

Análise Teórica da Aplicação do Complexo Sn(II)-Maltolato em Reações de Esterificação e Transesterificação

Daví A. C. Ferreira* (PG), Sara F. de A. Moraes (PG), Aída D. da F. Melo (PG), Yariadner C. Brito (PG), Simoni M. P. Meneghetti (PQ), Mario R. 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), Transesterificação, Esterificação, Semiempírico.

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. No entanto, diversos estudos foram realizados nos últimos anos objetivando a obtenção de ésteres a partir de ácidos graxos. A fim de estudar a ação do sistema catalítico desenvolvido por Suarez e colaboradores², em reações de transesterificação e esterificação, desenvolvemos cálculos semi-empíricos usando a base atômica PM3 (Spartan[®]04), tendo como ácido modelo o hexanóico.

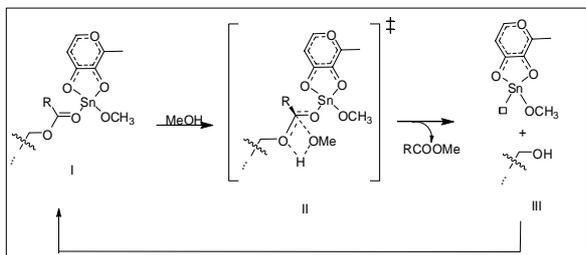


Figura 1. Representação genérica das espécies envolvidas e das etapas de metanólise em um triglicérido modelo (R=n-butil), via Sn(II)-Maltolato.

Resultados e Discussão

Reconhecidamente, o sistema Sn(II)-Maltolato apresenta atividade relativamente alta na reação de transesterificação, no entanto, pouco se conhece acerca de sua atividade sobre sua ação em reação de esterificação. Dessa forma, cálculos semiempíricos foram aplicados para compreender a natureza desse catalisador frente à reação de esterificação. Nesse estudo, tomamos como base o valor médio da energia de ativação teórica referente às três etapas da catálise de transesterificação, segundo o mecanismo descrito por Suarez e colaboradores. O valor determinado por nossos cálculos foi de +37.40 kcal.mol⁻¹, levando em consideração um triéster modelo. Já o ácido orgânico modelo tomado para o estudo foi o ácido pentanóico. Como podemos observar na figura 2, o complexo Sn(II) apresenta uma energia de ativação

incomparavelmente superior quando aplicado à reação de esterificação, o que torna sua aplicação inviável em tal reação. Entretanto, tais valores energéticos devem ser analisados apenas de forma qualitativa, de modo que os mesmos não podem ser encarados de forma absoluta. Cálculos mais refinados estão em andamento, numa tentativa de se obter dados quantitativos acerca das energias de ativação para reações de esterificação e transesterificação envolvendo complexos de Sn(II)-Maltolato.

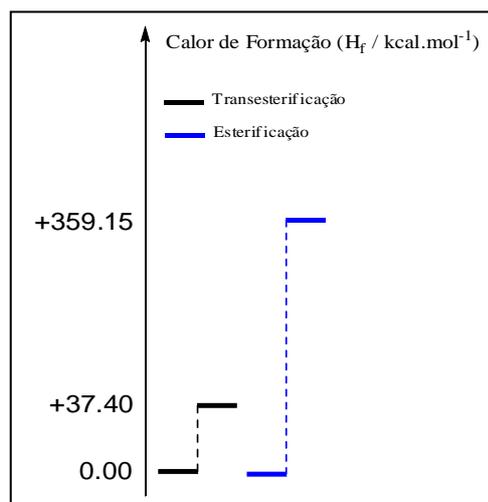


Figura 2. Barreiras energéticas para as reações de esterificação e transesterificação.

Conclusões

Nossos estudos apontam que o complexo Sn(II)-Maltolato é muito mais ativo em reação de transesterificação do que na reação de esterificação de ácidos de cadeia longa.

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.