



QUÍMICA VERDE COMO ALTERNATIVA AOS SOLVENTES USUAIS DA INDÚSTRIA

Rafaela R. Ribeiro¹, Bruna E. R. Paz², Carlos E. S. Dantas², Mariana F. Cardoso², Silvio F. Ximenes², Roberta Ceriani^{2,3}.

¹ Programa Institucional de Bolsa de Iniciação Científica - Ensino Médio

² Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Departamento de Desenvolvimento de Processos e Produtos, Laboratório de Propriedades Termodinâmicas.

³ E-mail para contato: ceriani@unicamp.br

RESUMO – *Este projeto envolveu um estudo no contexto da química verde, avaliando a densidade e o índice de refração da mistura contendo gama-valerolactona (GVL) + n-octanol. A GVL é um composto obtido por meio da biomassa e possui propriedades promissoras para utilização como um solvente verde na indústria. As propriedades mencionadas foram medidas nas temperaturas de 20 °C, 30 °C, 40 °C e 50 °C para as composições de 0%, 20%, 40%, 60%, 80% e 100% em base mássica de n-octanol, permitindo avaliar o efeito da temperatura no decréscimo da densidade e do índice de refração, além do comportamento da mistura em relação a sua composição. A estabilidade da mistura também foi comprovada a 50 °C dado que suas propriedades se mantiveram constantes ao longo de um tempo de análise de 48 h.*

1. INTRODUÇÃO

A Química Verde é um movimento que busca alternativas para a atual forma de produção industrial, visando à segurança do homem e do meio ambiente, além de se comprometer com o abastecimento de recursos do presente e do futuro, estando atrelada ao desenvolvimento sustentável (LENARDÃO *et al.*, 2013). Para auxiliar pesquisadores e engenheiros na implementação de processos baseados na química verde, 12 princípios foram criados para aplicação no desenho de novos processos e, dentre eles, destacam-se o uso de solventes mais seguros; uso de fontes renováveis de matéria-prima; e química intrinsecamente segura para a prevenção de acidentes (LENARDÃO *et al.*, 2003; VAZ JR., 2016).

A biomassa tem se tornado ao longo dos últimos anos uma grande aliada ao desenvolvimento e à implementação da química verde. Ela consiste de toda matéria orgânica de origem animal ou vegetal, sendo alguns exemplos frutos, sementes, folhagens, bagaço e cascas, que podem ser separadas em três componentes principais, sendo a celulose, hemicelulose e lignina, além de originarem óleos vegetais (SCHUCHARDT *et al.*, 2001). Por meio dessas substâncias, podem-se



produzir produtos valiosos para diversos setores industriais, como de combustíveis, alimentos, fármacos e bens de consumo (SCHUCHARDT *et al.*, 2001), de maneira sustentável, com reduzido impacto ambiental, manejo de substâncias menos nocivas e uso de recursos renováveis, se contrastando com a realidade da indústria petroquímica.

A biomassa também pode ser precursora para a produção de solventes verdes alternativos. A gama-valerotactona (GVL) surge nesse contexto, sendo um éster cíclico com cinco carbonos, a qual é obtida a partir de material lignocelulósico. Suas propriedades como alta estabilidade, baixa toxicidade e alta pressão de vapor atribuem a ela características interessantes para uso como solvente industrial. Além disso, ela é considerada uma promissora plataforma química (“building block”), gerando moléculas importantes para diversos setores industriais (HORVÁTH *et al.*, 2008). Atualmente, uma das grandes dificuldades no desenvolvimento de processos envolvendo a GVL é a falta de dados experimentais de propriedades de componente puro e misturas na literatura. Nesse sentido, o objetivo desse projeto foi investigar a densidade e o índice de refração da mistura binária contendo GVL + n-octanol nas temperaturas de 20 °C, 30 °C, 40 °C e 50 °C para as composições de 0%, 20%, 40%, 60%, 80% e 100% em base mássica de n-octanol. A densidade pode ser usada para caracterizar certa substância pura ou mistura em relação a sua composição e é a razão entre a quantidade de massa e o volume da substância (FELTRE, 2004b). O índice de refração é a razão entre a velocidade de propagação da luz no vácuo e em um meio (HELERBROCK, s.d.) e também pode servir para caracterizar misturas em relação à sua composição.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Dos equipamentos, foi utilizado o banho termostático (Tecnal, modelo TE-2005) para garantir o equilíbrio térmico nos experimentos. A balança analítica (Shimadzu, modelo ATY224) foi usada no intuito de realizar as medições de massa para elaboração de todas as misturas binárias. O densímetro (Mettler-Toledo, modelo DM45), além de medir a densidade da mistura regulava a temperatura para as medições, assim como o refratômetro (Mettler-Toledo, modelo RM40), que em seu caso mede o índice de refração.

