	7,7648	8,7701	8,2648	9,2701	8,7648

$\chi_2$	5,0109	4,2804	5,3645	4,634	5,7181	4,9875	6,0716	5,3411	6,4252	5,6947	6,7787	6,0482
$\chi_3$	3,2933	2,7767	3,5433	3,0267	3,7933	3,2767	4,0433	3,5267	4,2933	3,7767	4,5433	4,0267
$\chi_4$	2,1519	1,7867	2,3287	1,9634	2,5055	2,1402	2,6823	2,317	2,859	2,4938	3,0358	2,6706
$\chi_5$	1,3966	1,1384	1,5216	1,2634	1,6466	1,3884	1,7716	1,5134	1,8966	1,6384	2,0216	1,7634
$\chi_6$	0,8992	0,7166	0,9876	0,8049	1,076	0,8933	1,1643	0,9817	1,2527	1,0701	1,3411	1,1585
$\chi_7$	0,5733	0,4442	0,6358	0,5067	0,6983	0,5692	0,7608	0,6317	0,8233	0,6942	0,8858	0,7567
$\chi_8$	0,3612	0,2699	0,4054	0,3141	0,4496	0,3583	0,4938	0,4025	0,538	0,4467	0,5822	0,4909
$\chi_9$	0,2242	0,1596	0,2554	0,1908	0,2867	0,2221	0,3179	0,2533	0,3492	0,2846	0,3804	0,3158
$\chi_{10}$	0,1364	0,0908	0,1585	0,1128	0,1806	0,1349	0,2027	0,157	0,2248	0,1791	0,2469	0,2012
$\chi_{11}$	0,0796	0,0466	0,0965	0,0642	0,1121	0,0798	0,1277	0,0954	0,1433	0,111	0,159	0,1267
$\chi_{12}$	0,0541	0,0284	0,0563	0,033	0,0682	0,0454	0,0793	0,0564	0,0903	0,0675	0,1013	0,0785
$\chi_{13}$	0,018	0,0064	0,0383	0,0201	0,0398	0,0233	0,0482	0,0321	0,056	0,0399	0,0639	0,0477
$\chi_{14}$			0,0128	0,0045	0,0271	0,0142	0,0282	0,0165	0,0341	0,0227	0,0396	0,0282
$\chi_{15}$					0,009	0,0032	0,0191	0,01	0,0199	0,0117	0,0241	0,016
$\chi_{16}$							0,0064	0,0023	0,0135	0,0071	0,0141	0,0082
$\chi_{17}$									0,0045	0,0016	0,0096	0,005
$\chi_{18}$											0,0032	0,0011

Tabela B.7 - Índices de conectividade de éteres.

Composto	ÉTERES							
	Éter dimetílico		Éter metiletílico		Éter dietílico		Éter etilpropílico	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$



$\chi_0$	5,6987	4,7307	5,6987	4,7307	6,4058	5,4378	6,4058	5,4378	6,4058	5,4378	6,4058	5,4378
$\chi_1$	3,3081	2,4647	3,2701	2,404	3,8081	2,8772	3,8081	2,9647	3,8081	2,9647	3,7701	2,904
$\chi_2$	2,3021	1,1586	2,5361	1,34	2,6556	1,6797	2,6825	1,555	2,6556	1,574	2,8896	1,6936
$\chi_3$	1,7671	0,6529	1,5433	0,5928	2,0361	1,0211	1,8516	0,8184	2,0361	0,8148	1,7933	0,8865
$\chi_4$	1,1897	0,3636	0,901	0,3047	1,2495	0,5238	1,5382	0,5206	1,2495	0,4186	1,0913	0,4192
$\chi_5$	0,6124	0,1854	0,6124	0,1854	0,8413	0,2876	0,8413	0,2571	0,8413	0,2571	0,6371	0,2155
$\chi_6$	0,2041	0,0417	0,2041	0,0417	0,433	0,1311	0,433	0,1311	0,433	0,1311	0,433	0,1311
$\chi_7$					0,1443	0,0295	0,1443	0,0295	0,1443	0,0295	0,1443	0,0295

