

Douglas Antônio Alves de Souza¹; Gabriella Noronha de Oliveira²; Pedro Prates Valério³

1 Bacharel em Engenharia Química. Centro Universitário UNA, 2017. douglas.aasouza@hotmail.com.

2 Baharel em Engenharia Química. Centro Universitário UNA, 2017. gabinoronha_94@hotmail.com.

3 Doutor em Engenharia Química. UFMG, 2017. Professor do Centro Universitário UNA. Belo Horizonte, MG. pedro.valerio@prof.una.br.

Recebido em: 05/01/2018 - Aprovado em: 07/06/20158 - Disponibilizado em: 15/06/2018

RESUMO: Ésteres são compostos orgânicos também aplicáveis às indústrias químicas. Quando associados a uma base forte, como hidróxido de sódio (NaOH), os ésteres tendem a ser hidrolisados, produzindo sais orgânicos e álcool. Considerando aplicabilidades industriais, presente trabalho tem como objetivo estimar parâmetros cinéticos relacionados à reação de hidrólise alcalina dos ésteres acetato de etila, estearina e palmitato de isopropila. Observou-se que os parâmetros cinéticos estimados (E_a , k_o , k , r_{A0}) diferiram entre os compostos estudados. Para todos os tratamentos as concentrações de ésteres decresceram com o tempo, se tornando mais rápidas com aumento da temperatura, tendo como base o modelo de Arrhenius.

PALAVRAS-CHAVE: Cinética Química. Modelagem Cinética. Hidrólise Alcalina. Ésteres.

ABSTRACT: Esters are organic compounds also applicable to the chemical industries. When associated with a strong base, such as sodium hydroxide (NaOH), the esters tend to be hydrolysed, producing organic salts and alcohol. The present work considers the industrial applicability of esters while estimating kinetic parameters related to the alkaline hydrolysis reaction of ethyl acetate esters, stearin and isopropyl palmitate. It was observed that the estimated kinetic parameters (E_a , k_o , k , r_{A0}) differed between the compounds studied. For all treatments, the concentrations of esters decreased with time, becoming faster with increasing temperature, based on the Arrhenius model.

KEYWORDS: Chemical Kinetics. Kinetic Modeling. Alkaline Hydrolysis. Esters.

1 INTRODUÇÃO

Ésteres são compostos derivados dos ácidos carboxílicos pela substituição dos hidrogênios ionizáveis por grupos orgânicos, que podem ser um grupo aquila ou arila. São utilizados em indústrias químicas, dentre as quais as alimentícias, solventes, cosméticas e de produtos de higiene e limpeza. São usuais na forma de líquidos voláteis, sendo empregados como flavorizantes. São também

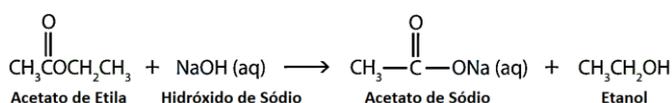
utilizados na produção de polímeros, quando se denominam poliésteres, possuindo ésteres na cadeia principal. Entre tais poliésteres, a aplicação do politereftalato de etileno – PET se faz amplamente conhecida, por exemplo, na produção de garrafas. Os poliésteres também se utilizam nas indústrias de adesivos, papéis, tintas e tecidos, bem como na indústria de petróleo e biocombustíveis (BHATIA,

2007; BAILEY, 2005; WANG *et al.*, 2010; ZHAN *et al.*, 2003).

Vale salientar que, quando associados a uma base forte, como hidróxido de sódio (NaOH), os ésteres podem ser hidrolisados, produzindo um sal orgânico e um álcool. Como exemplo, a hidrólise de acetato de etila resulta em acetato de sódio e álcool etílico. Tais produtos da hidrólise também podem ser utilizados para fins diversos na indústria química, como o estearato de sódio, que é de grande importância na produção de cosméticos e estudos como material de tampão em sistemas anfílicos e para síntese eficiente de espiroxindois em meio micelar aquoso. O acetato de sódio, éster gerado do aceto de etila é usado para várias aplicações em alimentos, indústrias e laboratórios. É usado em decapagem, curtimento, como tampão e como componente principal de compressas elétricas. O acetato de sódio está sendo estudado para o uso na desnitrificação de águas residuais como um componente de nematicidas. O palmitato de isopropila é usado principalmente em cuidados pessoais e cosméticos com formulações como emoliente não-oleoso seco e macio. Pode ser usado como excelente solvente para óleo mineral, silicone e lanolina (BHATIA, 2007; BAILEY, 2005; WANG *et al.*, 2010; ZHAN *et al.*, 2003)

Em função do uso de NaOH, a reação recebe o nome saponificação, originando-se, a partir de um éster em solução aquosa de base inorgânica, um sal orgânico e álcool. Através dessa reação, torna-se possível a produção do sabão (ULLAH; AHMAD, 2017). A Figura 1 ilustra a reação da hidrólise alcalina do acetato de etila.

