

## AZINAS NITRO-SUBSTITUÍDAS COMO ADITIVOS ANTIOXIDANTES PARA BIODIESEL: DA ESTRUTURA CRISTALINA AO DESEMPENHO FUNCIONAL

**Autor:** Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

A palestra tem por objetivo apresentar os principais resultados do artigo “*Comprehensive structural insights into nitro-substituted azines as potential antioxidant additives for biodiesel*”, publicado em *CrystEngComm* (2026, volume 28, p. 371-389) e selecionado pela Royal Society of Chemistry para a capa interna da edição 2 de 2026.

O estudo investigou duas azinas nitro-substituídas, denominadas AZN1 e AZN2, como potenciais aditivos antioxidantes para biodiesel, motivado pela conhecida suscetibilidade desse biocombustível à degradação oxidativa. A abordagem metodológica combinou difração de raios X em monocristal, análise de superfícies de Hirshfeld, descritores eletrônicos obtidos por DFT, topologia de densidade eletrônica via QTAIM, cálculo de propriedades ópticas não lineares (NLO) e modelos de aprendizado de máquina voltados à previsão de resposta óptica e reatividade ao radical hidroxila. A integração dessas técnicas permitiu estabelecer relações consistentes entre estrutura molecular, empacotamento cristalino, distribuição de densidade eletrônica e potencial funcional dos compostos.

Os resultados evidenciaram que o padrão de substituição pelos grupos nitro e a simetria molecular exercem influência determinante sobre o comportamento das azinas. AZN2 apresentou maior planaridade molecular e empacotamento cristalino com predomínio de contatos O...H, ao passo que AZN1 mostrou maior assimetria eletrônica, momento de dipolo mais elevado e resposta óptica mais pronunciada. No que diz respeito às propriedades NLO de segunda ordem, a estrutura não cêntrica superou a cêntrica por um fator superior a 30, resultado coerente com as exigências de simetria impostas pelo fenômeno. As previsões de absorção e emissão também foram mais favoráveis para o composto com distribuição eletrônica assimétrica. Quanto à reatividade antioxidante, os modelos cinéticos indicaram desempenho ligeiramente

# XXVI

## ENCONTRO CIENTÍFICO

6 a 8 de maio de 2026

**UNIP**  
UNIVERSIDADE PAULISTA

superior para AZN1, a azina com menor número de grupos nitro, com taxas de reação ao radical  $\bullet\text{OH}$  comparáveis às relatadas para o diesel e para os principais ésteres constituintes do biodiesel, e superiores às de alguns aditivos comerciais em determinados cenários de predição.

Em conjunto, os dados demonstram que variações estruturais relativamente pequenas em azinas nitro-substituídas são suficientes para produzir efeitos expressivos sobre o empacotamento cristalino, a reatividade eletrônica, as propriedades ópticas não lineares e o potencial antioxidante. A contribuição central do trabalho está em mostrar que a combinação entre cristalografia, química quântica e aprendizado de máquina constitui uma estratégia viável para orientar o planejamento racional de estabilizantes para biodiesel. Cabe ressaltar, contudo, que os resultados obtidos se baseiam em caracterização estrutural e predições computacionais, de modo que a confirmação do potencial aplicado desses compostos depende de validação experimental em formulações reais de combustível.