

## Oxidação Verde de Acetol Catalisada por FeCl<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

Marcos L. de Araújo<sup>1</sup> (PG), Georgiy B. Shul'pin<sup>2</sup> (PQ), Wagner A. Carvalho<sup>1</sup> (PQ), Dalmo Mandelli<sup>1\*</sup> (PQ)

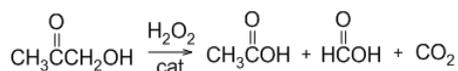
<sup>1</sup>Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Naturais e Humanas, Av. dos Estados, 5001. Bairro Bangu, Santo André – São Paulo – Brasil. <sup>2</sup>Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, ul. Kosygina, dom 4, Moscou 119991, Rússia.

\*dalmo.mandelli@ufabc.edu.br

Palavras Chave: biodiesel, catálise, química verde, peróxido de hidrogênio, FeCl<sub>3</sub>, acetol.

### Introdução

A maior disponibilidade de glicerol, obtido como subproduto do biodiesel, tem levado à procura de novas rotas sintéticas que o utilizem como substrato. Uma alternativa é usar o acetol, obtido da desidratação do glicerol, para a obtenção de outros produtos de interesse. O uso de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> como oxidante, acompanhado de um catalisador, tem se tonado cada vez mais importante na substituição de agentes oxidantes tradicionais por gerar água e O<sub>2</sub> como subprodutos. Assim, neste trabalho estudou-se a oxidação de acetol catalisada por FeCl<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> obtendo-se ácido acético, fórmico e CO<sub>2</sub>, mostrada abaixo.



### Resultados e Discussão

As reações foram feitas em um reator de vidro de 20 mL à 60°C e pressão atmosférica, com os reagentes nas seguintes concentrações: FeCl<sub>3</sub>, 1.10<sup>-3</sup> mol.L<sup>-1</sup>; acetol, 0,5 mol.L<sup>-1</sup>; H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 0,5 mol.L<sup>-1</sup>; nitrometano, 0,5 mol.L<sup>-1</sup> e acetonitrila até completar 5 mL. Para cada alíquota retirada (2 gotas) foram adicionados 1 mL de acetonitrila e trifetilfosfina para decompor o H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> e parar a reação. A análise do ácido acético foi feita por GC-FID. Já a análise do ácido fórmico foi feita por GC-MS, injetando-se as amostras diretamente do meio reacional, sem diluição ou tratamento químico prévio. A análise do CO<sub>2</sub>, por sua vez, também foi feita por GC-MS através da injeção de amostras do *head space* do meio reacional com uma seringa *air tight* e comparando-se os sinais do espectro de massas com os de uma curva de calibração previamente preparada com padrões de CO<sub>2</sub> (usando-se argônio do ar como padrão interno). A cinética do ácido acético e do ácido fórmico mostram que, após 6h de reação, há uma formação de 0,25 mol.L<sup>-1</sup> de ácido acético e de 0,35 mol.L<sup>-1</sup> de ácido fórmico. Já a cinética do CO<sub>2</sub> mostra que, após 4h de reação, há uma formação de 0,03 mol.L<sup>-1</sup> de CO<sub>2</sub>.

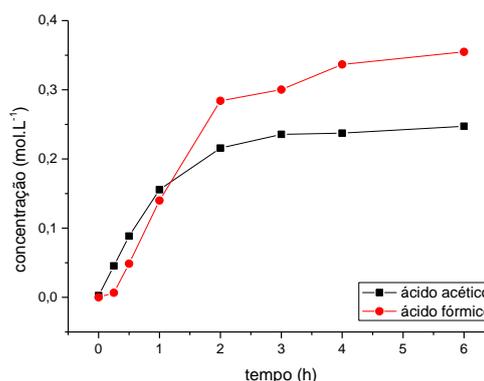


Figura 1. Concentração de ácido acético e ácido fórmico durante as primeiras 6h de reação para a oxidação do acetol catalisada por FeCl<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

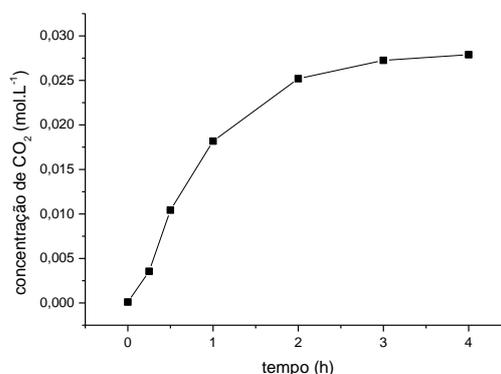


Figura 2. Concentração de CO<sub>2</sub> durante as primeiras 6h de reação para a oxidação do acetol catalisada por FeCl<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

### Conclusões

Acetol pode ser oxidado pelo sistema FeCl<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, com conversões de 60% após 4 h. Ácido fórmico foi o produto majoritário (0,34 mol.L<sup>-1</sup>), seguido de ácido acético (0,25 mol.L<sup>-1</sup>) e de CO<sub>2</sub> em menor quantidade (0,03 mol.L<sup>-1</sup>).

### Agradecimentos

CAPES pela bolsa de mestrado e pela bolsa PVE (A017\_2013), CNPq (472130/2012-9, 303828/2010-2) e UFABC.