Composto	Metanoato de pentila		Pentanoato de etila		Butanoato de propila		Octanoato de etila		Decanoato de etila		Tridecanoato de etila	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	6,2426	5,2223	7,1129	6,1449	7,1129	6,1449	9,2342	8,2662	10,6484	9,6805	12,7697	11,8018
$\chi_1$	3,9142	2,9672	4,3081	3,4647	4,3081	3,4647	5,8081	4,9647	6,8081	5,9647	8,3081	7,4647
$\chi_2$	2,4142	1,6741	3,0361	1,9086	3,0361	1,9705	4,0967	2,9692	4,8038	3,6763	5,8645	4,737
$\chi_3$	1,4571	0,9338	2,1206	1,0987	2,1206	0,9802	2,8706	1,8487	3,3706	2,3487	4,1206	3,0987
$\chi_4$	0,8536	0,4835	1,598	0,6376	1,598	0,5755	2,1417	1,1894	2,4953	1,5429	3,0256	2,0733
$\chi_5$	0,4786	0,195	1,0877	0,3681	1,0877	0,3376	1,3894	0,716	1,6394	0,966	2,0144	1,341
$\chi_6$	0,25	0,083	0,5949	0,1818	0,5949	0,1818	0,8941	0,4179	1,0709	0,5947	1,336	0,8599
$\chi_7$	0,125	0,0241	0,3062	0,0927	0,3062	0,0927	0,565	0,2254	0,6947	0,358	0,8822	0,5455
$\chi_8$			0,1021	0,0208	0,1021	0,0208	0,3845	0,1302	0,447	0,209	0,5796	0,3415
$\chi_9$							0,2103	0,0643	0,2825	0,1127	0,3786	0,2103
$\chi_{10}$							0,1083	0,0328	0,1923	0,0651	0,2456	0,1266

$\chi_{11}$	0,0361	0,0074	0,1052	0,0321	0,1581	0,0739
$\chi_{12}$			0,0541	0,0164	0,0999	0,0399
$\chi_{13}$			0,018	0,0037	0,068	0,023
$\chi_{14}$					0,0372	0,0114
$\chi_{15}$					0,0191	0,0058
$\chi_{16}$					0,0064	0,0013

Tabela B.9 - Índices de conectividade de ésteres - biodiesel.

ÉSTERES - BIODIESEL										
Composto	Laurato de etila		Palmitato de etila		Linoleato de etila		Oleato de etila		Estearato de etila	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	12,0626	11,0947	14,8911	13,9231	16,3053	14,8183	16,3053	15,0778	16,3053	15,3373
$\chi_1$	7,8081	6,9647	9,8081	8,9647	10,8081	9,2644	10,8081	9,6145	10,8081	9,9647
$\chi_2$	5,5109	4,3834	6,9252	5,7977	7,6323	5,7858	7,6323	6,1393	7,6323	6,5048
$\chi_3$	3,8706	2,8487	4,8706	3,8487	5,3706	3,6958	5,3706	4,007	5,3706	4,3487
$\chi_4$	2,8488	1,8965	3,556	2,6036	3,9095	2,3973	3,9095	2,6566	3,9095	2,9571
$\chi_5$	1,8894	1,216	2,3894	1,716	2,6394	1,4912	2,6394	1,7118	2,6394	1,966
$\chi_6$	1,2476	0,7715	1,6012	1,125	1,778	0,9277	1,778	1,0926	1,778	1,3018
$\chi_7$	0,8197	0,483	1,0697	0,733	1,1947	0,5796	1,1947	0,6892	1,1947	0,858
$\chi_8$	0,5354	0,2973	0,7122	0,4741	0,8006	0,3559	0,8006	0,4275	0,8006	0,5625
$\chi_9$	0,3474	0,179	0,4724	0,304	0,5349	0,2184	0,5349	0,2668	0,5349	0,3665

