



XXV ENCONTRO DE JOVENS PESQUISADORES
VII MOSTRA ACADÊMICA DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIA

De 17 a 19 de outubro de 2017
Campus-Sede da UCS • Caxias do Sul



CONVERSÃO DE GLICEROL EM SOLKETAL E CARACTERIZAÇÃO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Gabriela Antonioli (PROBITI-FAPERGS), Carolina Colombo Tedesco, Thiago Barcellos da Silva, Sidnei Moura e Silva (Orientador(a))

A busca por metodologias verdes e insumos provenientes de fontes renováveis cresce rapidamente em todo o mundo. Entre os combustíveis provenientes de fontes renováveis, um dos que se mostram mais promissores é o biodiesel. O coproduto majoritário da produção de biodiesel é o glicerol, que contabiliza 10% m/m. Por isso, a demanda de rotas químicas que transformem o glicerol em produtos de maior valor agregado é uma tendência na indústria química. Nesse contexto, o solketal, que é o cetal de glicerol/acetona, é um composto com promissoras aplicações na indústria e já vêm sendo comercializado por grandes indústrias químicas. O solketal também é um importante intermediário para a síntese de outras moléculas, e também é conhecido por reduzir a formação de goma na gasolina. Devido à importância do solketal, e a necessidade de procurar por rotas sintéticas eficientes, desenvolvemos uma metodologia catalítica empregando irradiação por micro-ondas para converter o glicerol em solketal. Neste estudo foram avaliados diferentes tempos reacionais, temperaturas, solventes e quantidade de catalisador para atingir a máxima conversão. A metodologia otimizada propiciou a conversão do glicerol com elevada seletividade (95% de conversão em solketal e 3% no isômero 4,4-dimetil-3,5-dioxaciclohexanol) após 5 minutos de reação à 120 °C, na presença de 1,0 mol% de ácido sulfâmico (catalisador). A adição de dois equivalentes de etanol aumentou a solubilidade do glicerol em acetona (foram utilizados 4 equivalentes) e sulfato de magnésio foi utilizado como agente sequestrante de água para deslocar o equilíbrio da reação para os produtos. Aliado a isso, foi realizada a caracterização dos produtos através da técnica de ressonância magnética nuclear (RMN) que é de elevada importância para a caracterização de compostos orgânicos. Com esta técnica, juntamente com análises por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), foi comprovada a identidade química do solketal. Através do RMN verificou-se a presença dos núcleos de carbono-13 (^{13}C) e hidrogênio (^1H) e através da CG-EM identificou-se o tempo de retenção dos reagentes e produtos, bem como suas massas moleculares. A conversão das reações também foi calculada pela integração dos picos obtidos nos espectros de CG-EM. Conclui-se que o uso de irradiação por micro-ondas propiciou o aquecimento uniforme do meio reacional e possibilitou uma redução significativa no tempo da reação, com conversão de 98% do glicerol.

Palavras-chave: solketal, RMN, glicerol

Apoio: UCS, FAPERGS