Foi realizado o estudo da mistura GVL + n-octanol, escolhida após o cumprimento de alguns critérios preestabelecidos, que incluíram a toxicidade das substâncias e as funções orgânicas presentes nelas. Prepararam-se misturas binárias dos compostos nas frações mássicas de 0%, 20%, 40%, 60%, 80% e 100% de n-octanol para análise do comportamento de suas propriedades em função da temperatura e composição. Para isso, o balão volumétrico foi tarado em balança analítica e então adicionou-se a massa de GVL. Em seguida, a massa de n-octanol foi também adicionada e seu valor foi determinado por meio da diferença entre a medida final mostrada na balança e aquela mostrada no início do processo de adição do n-octanol. Utilizando-se um funil de vidro, transferiram-se as diferentes misturas para balões volumétrico, sendo estes vedados com parafilm e armazenado na geladeira.

O objetivo dos primeiros experimentos foi verificar a ocorrência de degradação ou reação entre os compostos. A temperatura de 50 °C foi escolhida para análise da possibilidade de ocorrência nas misturas. Para comprovar a estabilidade dos componentes, a densidade e o índice de refração das misturas foram medidos em um tempo inicial considerado 0 h e após 24 h e 48 h. Para isso, uma



amostra de cada uma das misturas foi transferida para *vials* e colocada em banho termostático por 1 h para atingir o equilíbrio térmico, sendo então realizada a primeira medição de densidade e índice de refração. Este mesmo procedimento de coleta de amostra e medição foi realizado para os outros tempos mencionados.

Após verificar a estabilidade das misturas, iniciaram-se os experimentos para se determinar o comportamento das propriedades (densidade e índice de refração) das soluções em diferentes temperaturas (20 °C, 30 °C e 40 °C) e composições (0%, 20%, 40%, 60%, 80% e 100%). Estes consistiam em retirar pequenas quantidades das amostras antes preparadas, aquecer em banho termostático até a temperatura desejada e realizar as medições das propriedades, seguindo os passos mencionados. Todos os dados experimentais foram colocados em planilha de Excel para cálculo das médias e dos desvios padrões associados. Os valores obtidos foram organizados em gráficos para uma análise visual do comportamento e para comparação das propriedades das misturas em relação às temperaturas e às composições.

3. RESULTADOS

Os dados de densidade e índice de refração do teste de estabilidade não apresentaram alteração nas propriedades no período estudado. Pode-se confirmar que não ocorreu degradação dos compostos ou reação na mistura produzida. Como o teste de estabilidade foi realizado na maior temperatura proposta para os experimentos, pode-se trabalhar sem a preocupação com a ocorrência de tais fenômenos nas demais temperaturas, que são mais baixas.

Os dados de densidade e índice de refração das amostras nas temperaturas de 20°C, 30°C, 40°C e 50°C e suas respectivas composições estão representados nas Figuras 1 e 2.