Figura 1 - Hidrólise Alcalina do Acetato de Etila



Fonte - BALL; HILL; SCOTT, 2011.

Ressalta-se que os mecanismos de algumas da reação de saponificação possuem etapas intermediárias, por vezes indesejadas, usualmente quando operadas em reatores industriais (VASCONCELOS *et al.*, 2015).

De uma forma geral, sob perspectivas industriais, as reações químicas em reatores são parte importante dos processos químicos. Sendo assim, a cinética de reações também se faz um meio para compreensão dos processos no sentido de proporcionar parâmetros que podem auxiliar no design de processos, produtos e reatores, bem como em suas avaliações e monitoramentos. Particularmente, em engenharia, dados e modelos cinéticos são estimados, avaliados e utilizados para projetar processos eficientes bem como reatores de grande escala (FOGLER 2016; KRUPSKA *et al.*, 2002; VALÉRIO; CREN, 2017).

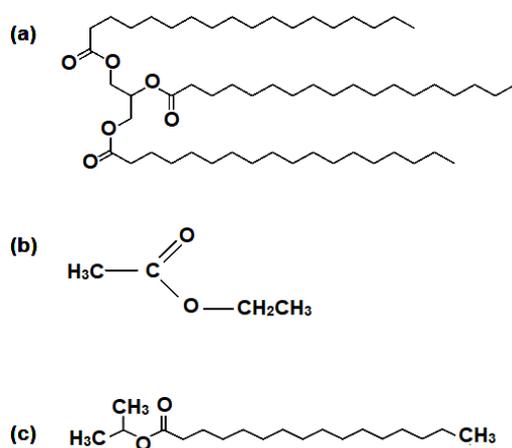
A cinética química é a área que estuda a velocidade de reações, envolvendo um reagente ou produto. Em outras palavras, a cinética química também se define como a rapidez com que ocorre uma reação. Tal rapidez, por sua vez, se define como a mudança no número de moléculas (espécies reagentes) por unidade de volume por unidade de tempo. A mudança é proporcional à concentração de espécies reagentes, e se refere à ordem da reação. Especificamente, é relevante retomar o conceito de que a hidrólise de um éster é uma decomposição química que ocorre na presença de uma base inorgânica, envolvendo adição de água e o uso de um catalisador básico (IKHAZUANGBE; ONI, 2015).

A reação de hidrólise alcalina dos ésteres é bimolecular, relativamente lenta, com ordem global de reação variável, usualmente, ordem 1. Essas características citadas, gera inconvenientes industriais devido a quantidades elevadas de matérias-primas utilizadas e da geração de produtos indesejados. Assim, é de relevância conhecer o sistema de reação trabalhado para elucidação do melhor meio para que a

planta industrial seja operada de maneira segura e eficiente (DIAS, 2012; TSUJIKAWA; INOME, 1966).

Considerando o contexto apresentado, o presente estudo se desenvolve a partir do objetivo primário de se estimarem parâmetros cinéticos relacionados à reação de hidrólise alcalina dos ésteres acetato de etila, estearina e palmitato de isopropila (Figura 2), também investigando a interferência das cadeias carbônicas na velocidade de formação de produtos.

Figura 2 - Ésteres estudados: (a) Estearina, (b) Acetato de etila e (c) Palmitato de isopropila



Fonte - O'NEIL, 2013.

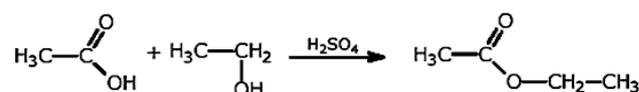
2 REFERENCIAL TEÓRICO

Ésteres apresentam classificações em três subgrupos, sendo lipídeos, ceras e essências. Particularmente, as essências são resultantes da associação de ácidos e álcoois de cadeia curta, formando os flavorizantes artificiais. O etanoato de etila é um exemplo de essência cujo flavor característico de maçã verde vem sendo utilizado em gomas de mascar e balas. A Figura 3 apresenta a reação do ácido etanoico e o álcool etílico, em meio ácido, formando o etanoato de etila (DIAS, 2012).

Estudos recentes envolvendo reações de hidrólise alcalina de ésteres tendem a variar intervalos de temperatura de reação (com variações entre 35 °C a 55 °C) e concentração da base forte (variação da

concentração) utilizada. Ainda, a estimativa dos parâmetros cinéticos pode ocorrer em estudos que envolvem reatores contínuos e em batelada (KUHeli *et al.* 2011; DANISH; AL MESFER; RASHID, 2015; TSUJIKAWA; INOME, 1966; BURSALI; ERTUNC, AKAY, 2006; AHMAD *et al.*, 2013; GARCIA; VALÉRIO, 2017).

