

Obtenção de compostos nitrogenados multifuncionais a partir de glicerina.

Clayton M. Rosman¹ (IC), Valter L. C. Gonçalves¹ (PG), Nilton Rosenbach Jr.¹ (PQ); Rodolfo Lorençatto¹ (IC), Alex P. A. dos Santos¹ (PG); Marcelo Franco² (PQ) & Claudio J. A. Mota¹ (PQ)*
cmota@iq.ufri.br

1 - Universidade Federal do Rio de Janeiro - Instituto de Química - Cidade Universitária CT Bloco A, 21949-900, Rio de Janeiro, Brasil, Laboratório de Reatividade de Hidrocarbonetos e Catálise Orgânica (LARHCO).

2 - Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - Departamento de Estudos Básicos e Instrumentais, Praça Primavera, 40, 45700-000, Itapetinga, Bahia, Brasil.

Palavras Chave: biodiesel, glicerina, acetais da glicerina, imidazol, anticorrosivos, lubrificantes.

Introdução

Diante da crescente preocupação associada ao aquecimento global, o biodiesel constitui uma das alternativas mais promissoras em se tratando de combustíveis alternativos. O glicerol é o principal co-produto da produção de biodiesel. Em razão dos marcos regulatório instituídos pelo Governo Federal, tornando obrigatória a adição de biodiesel ao diesel, haverá um excedente de glicerina que supera a demanda atual. Diante da iminência de se tornar um problema ambiental, é necessário encontrar aplicações alternativas para a glicerina.

Os produtos obtidos a partir da acetaliação da glicerina possuem características físico-químicas que lhes confere propriedades lubrificantes. Por outro lado, vários compostos heterocíclicos nitrogenados com grupos polares e/ou elétrons π , como o imidazol, são inibidores eficientes de corrosão. O objetivo deste trabalho é desenvolver compostos multifuncionais com propriedades anticorrosivas e lubrificantes, a partir de derivados nitrogenados da glicerina, e oferecer aplicações alternativas para a glicerina.

As reações foram realizadas em balão de 50 mL e temperatura ambiente, utilizando-se CDI (dicarboimidazol) e os acetais da glicerina na proporção de 2:1. Os reagentes foram diluídos em 20 mL de diclorometano e agitados durante 5h. Os produtos obtidos foram analisados CG-EM. As energias dos orbitais de fronteira dos compostos obtidos na etapa experimental foram determinadas em nível HF/6-31G(d,p) e comparadas com a do imidazol.

Resultados e Discussão

A reação apresentou uma conversão de 100%. Os cromatogramas apresentaram quatro picos identificados por espectrometria de massas (CG-MS) como sendo os produtos da reação entre os acetais da glicerina/capronaldeído ou valeraldeído (4 isômeros) e CDI, evidenciando a funcionalização da hidroxila livre (figura 1).

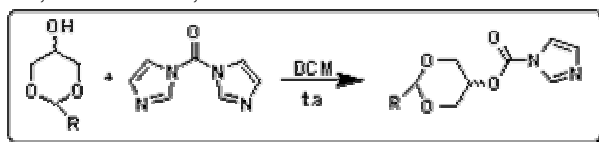


Figura 1. Reação entre os acetais da glicerina e CDI ($R=C_5H_{11}$ para produtos do capronaldeído ou C_4H_9 para produtos do valeraldeído).

A capacidade anticorrosiva de um determinado composto depende da energia dos orbitais de fronteira. Assim, quanto menor a diferença de energias entre os orbitais HOMO e LUMO maior será a capacidade anticorrosiva do composto. Os resultados teóricos mostram que os derivados preparados são anticorrosivos potencialmente superiores ao imidazol (tabela 1).

Tabela 1. Energia dos orbitais de fronteira

Composto	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE (eV)
Imidazol	-0,31	0,19	0,50
Produto da reação com CDI (anel de 5)	-0,52	-0,07	0,45
Produto da reação com CDI (anel de 6)	-0,33	0,12	0,45

Conclusões

Derivados nitrogenados obtidos a partir da reação entre CDI e acetais da glicerina são compostos multifuncionais que apresentam propriedades anticorrosivas e lubrificantes, além de oferecer aplicações alternativas para a glicerina.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, ANP PRH-01

¹ da Silva C. X. A., Gonçalves, V. L. C., e Mota, C. J. A. *Green Chemistry*, **2009**, *11*, 38-41.