

Estudo Teórico do Mecanismo de Transesterificação do Óleo de Soja Catalisado pelo Complexo Sn(II)-Maltolato

Daví A. C. Ferreira* (PG), José A. S. Freitas (IC), Sara F. de A. Moraes (IC), Mario R. Meneghetti (PQ), Simoni M. P. Meneghetti (PQ)

*quantum_foton@hotmail.com

Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Av. Lourival de Melo Mota, Cidade Universitária, Maceió-AL.

Palavras Chave: Estanho(II), Mecanismo de Transesterificação, Química Computacional, Semi-empírico.

Introdução

Recentemente, Suarez e colaboradores^{1,2} sintetizaram e testaram a atividade catalítica de complexos do tipo M(II)-Maltolato (3-hidroxi-2-metil-4-pironato), onde M= Sn, Cd, Zn e Pb, em reações de transesterificação. Verificou-se que o sistema Sn(II)-Maltolato catalisa a metanólise de diferentes óleos. A fim de estudar, em nível teórico, a proposta mecanística de Suarez e colaboradores² para a transesterificação via complexo de Sn(II), Figura 1, desenvolvemos cálculos semi-empíricos usando a base atômica PM3 (Spartan[®]04).

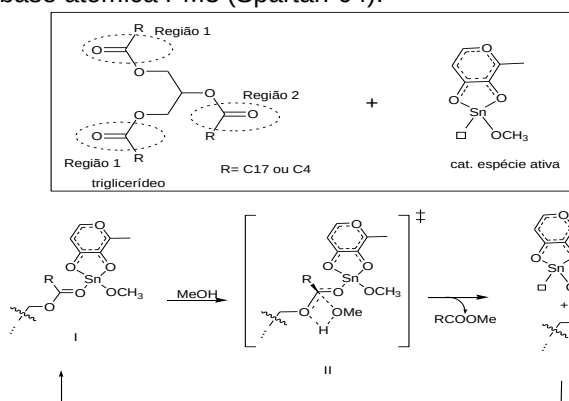


Figura 1. Representação genérica das espécies envolvidas e das etapas de metanólise em um triglicerídeo, via Sn(II)-Maltolato.

Resultados e Discussão

Dois triglicerídeos modelos foram estudados com relação à reação de metanólise em presença de Sn(II)-Maltolato, um contendo ésteres de 5 (C₅) e outro com 18 carbonos (C₁₈). As três sequências de ataques à carboxila foram avaliadas para os dois sistemas (Figuras 2 e 3). Como podemos observar, todas as energias de ativação para as três etapas são maiores para o sistema com maior número de carbonos. Outro fato observado, é que a sequência de transesterificação é praticamente não seletiva, ou seja, se a primeira etapa da transesterificação pode ocorrer no grupamento éster terminal ou central. Neste caso, apenas ter-se-á maior números de diglicerídios cujo grupamento OH se encontra nas extremidades por questões de probabilidade. Por outro lado, quando as cadeias do triglicerídeo são

muitíssimo mais curtas, a sequência de ataque preferencial é 2.1.1.

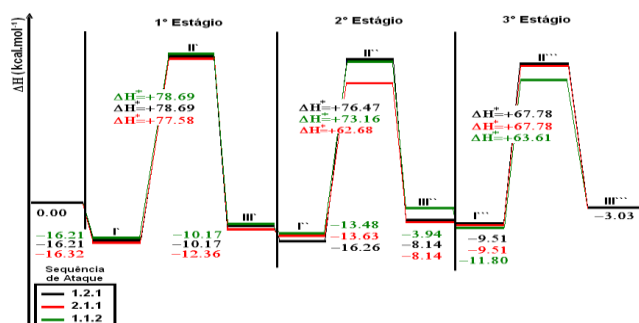


Figura 2. Coordenada de reação para a metanólise do triglicerídeo com ésteres de C₁₈.

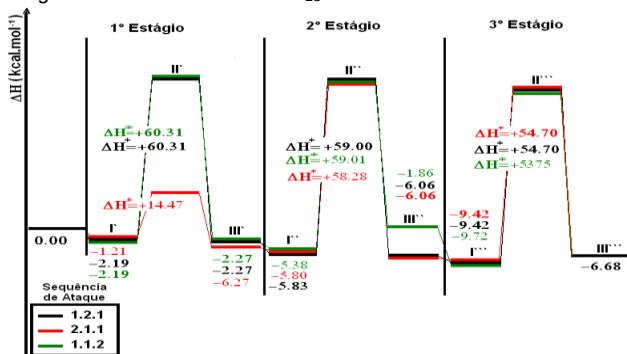


Figura 3. Coordenada de reação para a metanólise do triglicerídeo com ésteres com C₅.

Conclusões

Nossos estudos apontam que, molecularmente, triglicerídeos com cadeias muito longas apresentam energias de ativação maiores os análogos com cadeias mais curtas, o que é de se esperar devido a maior dificuldade de atingir-se as devidas conformações para o estado de transição. Além disso, observa-se uma regiosseletividade inicial de ataque (sequência 2.1.1) para triglicerídeos com cadeias muito curtas.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, BNB e FAPEAL pelo suporte financeiro.

¹F. R. Abreu; et al. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **2003**, 80, 601.

²F. R. Abreu; et al. *J. Mol. Catal. A: Chem.* **2004**, 209, 29.