Figura 3 - Reação de esterificação do etanoato de etila



Fonte - SOLOMONS; FRYHLE, 2009.

Sob a ótica da cinética química, segundo Fogler (2016), as reações químicas estão relacionadas ao contato das moléculas e a uma quantidade de energia necessária para tais moléculas se distorcerem, alongarem ou quebrarem suas ligações, eventualmente formando novas estruturas. Essa energia é conhecida como energia de ativação e pode ser interpretada como uma barreira que os reagentes devem vencer para formação de produtos. Quanto maior a energia de ativação, mais lenta tende a ser a reação, conseqüentemente quanto menor a energia de ativação, menor a barreira energética e mais rápida a reação.

Segundo o mesmo autor, a energia de ativação pode ser determinada através de experimento que considera uma determinada reação, em diferentes temperaturas absolutas.

A Lei de Arrhenius pode ser considerada a que possui ampla utilização em estudos sobre a cinética de reações, inclusive pela viabilidade experimental, também sendo expressa por meio de apenas duas variáveis usualmente dependentes. Geralmente, a Lei se aplica a temperaturas elevadas, com contribuição para frequência de colisão molecular. Considerando este conceito, a velocidade da reação química se indica diretamente relacionada ao efeito da elevação

de temperatura, podendo ser calculada pela equação que a ela se atrela (ESPERSON, 1981; KHAN; AHMAD; YOUNAS, 2015).

A velocidade de reações químicas tende a ser estudada por meio de correlações que consideram dados e modelos cinéticos. Diferentes métodos se empregam nas análises de dados experimentais, destacando-se o integral, o diferencial, o de meias-vidas, o das velocidades iniciais, o da regressão linear e o de regressão não-linear. A adequação de cada um dos métodos mencionados pode incluir relação com o mecanismo de reação e o tipo de reator (FOGLER, 2016).

Para a reação cujo enfoque tem origem no presente estudo, recomenda-se reatores em batelada, operando isotermicamente, com coleta de dados em regime transiente e concentração medida em função do tempo. Sendo assim, os métodos integral e diferencial se adequam ao propósito (VASCONCELOS *et al.*, 2015).

O método diferencial tende a ser utilizado com aplicação direta da equação diferencial da velocidade a qual busca-se avaliação (FOGLER, 2016). O método integral, por sua vez, se atrela a relativa simplicidade, se empregando com frequência na estimativa de parâmetros cinéticos, em reações químicas.

Salienta-se que o reconhecimento da ordem da reação se faz necessário, acompanhado de cálculos para velocidades específicas, envolvendo diferentes temperaturas, embasando experimentos que se originam também no sentido da determinação de energias de ativação. Assim, a aplicação do método integral acompanha integrações de equações diferenciais, as quais modelam sistemas usualmente em batelada (VASCONCELOS *et al.*, 2015).

Ressalta-se que, sendo assim, estimativas cinéticas também se aplicam às avaliações de comportamento de classes de ésteres, em hidrólise alcalina,

viabilizando proposição de comparações envolvendo teoria e dados experimentais.

3 METODOLOGIA

3.1 PREPARO DAS AMOSTRAS E SOLUÇÕES REAGENTES

Inicialmente, as vidrarias foram submetidas à lavagem com ácido nítrico a 1% (v/v), seguida por um banho com água e sabão neutro, e enxágue abundante com água deionizada. A secagem ocorreu a temperatura ambiente.

Particularmente, as amostras consistiram nas três seguintes classes de ésteres: acetato de etila, estearina e palmitato de isopropila. Para cada um dos ésteres em questão, soluções aquosas foram preparadas considerando-se três diferentes concentrações (0,04 mol.L⁻¹, 0,08 mol.L⁻¹ e 0,1 mol.L⁻¹). O reagente consistiu em hidróxido de sódio (NaOH), em solução aquosa (0,1 mol.L⁻¹). Para tanto, 4 g do soluto foram pesados e completamente dissolvidos em 1 L de água destilada.

3.2 ETAPA DE AQUECIMENTO

A etapa de aquecimento considerou um passo analítico prévio, como forma de se determinar a concentração de éster a ser utilizada em etapa posterior de estimativa dos parâmetros cinéticos. Sendo assim, tal passo foi conduzido em batelada, considerando a adição conjunta de 100 mL de NaOH (0,1 mol.L⁻¹) e 100 mL de cada uma das seguintes soluções preparadas para os ésteres em estudo (0,04 mol.L⁻¹, 0,08 mol.L⁻¹ e 0,1 mol.L⁻¹), em erlenmeyers de 250 mL. Nesse sentido, previamente às misturas das soluções em questão, promoveu-se o aquecimento individual do reagente e das amostras, até que suas temperaturas iniciais (t_0 : 298 K) fossem atingidas. Assim, o experimento foi conduzido em condições

isotérmicas. O monitoramento das temperaturas considerou termômetros digitais com precisão igual a ± 1 ° C. Frisa-se que a amostragem foi realizada em triplicata, com cada replicata igual a 10 mL. Assim sendo, onze pontos de tempo (0, 30, 60, 90, 120, 150, 180, 210, 240, 270 e 300 segundos) foram considerados para a amostragem dos ésteres estudados, em cada uma das concentrações para eles preparadas (MUKHTAR; HAQ, 2008).