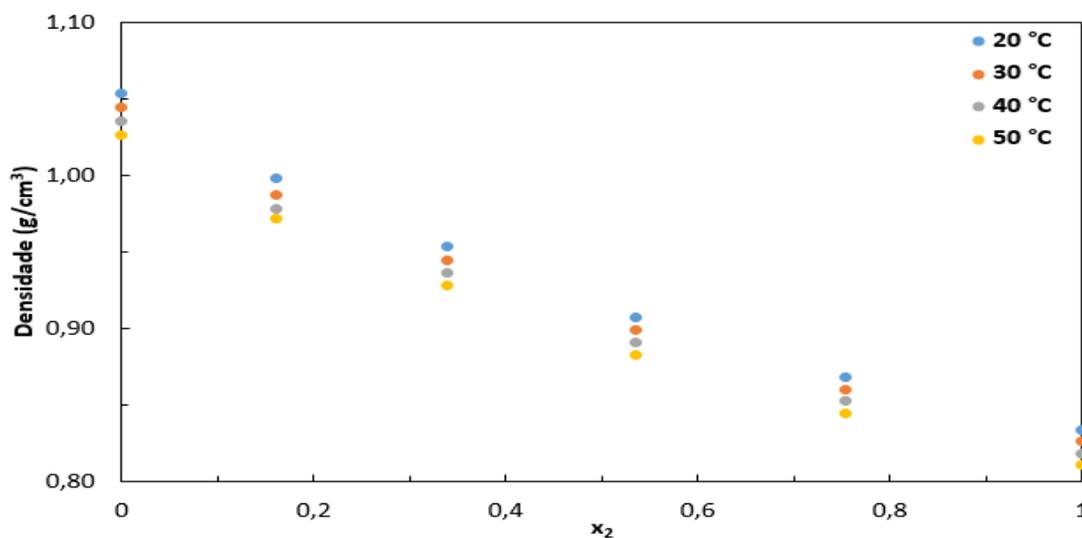


Figura 1- Densidade em função da temperatura e fração molar para as misturas de GVL (1) + n-octanol (2).

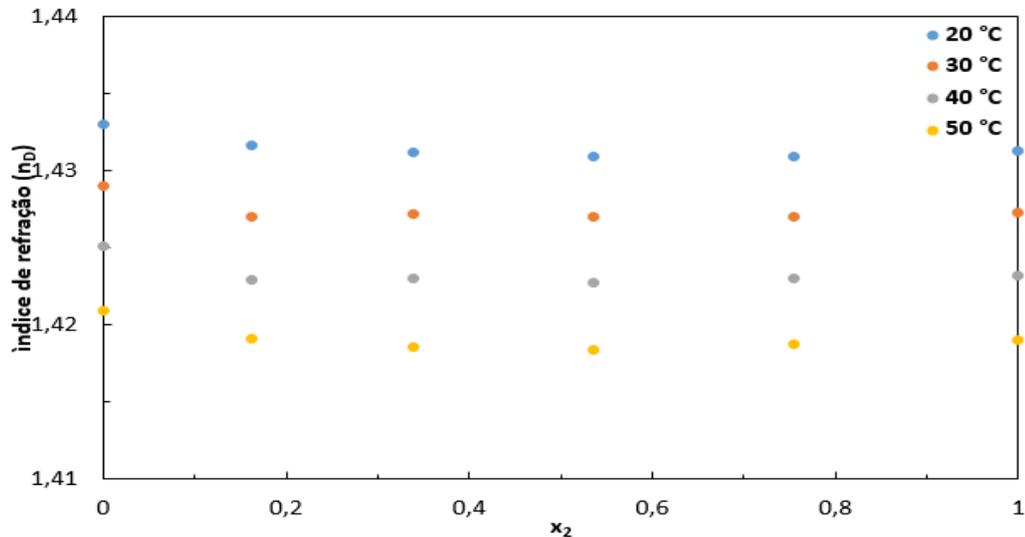


Figura 2 - Índice de refração em função da temperatura e fração molar para as misturas de GVL (1) + n-octanol (2).

Na Figura 1, podem ser observados os dados da densidade em função das temperaturas de 20 °C, 30 °C, 40 °C e 50 °C e das composições. Para densidade, é possível perceber em todos os pontos a sua relação inversa com a temperatura, ou seja, quanto maior a temperatura menor é a densidade. Isso acontece pela própria definição de densidade que é a massa dividida pelo volume. Tomando como exemplo qualquer uma das amostras de mesma composição, com o aumento da temperatura, a mesma quantidade de massa está distribuída em um volume maior, diminuindo a densidade. Em relação entre composição e densidade tem-se que quanto menor quantidade de n-octanol na mistura maior será a densidade, se aproximando do valor da GVL pura, que é o componente mais denso da mistura. Por outro lado, conforme a fração molar do n-octanol aumenta, a densidade da mistura caminha em direção à densidade do n-octanol puro.