$\chi_{10}$	0,2235	0,1045	0,3119	0,1929	0,3561	0,1344	0,3561	0,1686	0,3561	0,2371
$\chi_{11}$	0,1412	0,0564	0,2049	0,1208	0,2362	0,0814	0,2362	0,105	0,2362	0,152
$\chi_{12}$	0,0961	0,0325	0,1339	0,0743	0,156	0,0487	0,156	0,0648	0,156	0,0964
$\chi_{13}$	0,0526	0,0161	0,0868	0,0448	0,1025	0,0293	0,1025	0,0403	0,1025	0,0604
$\chi_{14}$	0,0271	0,0082	0,0559	0,0261	0,0669	0,0174	0,0669	0,0248	0,0669	0,0372
$\chi_{15}$	0,009	0,0018	0,0353	0,0141	0,0434	0,0101	0,0434	0,0149	0,0434	0,0224
$\chi_{16}$			0,024	0,0081	0,0279	0,0058	0,0279	0,0087	0,0279	0,0131
$\chi_{17}$			0,0131	0,004	0,0177	0,0031	0,0177	0,0047	0,0177	0,007
$\chi_{18}$			0,0068	0,002	0,012	0,0018	0,012	0,0027	0,012	0,0041
$\chi_{19}$			0,0023	0,0005	0,0066	0,0009	0,0066	0,0013	0,0066	0,002
$\chi_{20}$					0,0034	0,0005	0,0034	0,0007	0,0034	0,001
$\chi_{21}$					0,0011	0,0001	0,0011	0,0002	0,0011	0,0002

Tabela B.10 - Índices de conectividade de ácidos carboxílicos.

Composto	ÁCIDOS CARBOXÍLICOS											
	Ácido metanóico		Ácido etanóico		Ácido propanóico		Ácido butanóico		Ácido pentanóico		Ácido octanóico	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	2,7071	1,4328	3,5774	2,3555	4,2845	3,0626	4,9916	3,7697	5,6987	4,4768	7,82	6,5981
$\chi_1$	1,4142	0,4939	1,7321	0,9277	2,2701	1,4884	2,7701	1,9884	3,2701	2,4884	4,7701	3,9884
$\chi_2$	0,7071	0,1054	1,7321	0,519	1,8021	0,7473	2,1825	1,1437	2,5361	1,4973	3,5967	2,558
$\chi_3$			0,5774	0,0913	1,2247	0,367	1,2743	0,5284	1,5433	0,8087	2,2933	1,5587

$\chi_4$				0,4082	0,0645	0,866	0,2595	0,901	0,3736	1,4448	0,9254
$\chi_5$						0,2887	0,0456	0,6124	0,1835	0,8966	0,5294
$\chi_6$								0,2041	0,0323	0,5456	0,2859
$\chi_7$										0,3186	0,1321
$\chi_8$										0,2165	0,0649
$\chi_9$										0,0722	0,0114

Composto	Ácido nonanóico		Ácido decanóico		Ácido undecanóico		Ácido tridecanóico		Ácido tetradecanóico		Ácido pentadecóico	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	8,5271	7,3052	9,2342	8,0123	9,9413	8,7194	11,3555	10,1336	12,0626	10,8407	12,0626	10,8407
$\chi_1$	5,2701	4,4884	5,7701	4,9884	6,2701	5,4884	7,2701	6,4884	7,7701	6,9884	7,7701	6,9884
$\chi_2$	3,9503	2,9115	4,3038	3,2651	4,6574	3,6186	5,3645	4,3257	5,7181	4,6793	5,7181	4,6793
$\chi_3$	2,5433	1,8087	2,7933	2,0587	3,0433	2,3087	3,5433	2,8087	3,7933	3,0587	3,7933	3,0587
$\chi_4$	1,6216	1,1022	1,7984	1,279	1,9751	1,4558	2,3287	1,8093	2,5055	1,9861	2,5055	1,9861
$\chi_5$	1,0216	0,6544	1,1466	0,7794	1,2716	0,9044	1,5216	1,1544	1,6466	1,2794	1,6466	1,2794
$\chi_6$	0,634	0,3743	0,7224	0,4627	0,8108	0,5511	0,9876	0,7279	1,076	0,8163	1,076	0,8163
$\chi_7$	0,3858	0,2022	0,4483	0,2647	0,5108	0,3272	0,6358	0,4522	0,6983	0,5147	0,6983	0,5147
$\chi_8$	0,2253	0,0934	0,2728	0,143	0,317	0,1872	0,4054	0,2755	0,4496	0,3197	0,4496	0,3197
$\chi_9$	0,1531	0,0459	0,1593	0,0661	0,1929	0,1011	0,2554	0,1636	0,2867	0,1948	0,2867	0,1948
$\chi_{10}$	0,051	0,0081	0,1083	0,0324	0,1126	0,0467	0,1585	0,0936	0,1806	0,1157	0,1806	0,1157
$\chi_{11}$			0,0361	0,0057	0,0765	0,0229	0,0965	0,0505	0,1121	0,0662	0,1121	0,0662
$\chi_{12}$					0,0255	0,004	0,0563	0,0234	0,0682	0,0357	0,0682	0,0357

