

Obtenção de ácido acético como derivado da indústria do biodiesel: oxidação verde de acetol catalisada por $\text{FeCl}_3/\text{H}_2\text{O}_2$.

Marcos L. de Araújo¹ (PG), Felipe S. Patrício¹ (IC), Wagner A. Carvalho¹ (PQ), Georgiy B. Shul'pin² (PQ), Dalmo Mandelli^{1*}(PQ).

¹Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Naturais e Humanas, Av. dos Estados, 5001. Bairro Bangu, Santo André – São Paulo – Brasil. ²Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, ul. Kosygina, dom 4, Moscou 119991, Rússia.

*dalmo.mandelli@ufabc.edu.br

Palavras Chave: biodiesel, catálise, química verde, oxidação de álcoois, acetol.

Introdução

Com o recente aumento da produção de biodiesel tem havido também um grande aumento na produção de seu subproduto, o glicerol, o que leva a uma diminuição do seu preço. Assim, a venda de glicerol tem se tornado um gargalo na produção de biodiesel. A fim de se expandir a produção de biodiesel, torna-se necessário o uso do glicerol como matéria-prima para a fabricação de outros produtos químicos. Uma alternativa é realizar a desidratação do glicerol para acetol, que também pode ser transformado em outros produtos. Neste trabalho estudou-se a oxidação de acetol para ácido acético catalisada por $\text{FeCl}_3/\text{H}_2\text{O}_2$.

Resultados e Discussão

As reações foram feitas em um reator de vidro de 15 mL à 60°C e pressão atmosférica, com os reagentes nas seguintes concentrações: FeCl_3 , $1.10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$; acetol, $0,5 \text{ mol.L}^{-1}$; H_2O_2 , $0,45 \text{ mol.L}^{-1}$; nitrometano, $0,5 \text{ mol.L}^{-1}$ e acetonitrila até completar 5 mL. Para cada alíquota retirada (2 gotas) foram adicionados 1 mL de acetonitrila e trifetilfosfina para decompor o H_2O_2 e parar a reação. A análise da mistura reacional foi feita por CG (cromatografia a gás). Empregando-se o catalisador na concentração de $1.10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$ foi obtido um rendimento de 39% após 2 h. Em seguida foram feitas reações variando as concentrações iniciais de catalisador, como mostrado na figura 1, avaliando-se o NT (NT, mol produto/mol de catalisador). O maior NT obtido foi de 555, utilizando-se uma concentração de $3.10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ de FeCl_3 . Variou-se também a concentração de substrato e oxidante, como mostrado na figura 2, avaliando-se o rendimento obtido em relação às concentrações iniciais. Nota-se que o rendimento diminui com aumento na concentração inicial de acetol, uma vez que a capacidade de oxidação do sistema permanece a mesma. Por outro lado, o aumento na concentração inicial de H_2O_2 leva a um aumento no rendimento, pois aumenta a capacidade de oxidação do sistema.

37ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

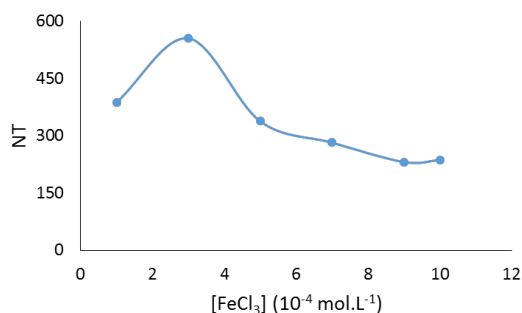


Figura 1. Número de turnover (NT) para diferentes concentrações de FeCl_3 , com a concentração FeCl_3 variando entre $1.10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ e $1.10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$.

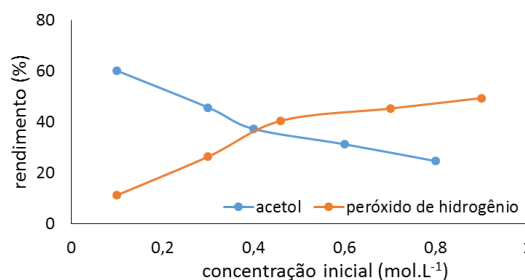


Figura 2. Rendimento para ácido acético na oxidação de acetol sob diferentes concentrações iniciais de acetol (●) e H_2O_2 (●), com as concentrações iniciais de acetol e H_2O_2 variando entre $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ e $0,9 \text{ mol.L}^{-1}$.

Conclusões

É possível obter ácido acético como principal produto a partir da oxidação de acetol. O NT máximo obtido foi 555, encontrado na concentração de $3.10^{-4} \text{ mol.L}^{-1}$ de FeCl_3 . O maior rendimento obtido foi de 60% com a concentração inicial de acetol de $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$. As curvas de rendimento versus concentração inicial mostram que o rendimento diminui com o aumento na concentração inicial de acetol e aumenta com o aumento na concentração inicial de H_2O_2 .

Agradecimentos

CAPES pela bolsa de mestrado, CNPq (472130/2012-9, 303828/2010-2) e UFABC.