Com base nos resultados obtidos, a concentração 0,1 mol.L⁻¹, cuja degradação variou entre 30% e 60%, no intervalo de tempo proposto, foi considerada para execução do passo definitivo de aquecimento e estimativa dos parâmetros cinéticos.

Dessa forma, três diferentes temperaturas foram aplicadas em passo denominado definitivo, combinando os mesmos tempos descritos anteriormente, para cada um dos ésteres. A Tabela 1 apresenta tais condições de tratamento térmico.

Tabela 1 - Condições de tratamento térmico para os Ésteres estudados

Éster (0,1 mol.L ⁻¹)	Tempos (segundos)	Temperaturas (K)
Acetato de Etila	0;30;60;90;120;150; 180;210;240;270;300.	288,15;298,15; 308,15
Estearina	0;30;60;90;120;150; 180;210;240;270;300.	288,15;298,15; 308,15
Palmitato de Isopropila	0;30;60;90;120;150; 180;210;240;270;300.	288,15;298,15; 308,15

Fonte - Próprio autor.

3.3 DETERMINAÇÃO DAS CONCENTRAÇÕES DOS ÉSTERES

Ao longo da etapa de aquecimento, os ésteres foram determinados por método titulométrico, como forma de monitoramento de suas concentrações e degradações. Para tanto, cada alíquota de amostra coletada foi transferida para um segundo erlenmeyer de 125 mL contendo 25 mL de solução ácido clorídrico

0,1% (v/v) padronizado, sob agitação, a temperatura ambiente.

A presença do ácido clorídrico em excesso viabiliza a neutralização da solução a ser analisada, assegurando interrupção das reações, no sentido de obtenção de resultados representativos (KUHელი *et al.*, 2011; AL MESFER, 2016). Especificamente, a etapa de titulação foi realizada com solução padronizada NaOH 0,1 mol.L⁻¹ e adição de solução indicadora fenolftaleína, determinando-se a concentração de ésteres de forma indireta, a partir de íons hidroxila, segundo Ikhazuangbe e Oni (2015).

3.4 MODELAGEM CINÉTICA

Para a etapa de modelagem cinética aplicou-se método integral. As concentrações de ésteres foram apresentadas na forma adimensional (C_A/C_{A0}), em diferentes intervalos de tempo de aquecimento (t), sendo C_A a concentração de ésteres (mol.L⁻¹) no tempo t , C_{A0} a concentração de ésteres (mol.L⁻¹) no tempo inicial t_0 e C_B a concentração de NaOH (mol.L⁻¹) no tempo t .

Para a determinação das energias de ativação E_a e fator de frequência relacionados às reações de degradações, a Equação 1 foi considerada, a partir da qual se verifica que a taxa de degradação dC/dt é proporcional à enésima potência da concentração de cada uma das classes de ésteres estudadas, em qualquer momento t . Destaca-se que k (s⁻¹) é a velocidade específica e n é a ordem das reações.

$$\frac{dC}{dt} = -kC_A^n C_B^n \quad (1)$$

A constante de velocidade é assumida como variando com a temperatura segundo a Lei de Arrhenius, conforme Equação 2.

$$k = k_0 \exp \left[\frac{-E_a}{RT} \right] \quad (2)$$

ou, linearizando a expressão acima, obtém-se, pela Equação 3.

$$\ln(k) = \ln(k_0) - \left[\frac{E_a}{RT} \right] \quad (3)$$

Sendo k_0 : Fator de frequência, E_a : Energia de ativação, R : constante universal dos gases ($8,3144621 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$), T (K): Temperatura medida em escala absoluta.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