De forma análoga, nota-se na Figura 2 a relação inversa entre o índice de refração e a temperatura. Partindo da definição de índice de refração – $n = c/v$, sendo n o índice de refração e c e v a velocidade de propagação da luz no vácuo e em um meio, respectivamente – pode-se concluir que isso ocorre, pois o aumento da temperatura aumenta a velocidade de propagação da luz nas amostras.

Por meio dos resultados dos valores medidos de índice de refração em função da composição da mistura, também percebe-se que essa propriedade caminha em direção ao valor do índice de refração do componente puro conforme ela se enriquece em GVL ou n-octanol. No entanto, essa análise fica menos evidente nesse caso, pois não há grande diferença entre os valores de índice de refração dos componentes puros, como era o caso para a densidade. Por meio desses experimentos, pode-se começar a entender a complexidade do comportamento de misturas, pois cada propriedade varia de um determinado jeito, sendo influenciado pela temperatura e interações entre as moléculas, além de outros fatores.



4. CONCLUSÃO

Nesse projeto, a densidade e o índice de refração da mistura GVL (1) + n-octanol (2) foram medidos a diversas composições e temperaturas para mapear o comportamento da mistura e entender qual a influência dessas variáveis e interação entre GVL e o álcool nessas propriedades. Como esperado, a densidade diminuiu com o aumento da temperatura devido à expansão do volume da amostra. Em relação ao índice de refração, com o aumento da temperatura, aumentou-se a velocidade de propagação da luz na mistura, o que diminuiu seu valor. Também observou-se que, em uma mistura binária, conforme sua composição se aproxima de ser referente a um componente puro, a propriedade da mistura apresenta um comportamento (valor) semelhante ao mesmo. Por último, os experimentos realizados na temperatura de 50°C mostraram que a mistura GVL (1) + n-octanol (2) são estáveis e não reagem, pois não houve alteração das propriedades ao longo do tempo.

5. REFERÊNCIAS

LENARDÃO, J. E.; FREITAG, R. A.; DABDOU, M. J.; BATISTA, A. C. F.; SILVEIRA, C.C. “Green Chemistry” – Os 12 princípios da Química Verde e sua inserção nas atividades de ensino e pesquisa. **Quím. Nova**, v. 26, n. 1, p. 123-129, 2013.

FELTRE, R. Química Volume 1: Química-Geral: 6 ed. São Paulo: Moderna, 2004b.

HELERBROCK, R. Índice de refração. **Brasil Escola**, c2020. Disponível em: < <https://brasilecola.uol.com.br/fisica/indice-de-refracao.htm> >. Acesso em: 18 de set. de 2020.

HORVÁTH et al. γ -Valerolactone – a sustainable liquid for energy and carbon-based chemicals. **Green Chemistry**, v. 10, p. 238-242, 2008.

SCHUCHARDT, U.; RIBEIRO, M. L.; GONÇALVES, A. R. A indústria petroquímica no próximo século: como substituir o petróleo como matéria-prima? **Quím. Nova**, v. 24, n. 2, p. 247-251, 2001.

VAZ JR., S. A Química Verde como uma oportunidade para a biomassa brasileira. **Embrapa**, 2016. Disponível em: < <https://www.embrapa.br/busca-de-noticias/-/noticia/16899065/artigo--a-quimica-verde-como-uma-oportunidade-para-a-biomassa-brasileira#:~:text=Artigo%20%2D%20A%20Qu%C3%ADmica%20Verde%20como%20uma%20Oportunidade%20para%20a%20Biomassa%20Brasileira,-Imprimir%20Artigo%20%2D%20A&text=Desse%20modo%2C%20o%20aproveitamento%20da,a%20sustentabilidade%20das%20cadeias%20produtivas.> > Acesso em: 10 de dez. de 2019.