

**ANA LUÍZA QUINTÃO SANTOS**

**CONVERSÃO CATALÍTICA DO GLICEROL EM ACETAIS ASSISTIDA  
POR MICRO-ONDAS**

Monografia apresentada ao Departamento de Química da Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências para a conclusão do curso de Bacharelado em Química.

Orientador: Prof. Dr. Sergio Antônio Fernandes

**VIÇOSA – MINAS GERAIS**

**MAIO DE 2021**

## RESUMO

SANTOS, Ana Luíza Quintão, Monografia de conclusão do curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, maio de 2021. **Conversão catalítica do glicerol em acetais assistida por micro-ondas**. Orientador: Prof. Dr. Sergio Antonio Fernandes.

As recentes previsões do esgotamento dos combustíveis fósseis e a preocupação com as mudanças climáticas tem levado a busca por fontes de energias renováveis. Nesse contexto, a demanda por biocombustíveis, tal como o biodiesel, tem aumentado. Assim, a produção do biodiesel tem crescido de forma significativa a cada ano, produzindo glicerol em excedente como subproduto. Dessa maneira, uma saturação no mercado do glicerol está ocorrendo e ocasionando um desequilíbrio entre oferta e demanda, causando uma queda brusca no seu valor e prejudicando a viabilidade econômica da produção do biodiesel. Portanto, o desenvolvimento de processos para converter o glicerol em produtos de alto valor agregado é essencial para ampliar a produção do biodiesel e mantê-lo competitivo no mercado de combustíveis. Dentre as várias rotas existentes envolvendo a conversão do glicerol em produtos químicos, a acetalização tem se destacado. Os acetais formados a partir do glicerol, encontram aplicações em várias áreas, nas quais o seu uso como aditivos de combustíveis, é a mais promissora, pois resulta na sua integração total na cadeia do biodiesel e elimina um dos obstáculos para a sua produção. Com o objetivo de converter o glicerol em acetais foi proposto o uso do ácido *p*-sulfônico calix[4]areno suportado em sílica CX4SO<sub>3</sub>HSi(*n*) com aquecimento via irradiação de micro-ondas, e a análise quantitativa foi realizada por RMN de <sup>1</sup>H. Foram avaliados os efeitos dos principais parâmetros da reação, tais como a temperatura (100 a 140 °C), tempo reacional (10 a 25 minutos) e quantidade de catalisador (2,5 a 10% m/m), empregando o benzaldeído e glicerol como substratos modelo. Obteve-se rendimento de 74% nas condições otimizadas empregando 5% (m/m) do catalisador CX4SO<sub>3</sub>HSi(*n*), a 110 °C em 20 minutos, na proporção molar de 1:1 dos reagentes. A partir das condições otimizadas foi avaliada a generalidade da reação, obtendo-se vinte produtos com rendimentos que variaram de 6 a 99%. Além disso, foi avaliada o uso do catalisador CX4SO<sub>3</sub>HSi(*n*) em reações de cetalização, na qual obteve-se cinco produtos com rendimentos que variaram de 2 a 82%.

**Palavras-chave:** biocombustíveis, biorrefinaria, catalisador heterogêneo.

## ABSTRACT

SANTOS, Ana Luíza Quintão, Undergraduate final paper submitted to the Department of Chemistry in partial fulfillment of the requirements for the degree of Bachelor in Chemistry. Federal University of Viçosa, may of 2021. **Microwave assisted catalytic conversion of glycerol to acetals**. Advisor: Teacher Doctor Sergio Antonio Fernandes.

The recent predictions of the depletion of fossil fuels and the concern with climate change has led to the search for renewable energy sources. In this context, the demand for biofuels, such as biodiesel, has increased. Thus, the production of biodiesel has grown significantly each year, producing surplus glycerol as a by-product. Hence, a saturation in the glycerol market is occurring and causing an imbalance between supply and demand, causing a sharp drop in its value and jeopardizing the economic viability of biodiesel production. Therefore, the development of processes to convert glycerol into products with high added value is essential to expand the production of biodiesel and keep it competitive in the fuel market. Among the various existing routes involving the conversion of glycerol into chemical products, acetalization has stood out. Acetals formed from glycerol, find applications in several areas, in which their use as fuel additives is the most promising, as it results in their total integration in the biodiesel chain and eliminates one of the obstacles to their production. In order to convert glycerol into acetals, the use of *p*-sulfonic acid calix[4]arene supported on CX<sub>4</sub>SO<sub>3</sub>HSi(*n*) with heating via microwave irradiation was proposed, and the quantitative analysis was performed by <sup>1</sup>H NMR. The effects of the main parameters of the reaction was evaluated, such as temperature (100 to 140 °C), reaction time (10 to 25 minutes) and amount of catalyst (2,5 to 10% w/w), using benzaldehyde and glycerol as model substrates. 74% yield was obtained under optimized conditions using 5% (w/w) of the catalyst CX<sub>4</sub>SO<sub>3</sub>HSi(*n*), at 110 °C in 20 minutes, in a 1:1 molar ratio of the reagents. From the optimized conditions, the generality of the reaction was evaluated, obtaining twenty products with yields that varied from 6 to 99%. In addition, the use of the catalyst CX<sub>4</sub>SO<sub>3</sub>HSi(*n*) in ketalization reactions was evaluated, in which five products were obtained with yields ranging from 2 to 82%.

**Keywords:** biofuels, biorefinery, heterogeneous catalyst.