

# ACETALIZAÇÃO DE GLICEROL NA PRESENÇA DE BUTIRALDEÍDO SOBRE ÓXIDOS BINÁRIOS IMPREGNADOS EM NI E CO.

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Lais Ferreira Oton, Alcineia Conceicao Oliveira

A reação de acetalização do glicerol foi investigada na presença de catalisadores contendo NiO e Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, suportados em La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e CeO<sub>2</sub>-MnOx. A reação foi estudada em condições de temperatura constante a 50°C e sem a presença de solventes afim de obter como produtos cetais e acetais cíclicos com 5 e 6 membros, respectivamente, o 2,2-dimetil-1,3-dioxolana-4-metanol (solketal) e 1,3-dioxan-5-ol (acetal). Os óxidos foram caracterizados após a reação a partir das técnicas de espectroscopia na região do infravermelho com transformadas de Fourier (FTIR), espectroscopia Raman e microscopia eletrônica de transmissão (MET). Os testes experimentais apontaram que em razão da elevada interação dos metais impregnados com o suporte os catalisadores à base de CeO<sub>2</sub>-MnOx foram os mais ativos na reação do que os suportados em La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. A análise da conversão do glicerol indicou que os catalisadores mais ativos contribuíram para maior seletividade do solketal, produto de controle cinético da reação, em detrimento da produção de acetal. A acetalização do glicerol também foi estudada através de modelagem computacional utilizando a teoria do funcional de densidade de carga, afim de determinar possíveis mecanismos reacionais e as energias envolvidas nos intermediários químicos da reação para formação de acetal e solketal. O modelo computacional convergiu prioritariamente para a formação de solketal, adequando-se aos dados experimentais de seletividade, a ciclização do intermediário formado indicou um rápido ataque que das hidroxilas, terminais do glicerol concomitantemente à liberação de água para o meio reacional.

Palavras-chave: Acetalização. Catalisadores suportados. Glicerol. Butiraldeídos.