

THAÍS SILVA SOARES

**AVALIAÇÃO DOS HETEROPOLIÁCIDOS DE KEGGIN COMO CATALISADORES
NAS REAÇÕES DE ESTERIFICAÇÃO OXIDATIVA E ACETALIZAÇÃO DO
BENZALDEÍDO**

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
2021**

*Dedico este trabalho ao meu pai Marcio, minha
mãe Rosália e meu irmão Pedro Henrique.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente, aos meus pais Márcio e Rosália pelo apoio emocional, financeiro e por me incentivarem nos melhores e piores momentos.

À minha orientadora de Iniciação Científica, Maria do Carmo Hespanhol, que em 2017 despertou em mim a vontade em ser pesquisadora. Agradeço a confiança, os ensinamentos e por ser uma inspiração.

À Franciele, por ter tido paciência e ter me ensinado muito nos anos que também me orientou na IC. Aos meus colegas de laboratório Alan, Hauster e Victoria por estarem sempre presente e nunca me deixarem esquecer do meu potencial.

As minhas colegas de república Anna Clara, Mariana, Fabiana, Danielle e Lara por serem minha família, meu colo e meu puxão de orelha quando precisei e quando não precisei também.

Aos meus queridos colegas das repúblicas: Agregados e Sistemáticos, pelo acolhimento e muitos anos de parceria.

A minha amiga Iare, que me mostrou um lado diferente da vida e me ensinou muito sobre companheirismo.

Ao professor Márcio José, por ter me inspirado em sala de aula e ter aceitado meu convite para me orientar no projeto de monografia. Também agradeço, aos colegas Paloma e Claudio por terem me acolhido tão bem no LABCAT e me ensinado, em tão pouco tempo, muita coisa.

Voltar para São José sempre foi um momento muito especial, por isso, agradeço ao meu amigo Alê por tornar esse momento de ansiedade em uma viagem mais leve e por me receber tão bem na sua casa de Caxambu-MG.

A Minas Gerais e a Viçosa, por me acolherem tão bem e me fazerem sentir em casa mesmo estando muito longe de casa.

“A química que reproduz a vida é reproduzida facilmente por todo o cosmo. Parece improvável que sejamos os únicos seres inteligentes.”

Carl Sagan

RESUMO

SOARES, Thaís Silva, Monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, outubro, 2021. **AVALIAÇÃO DOS HETEROPOLIÁCIDOS DE KEGGIN COMO CATALISADORES NA REAÇÃO DE ESTERIFICAÇÃO OXIDATIVA E ACETALIZAÇÃO DO BENZALDEÍDO.** Orientador: Márcio José da Silva.

Os heteropoliácidos (HPAs) são sólidos iônicos ácidos, menos corrosivos do que os similares líquidos inorgânicos e mais fáceis de serem manuseados. Atualmente, há uma demanda laboratorial e industrial por processos químicos que sejam ao mesmo tempo eficientes e que sejam ambientalmente mais amigáveis. Neste contexto, o objetivo deste trabalho foi avaliar os HPAs de Keggin: $H_3PMO_{12}O_{40}$ (HPMO), $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) e $H_4SiW_{12}O_{40}$ (HSiW) como catalisadores nas reações de esterificação oxidativa e acetalização do benzaldeído. Os HPAs foram obtidos comercialmente, e usados como catalisadores na reação de esterificação oxidativa do benzaldeído em metanol e etanol, usando peróxido de hidrogênio como agente oxidante. Com o catalisador HSiW na concentração de 1,28 mol %, uma conversão de 33% foi observada, com uma seletividade de 96 % para o benzoato de metila, produto de interesse na esterificação oxidativa. Tendo em vista que o metanol foi o álcool mais reativo na esterificação, ele também foi utilizado para a reação de acetalização do benzaldeído. Com o catalisador HPW na concentração de 0,025 mol %, 70,0 % das moléculas de benzaldeído foram convertidas com uma seletividade de 97,0 % para o dimetil acetal benzaldeído. O monitoramento da reação e a identificação dos produtos foram realizados por análises em um cromatógrafo a gás acoplado a um espectrômetro de massas.

Palavras-chave: Catálise homogênea. Oxidação. Acetalização. Química verde. Heteropoliácidos de Keggin.

ABSTRACT

SOARES, Thaís Silva, 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, october, 2021. **EVALUATION OF KEGGIN HETEROPOLIACIDS AS CATALYSTS IN THE OXIDATIVE ESTERIFICATION AND BENZALDEHYDE ACETALIZATION REACTION.** Advisor: Márcio José da Silva.

Heteropolyacids (HPAs) are acidic ionic solids, less corrosive than similar inorganic liquids and easier to handle. Currently, there is a laboratory and industrial demand for chemical processes that are both efficient and environmentally friendlier. In this context, the objective of this work was to evaluate the Keggin HPAs: $H_3PMO_{12}O_{40}$ (HPMO), $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) and $H_4SiW_{12}O_{40}$ (HSiW) as catalysts in the oxidative esterification and acetalization of benzaldehyde reactions. The HPAs were obtained commercially, and used as catalysts in the oxidative esterification reaction of benzaldehyde in methanol and ethanol, using hydrogen peroxide as an oxidizing agent. With the HSiW catalyst at a concentration of 1.28 mol%, a conversion of 33% was observed, with a selectivity of 96% for methyl benzoate, a product of interest in oxidative esterification. Since methanol was the most reactive alcohol in esterification, it was also used for the benzaldehyde acetalization reaction. With the HPW catalyst at the concentration of 0.025 mol%, 70.0% of the benzaldehyde molecules were converted with a selectivity of 97.0% to the benzaldehyde dimethyl acetal. The monitoring of the reaction and the identification of the products were carried out by analysis in a gas chromatograph coupled to a mass spectrometer.

Keywords: Homogeneous catalysis. Oxidation. Acetalization. Green chemistry. Keggin heteropolyacids.