

Analise Bifuncional dos Catalisadores CoAl_2O_4 e $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$ utilizados na Transesterificação do óleo de coco de babaçu

Hubert A. Alvarez-Alvarez*(DCR-CNPq-Fapepi)¹, Gleison de A. Rodrigues (IC)¹, Carla V. R. Moura(PQ)¹, Edmilson M. Moura(PQ)¹.

* hubert@ufpi.br

Universidade Federal do Piauí –CCN– Departamento de Química – Campus da Ininga
Palavras Chave: Energia renovável, Catalise heterogênea, Biodiesel

Introdução

A atividade e seletividade catalítica num catalisador são parâmetros imprescindíveis de qualquer processo químico. Onde o mecanismo cinético no processo da transesterificação na produção do biodiesel, a partir óleos vegetais, vem sendo amplamente estudado com a finalidade de entender os mecanismos responsáveis na produção da glicerina, produzida durante a transesterificação, visando diminuir as diversas etapas da purificação do biodiesel.

Neste trabalho apresentamos os catalisadores tipo espinélio de cobalto(Co_3O_4 , CoAl_2O_4) e o Aluminato de sódio, ($\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$), que foram identificados como bifuncionais segundo cálculos da eletronegatividade de acordo aos modelos de Sanderson [1,2].

Resultados e Discussão

Estes materiais e o Biodiesel foram caracterizados por Infravermelho, Raios X, Análise Térmica TG-DTG e RMN [H^+] e por análise físico-química do biodiesel (Viscosidade). A síntese do catalisador ácido aluminato de cobalto, CoAl_2O_4 foi obtida pelo método dos citratos e polimerização do etilenoglicol, calcinado a 550 °C durante 5 horas. A preparação do catalisador básico $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$, foi sintetizado pelo método dos nitratos sob as temperaturas de calcinação 500 °C por 4 horas.

Nos termogramas por TG-DTG, de cada um dos catalisadores, observou-se diversos eventos térmicos durante a decomposição dos produtos das sínteses, com a finalidade de obter o aluminato de cobalto(CoAl_2O_4) a 600 °C, e também do aluminato de sódio, ($\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$) a 500 °C.

A partir dos espectros por infravermelho de cada um destes dois catalisadores, identificou-se seus modos vibracionais $\nu(\text{Co}-\text{O})$ entre 500 – 700 cm^{-1} e o $\nu(\text{Al}-\text{O})$ entre 679 – 693 cm^{-1} , para o catalisador CoAl_2O_4 , e também os modos vibracionais da ligação Al-O entre 682,0, 780,0 e 842,0 cm^{-1} , para o catalisador básico aluminato de sódio, $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$, sendo estes dados concordantes com a literatura. Nos difratogramas de raios-X de cada um destes catalisadores CoAl_2O_4 , Co_2O_3 e o $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$, observamos duas estruturas cristalinas diferentes, possivelmente distribuídas em regiões diferenciadas segundo o tamanho dos cristais. A partir da equação Scherrer, determino-se o tamanho médio dos cristais para os espinélio CoAl_2O_4 : 30,0 nm Co_2O_3 25,00 nm o. e para o $\text{Al}_2\text{Na}_2\text{O}_4$ de 40,00 nm,

Neste trabalho identifico-se os catalisadores de propriedades ácidas e básicas tipo Brønsted, a partir de cálculos da eletronegatividade dos átomos segundo o modelo de Sanderson apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Eletronegatividade intermédia (S_{int}) dos catalisadores ácido-base Brønsted e a carga parcial de cada um dos átomos [1,2]

	Básico		Ácido	
	$\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$	CoAl_2O_4	Co_3O_4	
Carga parcial cada ion:				
Co	—	(+ 0,58)	(+0,52)	
Al	(+0,103)	(+ 0,43)	—	
Na	(+1,05)	—	—	
O	(- 0,56)	(- 0,35)	(-0,39)	
Eletronegatividade intermédia (S_{int}):				
	(2,54)	(3,52)	(3,36)	

Os dados da eletronegatividade intermédia (S_{int}) dos catalisadores nos sugerem que o aluminato de cobalto e o aluminato de sódio, comportam-se como catalisadores bifuncionais ácido-base de Brønsted.

O rendimento da obtenção do biodiesel na transesterificação do óleo de coco de babaçu em metanol, foi de 75% e no etanol de 10%, possivelmente estes resultados devem-se, a fatores estéricos da molécula do etanol em relação do metanol,

O rendimento desta transesterificação foi calculado a partir dos sinais residuais no espectro de RMN (H^+), onde a de hidrogênios oximetilênicos característicos de triglicerídeos que ocorrem na região δ 4,10 - 4,35 e δ 5,32 o que se atribui a uma conversão parcial do óleo, no entanto apresenta um singlete na região de δ 3,58-3,65, característico de hidrogênios oximetilênicos, caracterizando o biodiesel obtido com uma viscosidade cinemática a 40 °C 5,5 cSt.

Conclusões

Neste trabalho identificou-se a bifuncionalidade destes catalisadores ácido-base Brønsted. Onde se observou o rendimento da reação depende da quantidade de catalisador que foi utilizada como 2%. Estes resultados preliminares no levaram a melhorar o rendimento da reação da transesterificação do óleo de

coco babaçu, em função da quantidade de catalisador e da temperatura da reação.

Agradecimentos

Ao Conselho Nacional de Pesquisa de Ciência e Tecnologia – CNPq e a FAPEPI, pela bolsa (DCR-CNPq/Fapepi) Hubert Alvarez.
1. R. T. Sanderson., Electronegativity and Bonding of Transitional Elements., Inorganic Chemistry, Vol. 25, No. 19, 1986 3519
2. YONGHE ZHANG., Electronegativities of Elements in Valence States and Their Applications. 2. A Scale for Strengths of Lewis Acids, . Inorg. Chem. 1982, 21. 3889-3893.