

MARIANA TEIXEIRA CORDEIRO

**ESTERIFICAÇÃO DO ÁCIDO LEVULÍNICO CATALISADA POR NITRATOS
METÁLICOS**

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: Márcio José da Silva

VIÇOSA – MINAS GERAIS
2024

RESUMO

CORDEIRO, Mariana, monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, setembro, 2024. **Esterificação do ácido levulínico catalisada por nitratos metálicos.** Orientador: Márcio José da Silva.

Catalisadores são amplamente utilizados na indústria química e têm papel fundamental na síntese de compostos de alto valor agregado e combustíveis, uma vez que uma reação catalítica é mais rápida que uma versão não catalisada da mesma reação. O uso de catalisadores comerciais como sais nitratos metálicos pode ser mais vantajoso que os tradicionais ácidos minerais sulfúrico e clorídrico, que são corrosivos e precisam ser neutralizados após as reações, o que gera resíduos e efluentes. Neste trabalho estudou-se a reação de esterificação do ácido levulínico com butan-1-ol catalisada por nitratos metálicos comerciais, e foram avaliados os principais efeitos que afetam na velocidade, conversão e seletividade da reação. Foram estudados os efeitos dos seguintes parâmetros: *i*) efeito da natureza do cátion metálico presente no sal nitrato catalisador; *ii*) o efeito do número de oxidação do cátion na atividade catalítica de cátions do mesmo elemento; *iii*) efeito da concentração do catalisador; *iv*) efeito da natureza do álcool e *v*) efeito da temperatura. Para realização dos testes catalíticos foi utilizado um reator de vidro de três vias acoplado a um condensador de refluxo à pressão atmosférica submetido a aquecimento com temperatura controlada e agitação magnética. Para monitoramento das reações, foram retiradas alíquotas em intervalos regulares, as quais foram analisadas por cromatografia gasosa. Nas reações, dentre os nitratos metálicos estudados, o que apresentou melhor atividade catalítica foi o $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$, que em condições otimizadas atingiu excelente conversão (ca. 84%) e alta seletividade (ca. 98%) para levulinato de butila.

Palavras-chaves: Catálise. Esterificação. Ácido Levulínico. Nitratos Metálicos.

ABSTRACT

CORDEIRO, Mariana, Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry, Universidade Federal de Viçosa, september, 2024. **Esterification of levulinic acid catalyzed of metal nitrates.** Advisor: Márcio José da Silva.

Catalysts are widely used in the chemical industry and play a crucial role in the synthesis of high-value-added compounds and fuels, as a catalytic reaction is faster than a non-catalyzed version of the same reaction. The use of commercial catalysts such as metal nitrate salts can be more advantageous than traditional mineral acids like sulfuric and hydrochloric acids, which are corrosive and need to be neutralized after reactions, generating waste and effluents. This study examined the esterification reaction of levulinic acid with butan-1-ol catalyzed by commercial metal nitrates and assessed the main effects that influence the reaction's rate, conversion, and selectivity. The effects of the following parameters were studied: *i*) the effect of the nature of the metal cation present in the nitrate salt catalyst; *ii*) the effect of the oxidation state of the cation on the catalytic activity of cations of the same element; *iii*) the effect of the catalyst concentration; *iv*) the effect of the nature of the alcohol and *v*) the effect of temperature. For catalytic tests, a three-neck glass reactor equipped with an atmospheric pressure reflux condenser was used, with controlled heating and magnetic stirring. To monitor the reactions, aliquots were taken at regular intervals and analyzed by gas chromatography. Among the metal nitrates studied, $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ exhibited the best catalytic activity, achieving excellent conversion (approx. 84%) and high selectivity (approx. 98%) for butyl levulinate under optimized conditions.

Keywords: Catalysis. Esterification. Levulinic acid. Metal Nitrates.