

Estudo catalítico e difusional na reação de esterificação do ácido acético catalisada pelo HPW incluso em matriz sílica.

Márcia F. B. Santos (IC)¹, Felipe A. Oliveira (IC)¹, Daniel M. Araújo (PG)^{1*}, Luiz A. M. Cardoso (PQ)¹, Nemésio M. Oliveira-neto (PQ)¹

¹Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia

*danielm.araujo@yahoo.com.br

Palavras Chave: HPW incluso, difusão, química verde

Introdução

No presente trabalho foi feito um estudo do comportamento catalítico do ácido dodecatungstofosfórico (HPW) incluso em sílica na reação de esterificação do ácido acético com 2-butoxietanol, para a formação do acetato 2-butoxiétil. Tendo este uma grande aplicabilidade na indústria química, buscou então sintetizá-lo num sistema heterogêneo, diferindo, segundo a literatura¹, da comum produção em fase homogênea e na redução do custo do catalisador. A preparação do catalisador se dá pelo processo sol-gel utilizando o heteropoliácido do tipo Keggin, o qual apresenta valor de acidez próximo ao dos superácidos. Sendo este um material microporoso, fez-se o estudo do controle difusional de transferência de massa na reação tendo as moléculas do meio diâmetro próximo ao dos poros do catalisador. A reação se processou sem a presença de solvente e com reagentes de baixo custo se comparado com o método tradicional de síntese do éster. Diante disso, a utilização de catalisadores sólidos tem sido uma alternativa importante, ao passo que é evidente o bom desempenho dos mesmos na seletividade do produto, bem como no desenvolvimento de tecnologias limpas, podendo ele ser reutilizado².

Resultados e Discussão

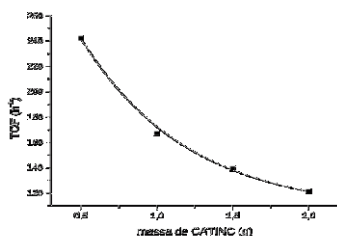


Figura 1. Frequência de turnover em relação à massa de catalisador.

A atividade do catalisador foi determinada pela TOF, que usando 5,35% de catalisador com relação às massas dos reagentes, numa proporção molar de 1:1 apresentou um valor superior a 240 h⁻¹. Analisando o gráfico abaixo, $\ln k = f(1/T)$ determina a temperatura da qual, o processo é controlado pela difusão interna. Na zona da energia de ativação de limitação difusional, a E_a é aproximadamente

metade da E_a referente à zona em que a cinética é puramente química (ausência de limitações difusionais internas)³.

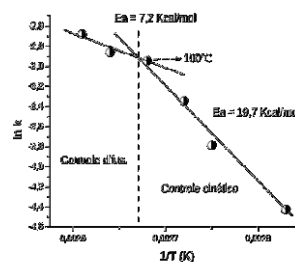


Figura 2. Determinação da energia de ativação para as temperaturas 80, 90, 95, 100, 105 e 110 °C.

Havendo limitações difusionais internas, a conversão aumenta à medida que se diminui o diâmetro das partículas de catalisador (figura 2).

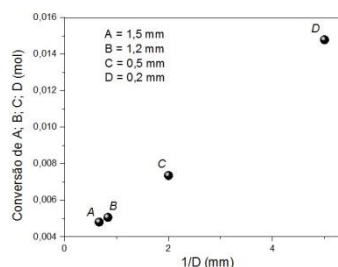


Figura 3. Conversão em quantidade de matéria (mol) do produto vs. inverso do diâmetro do grão de catalisador.

Havendo limitações difusionais internas, a conversão aumenta à medida que se diminui o diâmetro das partículas de catalisador³.

Conclusões

Por fim, foi comprovado o controle difusional interno na reação acima de 100°C e uma boa atividade do catalisador. Proporcionando assim, maior entendimento na utilização de catalisadores microporosos.

Agradecimentos

UESB, CAPES, CNPq, FAPESB

¹ QIAO, Y.; et al. Synthesis of 2-butoxyethyl acetate catalyzed by ionic liquid of 1-methyl-3-butylimidazolium hydrosulfate **Chemical Industry and Engineering Progress**, 1347, 2011.

² NARENDER N. **Journal of Molecular Catalysis A: Chemical**, 73-77, 2002

³ FIGUEIREDO, J.L.; RIBEIRO, F.R.; **Catálise Heterogênea**, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, Portugal, 1987.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)