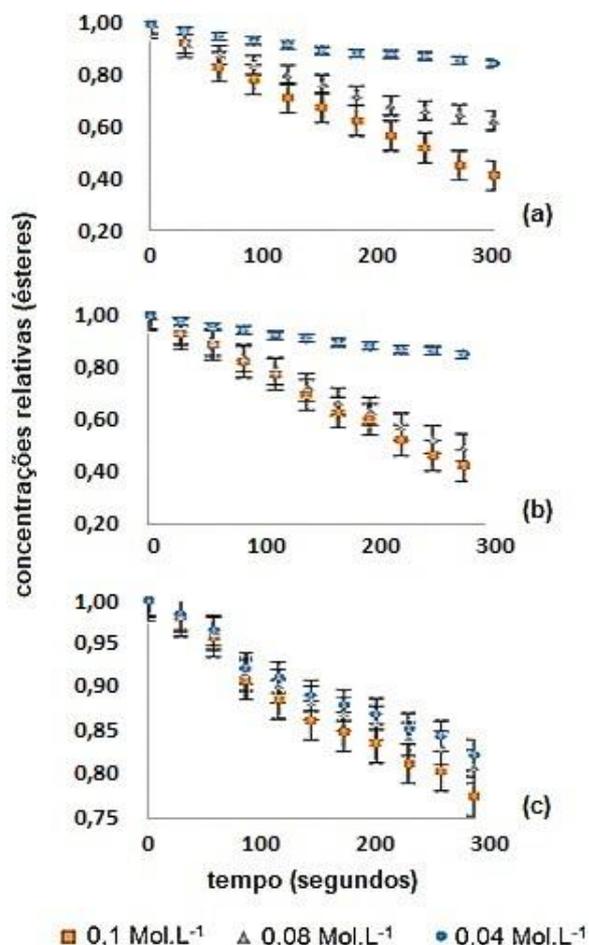
Conforme se pode verificar na Figura 4, as variações das concentrações relativas dos ésteres estudados (acetato de etila, estearina e palmitato de isopropila) são plotadas ao longo do tempo de aquecimento, considerando o passo analítico prévio (conforme descrito no item 3.2).

A Figura 4 possibilita observar que a concentração de ésteres varia com o tempo de aquecimento, considerando condições isotérmicas. Verifica-se, ainda, que as concentrações iniciais, para os três ésteres estudados, reduziram ao longo do aquecimento. Nota-se, contudo, que para as concentrações de ésteres iguais a $0,04 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ e $0,08 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$, os percentuais de degradação não superaram, respectivamente, 20% e 40% para acetato de etila, 15% e 40% para Estearina e 5% e 10% para Palmitato de Isopropila, no intervalo de aquecimento proposto. Em contrapartida, considerando as concentrações de ésteres iguais a $0,1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$, os percentuais de degradação se aproximaram de 60% para acetato de etila, 55% para Estearina e 20% para Palmitato de Isopropila, no mesmo intervalo de aquecimento.

Observa-se que os experimentos conduzidos considerando a concentração de $0,1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$, quando comparados com aqueles conduzidos considerando $0,04 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ e $0,08 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ resultaram em conversões mais significativas dos ésteres acetato de etila,

estearina e palmitato de isopropila em acetato de sódio, estearato de sódio e palmitato de isopropila, respectivamente. É razoável sugerir que tais diferentes conversões se relacionam intimamente com o fato de o reagente não se fazer limitante nas reações propostas a $0,1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$. De fato, sabe-se que diferenças em proporções entre reagentes podem acarretar na impossibilidade da continuidade de reações, limitando conversões em produtos. Nesse sentido, a concentração $0,1 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ foi considerada para execução de passo definitivo de aquecimento e estimativa dos parâmetros cinéticos, uma vez feita representativa para os propósitos do estudo em questão.

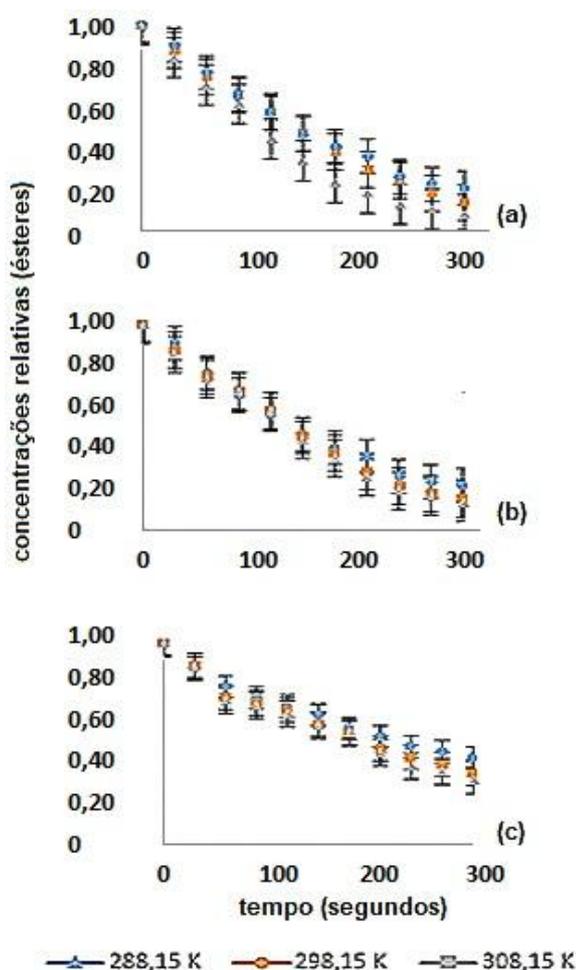
Figura 4 - Variação das concentrações relativas de ésteres, ao longo do tratamento térmico (298,15 K): (a) Acetato de Etila, (b) Estearina e (c) Palmitato de Isopropila



Fonte - Próprio autor.

