

## Proposta mecanística para reação de modificação do biodiesel de *Sterculia Striata* com acetato de cobre (II) monohidratado.

Isabela C. de Almeida IQ/UnB (IC)\*, Victor C. A. Sagebin IQ/UnB (IC), Maria B. P. Mangas IQ/UnB (PG), Paulo A. Z. Suarez IQ/UnB (PQ)<sup>1</sup>.

1 – Universidade de Brasília, Instituto de Química, Laboratório de Materiais e Combustíveis, INCT-Catálise, CP 4478, CEP 70919-970, Brasília-DF, Brasil. \* belacastro91@gmailcom

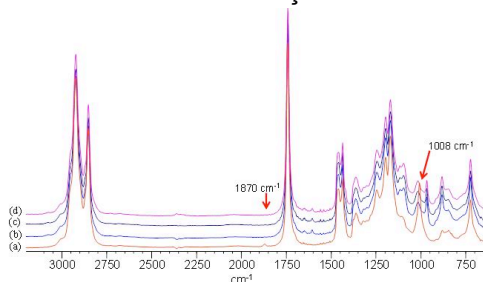
Palavras Chave: Biodiesel, *Sterculia Striata*, acetato de cobre (II) monohidratado.

### Introdução

O óleo de *Sterculia striata* foi utilizado como matéria prima para a obtenção de biodiesel (98%).<sup>1</sup> Tanto o óleo quanto o biodiesel apresentam um anel ciclopropeno que lhe é atribuído atividades carcinogênica e cocarcinogênica.<sup>2,3</sup> Pretende-se, então, realizar reações para eliminar o anel ciclopropeno utilizando como catalisador acetato de cobre (II) monohidratado, variando-se a temperatura (80 °C, 100 °C e 150 °C), e as proporções molares biodiesel/metanol (1:4, 1:6 e 1:8), com tempo reacional de 2 h.

### Resultados e Discussão

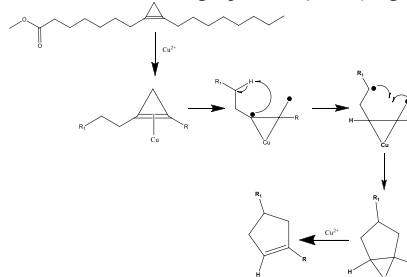
As reações foram realizadas em um reator de aço inox do tipo autoclave. Os processos que ocorreram a 100 °C se mostraram mais favoráveis, visto que o anel ciclopropênico se decompõe em temperaturas superiores a 150 °C.<sup>4</sup> Os espectros de IR-TF (Fig.1) mostram a ruptura do anel e preservação do grupo éster. O aparecimento de bandas relacionadas à deformação fora do plano de grupos –CH=CH- e relacionadas ao estiramento fora do plano do grupo CH<sub>2</sub> (em CH<sub>2</sub>=CRR') indicam a formação de uma nova estrutura. Análises de RMN <sup>1</sup>H confirmaram as observações de IR-FT.



**Figura 1.** IR-FT das reações de modificação a 100 °C: (a) Biodiesel; (b) Reação 1:4; (c) Reação 1:6 e (d) Reação 1:8.

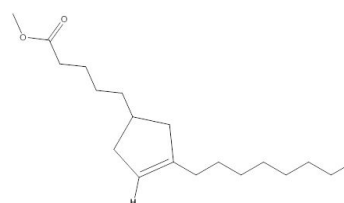
Assim, propõem-se um mecanismo que envolve a coordenação da dupla ligação presente no anel ao íon metálico, por meio de uma interação conhecida como “retrodoação”. Forma-se, então, um anel de três membros que posteriormente sofre uma quebra radicalar entre o carbono 1 (C1) e o carbono 3 (C3) produzindo um dirradical conforme a Figura 2.

Após a abertura do anel, ocorre a abstração do hidrogênio ligado ao carbono β ligação dupla, que está na cadeia onde se localiza o grupo éster, formando um radical mais estável. Posteriormente, há a união dos radicais formados no C<sub>5</sub> e no C<sub>3</sub>, seguido pela descoordenação do íon metálico formando novamente a ligação dupla. (Fig.2)



**Figura 2:** Mecanismo proposto para a ruptura do anel ciclopropênico.

Assim, propõe-se, como produto final, a estrutura mostrada na Fig. 3.



**Figura 3:** Estrutura proposta.

### Conclusões

As análises de IR-FT e <sup>1</sup>H RMN mostraram que as bandas e os picos característicos do éster foram mantidos inalterados ao final das reações, enquanto os sinais referentes ao anel ciclopropênico desapareceram, indicando sua ruptura. Essa ruptura acontece via reação radicalar, onde há a formação de um anel ciclopenteno na cadeia do biodiesel.

### Agradecimentos

FAPDF, CNPq e a CAPES pelo financiamento.

<sup>1</sup> MANGAS, M. B. P.; Rocha, F.N.; Suarez, P.A.Z.; Meneghetti, S.M.P.; Barbosa, D.C.; dos Santos, R.B.; Carvalho, S.H.V.; Soletti, J.I. *Industrial Crops and Products* (Print), v. 36, p. 349-354, 2012.

<sup>2</sup> Oliveira, J. T. A.; Vasconcelos, I. M.; Bezerra, L. C. N. M.; Silveira, S. B.; Monteiro, A. C. O.; Moreira, R. A.; *Food Chem.*, 70, 185, 2000.

<sup>3</sup> Vickery, J. R.; *J. Am. Oil Chem. Soc.* 1980, 57, 87.

<sup>4</sup> Mangas, M.B.P.; Mello, M.V.; Suarez, P.A.Z.; *Thermochemica Acta*; 564; 39-42; 2013.