$\chi_{13}$	0,0383	0,0115	0,0398	0,0165	0,0398	0,0165
$\chi_{14}$	0,0128	0,002	0,0271	0,0081	0,0271	0,0081
$\chi_{15}$			0,009	0,0014	0,009	0,0014

Tabela B.11 - Índices de conectividade de ácidos carboxílicos - biodiesel.

Composto	ÁCIDOS CARBOXÍLICOS - BIODIESEL									
	Ácido láurico		Ácido palmítico		Ácido linoleico		Ácido oleico		Ácido esteárico	
	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$	$\chi$	$\chi^v$
$\chi_0$	10,6484	9,4265	13,4768	12,255	14,8911	13,1501	14,8911	13,4097	14,8911	13,6692
$\chi_1$	6,7701	5,9884	8,7701	7,9884	9,7701	8,2881	9,7701	8,6382	9,7701	8,9884
$\chi_2$	5,0109	3,9722	6,4252	5,3864	7,1323	5,3745	7,1323	5,728	7,1323	6,0935
$\chi_3$	3,2933	2,5587	4,2933	3,5587	4,7933	3,4058	4,7933	3,717	4,7933	4,0587
$\chi_4$	2,1519	1,6325	2,859	2,3396	3,2126	2,1333	3,2126	2,3926	3,2126	2,6932
$\chi_5$	1,3966	1,0294	1,8966	1,5294	2,1466	1,3045	2,1466	1,5252	2,1466	1,7794
$\chi_6$	0,8992	0,6395	1,2527	0,993	1,4295	0,7957	1,4295	0,9606	1,4295	1,1698
$\chi_7$	0,5733	0,3897	0,8233	0,6397	0,9483	0,4862	0,9483	0,5959	0,9483	0,7647
$\chi_8$	0,3612	0,2314	0,538	0,4081	0,6264	0,2899	0,6264	0,3615	0,6264	0,4965
$\chi_9$	0,2242	0,1323	0,3492	0,2573	0,4117	0,1716	0,4117	0,2199	0,4117	0,3198
$\chi_{10}$	0,1364	0,0715	0,2248	0,1599	0,269	0,1027	0,269	0,1369	0,269	0,2041
$\chi_{11}$	0,0796	0,033	0,1433	0,0974	0,1746	0,0622	0,1746	0,0858	0,1746	0,1287
$\chi_{12}$	0,0541	0,0162	0,0903	0,0578	0,1124	0,0371	0,1124	0,0533	0,1124	0,0799
$\chi_{13}$	0,018	0,0029	0,056	0,0331	0,0717	0,0219	0,0717	0,0325	0,0717	0,0487

$\chi_{14}$	0,0341	0,0179	0,0452	0,0129	0,0452	0,0193	0,0452	0,0289
$\chi_{15}$	0,0199	0,0083	0,028	0,0074	0,028	0,011	0,028	0,0165
$\chi_{16}$	0,0135	0,0041	0,0171	0,004	0,0171	0,006	0,0171	0,0089
$\chi_{17}$	0,0045	0,0007	0,01	0,0018	0,01	0,0028	0,01	0,0041
$\chi_{18}$			0,0068	0,0009	0,0068	0,0014	0,0068	0,002
$\chi_{19}$			0,0023	0,0002	0,0023	0,0002	0,0023	0,0004

---