A Figura 5 a seguir ilustra os resultados obtidos para o passo definitivo, também proposto no item 3.2 do presente estudo, portanto, considerando as temperaturas 288,15 K, 298,15 K e 308,15 K para as reações envolvendo 0,1 mol.L⁻¹ dos ésteres acetato de etila, estearina e palmitato de isopropila.

Figura 5 - Variação das concentrações relativas de ésteres (0,1 Mol.L⁻¹), em função do tempo de aquecimento, nas temperaturas propostas: (a) acetato de etila, (b) estearina (c) palmitato de isopropila

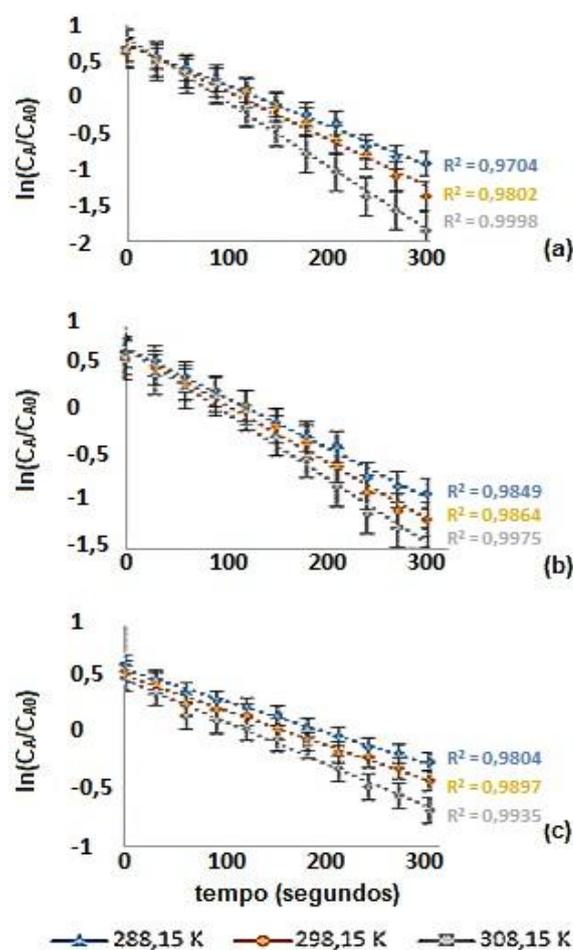


A partir da Figura 5, observa-se redução nas concentrações adimensionais de todos os ésteres estudados, para todas as temperaturas propostas, ao longo do tratamento térmico. Verifica-se ainda que tais degradações, tendendo ao decréscimo, se tornaram mais rápidas com o aumento das temperaturas de tratamento, para todas as classes de ésteres.

Observa-se que o acetato de etila que apresentou uma maior degradação na temperatura mais elevada estudada (308,15 K). Dessa forma, considerando que a cadeia carbônica do palmitato de isopropila e da Estearina é maior do que a do acetato de etila e pode-se sugerir que os tamanhos de tais cadeias carbônicas tendem a interferir nas velocidades das reações de hidrólises de ésteres, se mostrando inversamente proporcionais.

A Figura 6 a seguir possibilita determinar influência definitiva da temperatura nas degradações. Sendo assim, tendo como base o modelo de Arrhenius, os dados de concentração apresentados foram utilizados para a construção de gráficos que consideraram $\ln(C_A/C_{A0})$ em função do tempo de reação.

Figura 6 - $\ln(C_A/C_{A0})$, em função do tempo de aquecimento, nas temperaturas propostas: (a) acetato de etila, (b) estearina (c) palmitato de isopropila



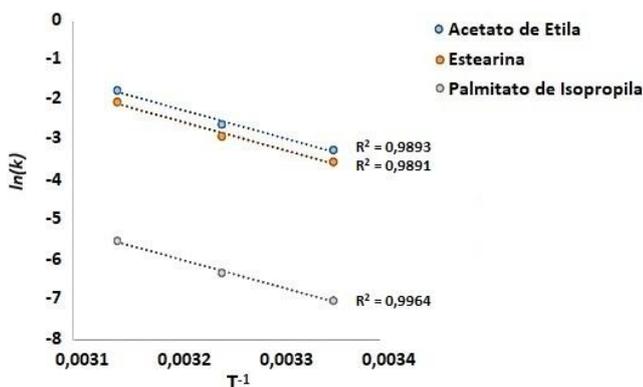
Fonte - Próprio autor.

Ainda, verifica-se que os resultados obtidos entre as temperaturas 288,15 K, 298,15 K e 308,15 K também reforçam a indicação de que tal modelo de primeira ordem se mostra apropriado para descrever as reações de degradações dos ésteres acetato de etila, estearina e acetato de etila, se ajustando bem aos dados experimentais. Com relevância, frisa-se que o método polinomial foi adicionalmente testado, referindo-se aos dados numéricos. Tais testes adicionais demonstraram que o valor do coeficiente de determinação obtido para tal método polinomial ($R^2 = 0,723$) pode ser sugerido como relativamente insatisfatório, quando comparado ao método integral aplicado para os dados obtidos experimentalmente.

Pelo método das diferenças finitas, percebe-se que os dados não tiveram um bom ajuste devido ao valor do coeficiente de determinação ($R^2 = 0,8217$). Além disso, segundo esse método, a ordem estimada para a reação foi igual a 3,9891. Tal valor não condiz com a ordem comumente reportada na literatura (VASCONCELOS *et al.*, 2015, IKHAZUANGBE; ONI, 2015) ou com resultado já mencionado e obtido pelo método integral.

Em cronologia, portanto, as análises viabilizaram tradução de resultados analíticos em coordenadas para a construção do gráfico $\ln(k)$ em função da temperatura (T^{-1}), ilustrado pela Figura 7.

Figura 7 - Gráfico de $\ln(k)$ em função de T^{-1} , para os ésteres Acetato de etila, Estearina e palmitato de isopropila



Fonte - Próprio autor.

A partir da referida plotagem, considerando-se coeficientes angulares das retas e regressões lineares, viabilizaram-se cálculos das energias de ativação para as reações propostas. Os valores estimados para os parâmetros cinéticos relacionados às classes de ésteres abordadas neste estudo se encontram compilados na Tabela 2, em subsequência.

Sob a ótica de processos, segundo Fogler (2016), salienta-se que em sistemas líquidos, a constante de velocidade pode depender de parâmetros como a força iônica e o solvente escolhido, ainda que essas variáveis causam um efeito muito menor que a temperatura, pode ser comprovado através dos experimentos que há uma diferença considerável nas constantes de velocidade dos ésteres estudados. É importante ressaltar que a constante de velocidade é diretamente proporcional ao aumento da temperatura, isso foi confirmado no experimento realizado.

Tabela 2 - Parâmetros cinéticos estimados para as classes de ésteres

Classes de Ésteres	$(-r_{A0})$	$k (s^{-1})$	$E_a (kJ/mol)$	$k_0 (s^{-1})$
Acetato de Etila	0,0121	0,0039	58,89	$7,79 \times 10^8$
Estearina	0,0110	0,0029	58,87	$5,7 \times 10^8$
Palmitato de Isopropila	0,008	0,0009	58,74	$1,72 \times 10^7$

Fonte - Próprio autor.

Nota-se que a maior energia de ativação é do acetato de etila. Isso significa que dentre os ésteres estudados, o acetato de etila apresenta uma maior sensibilidade de velocidade de reação a variações de temperatura, o que foi comprovado em todo o experimento (FOGLER, 2016; KRÜGER; REIS; POSTAL, 2013). Fazendo-se uma alusão à teoria das colisões, sabe-se que o aumento da temperatura do sistema tem como consequência o aumento das velocidades de reação. Com os resultados obtidos dos experimentos, nota-se que aumentos ou reduções nas

temperaturas de processo tenderão a acarretar em variações também próximas nas sensibilidades dos ésteres. Assim, em temperaturas mais elevadas o acetato de etila seria consumido primeiro, seguido pela Estearina e por fim o palmitato de isopropila, mais uma vez confirmando que o aumento da cadeia carbônica tem como resultado uma menor velocidade de reação.

5 CONCLUSÕES

Foi possível estimar parâmetros cinéticos relacionados à reação de hidrólise alcalina dos ésteres acetato de etila, estearina e palmitato de isopropila, também investigando a interferência das cadeias carbônicas na velocidade de formação dos produtos formados. Os resultados obtidos para a determinação da velocidade da reação em estudo mostram que as taxas de variação dependem da concentração dos reagentes. Portanto, é possível representar essa dependência em termos de equações diferenciais que representam a lei de velocidade. As soluções dessas equações podem

ser utilizadas para prever as concentrações de espécies, em qualquer momento após o início da reação. A forma da lei de velocidade também fornece certa compreensão sobre a série de passos elementares através dos quais a reação ocorre, como a determinação da constante de velocidade, que é diretamente proporcional ao aumento da temperatura. Isso foi confirmado no experimento realizado, no qual notou-se que os valores de velocidade para a reação de hidrólise dos ésteres aumentaram juntamente com a temperatura. Por fim, pode-se concluir que o aumento na cadeia carbônica é inversamente proporcional à velocidade de reação de hidrólise de ésteres, devido a um menor rendimento para um mesmo tempo. Seguindo esse contexto, conclui-se que o experimento apresentou uma confiabilidade nos resultados e uma metodologia eficiente para a determinação dos parâmetros cinéticos estudados.

REFERÊNCIAS

AHMAD, A. *et al.* **A Comparative Study of Alkaline Hydrolysis of Ethyl Acetate using Design of Experiment.** Iran. J. Chem. Chem. Eng. 32(4), pp.33-47, 2013.

AL MESFER, M. K. **Experimental Study of the Influence of Process Conditions on Tubular Reactor Performance.** Journal of Engineering and Applied Sciences, v. 3, n. 1, 2016.

BAILEY, A. E. *et al.* **Bailey's industrial oil & fats products.** 2005.

BALL, D. W.; HILL, J. W.; SCOTT, R. J., "The Basics of General, Organic, and Biological Chemistry, v. 1.0" (2011). *Chemistry Department Books.2.* Disponível em http://engagedscholarship.csuohio.edu/scichem_bks/2

BHATIA, S. *et al.* Production of isopropyl palmitate in a catalytic distillation column: Comparison between

experimental and simulation studies. **Computers & chemical engineering**, v. 31, n. 10, p. 1187-1198, 2007.

BURSALI, N., ERTUNC, S., AKAY, B. Process improvement approach to saponification reaction using statistical experimental design. **Chem Eng Process**, 45, pp.980-989, 2006.

DANISH, M.; AL MESFER, M. K.; RASHID, M. M. Effect of Operating Conditions on CSTR Performance: an Experimental Study, **Int. J. Eng. Res. Appl.** 5, pp.74-78, 2015.

DIAS, M. A.. **Modelagem cinética da esterificação de sec-butanol com ácido acético e estudo de monitoramento em linha da reação com espectroscopia de infravermelho.** Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo. 2012.

ESPERSON J.H. **Chemical Kinetics and Reaction Mechanism**, 2nd Edition, New York, MCGraw-Hill. 1981.

FOGLER H. S. **Collection and Analysis of Rate Data**. In: Fogler HS, editor. *Elements of Chemical Reaction Engineering*, 5^a edição. New Jersey: Prentice Hall PTR. p 258-263, 2016.

GARCIA, C. G.; VALÉRIO, P. P.. Estudo da cinética de degradação térmica do óleo vegetal de palma. **Revista e-xacta**. Belo Horizonte, V. 10 p, n. 2, 2017.

IKHAZUANGBE, P. M. O.; ONI, A. B. Reaction rate and rate constant of the hydrolysis of ethyl acetate with sodium hydroxide. **American Journal of Scientific and Industrial Research**, v. 6, p. 1-4, 2015.

KHAN, I.; AHMAD, M. I.; YOUNAS, M. Optimization of saponification reaction in a continuous stirred tank reactor (CSTR) using design of experiments. **Pakistan Journal of Eng. Appl. Sci.** 16. 82-92, 2015.

KRÜGER, A. G.; REIS, C. S.; POSTAL, K. **Cinética da saponificação do Acetato de Etila - Determinação da constante de velocidade da reação**, Universidade Federal do Paraná. Curitiba: 2013.

KRUPSKA, A. *et al.* Determination of the rate constants from phase delay effect in chemical reactions. **Kinetics and catalysis**, v. 43, n. 3, p. 295-302, 2002.

KUHELI, D. *et al.* Kinetic Studies on Saponification of Ethyl Acetate Using an Innovative Conductivity – Monitoring Instrument with a Pulsating Sensor, **Int. J. Chem. Kinet** 43, pp. 648-656.

MUKHTAR, H.; HAQ, I. Production of alkaline protease by *Bacillus subtilis* and its application as a depilating agent in leather processing. **Pak. J. Bot**, v. 40, n. 4, p. 1673-1679, 2008.

O'NEIL, M. J. (Ed.). **The Merck index: an encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals**. RSC Publishing, 2013.

SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Química Orgânica**, v. 2. 9 ed. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., Rio de Janeiro, 2009.

TSUJIKAWA H.; INOME H., The reaction Rate of Alkaline Hydrolysis of Ethyl Acetate, **Bulletin of Chemical Society of Japan**, 39(9), 1837-1842, 1966.

ULLAH, I.; AHMAD, M. I.. Optimization of Saponification Reaction in a Continuous Stirred Tank Reactor. **NFC IEFR Journal of Engineering and Scientific Research**, v. 1, 2017.

VALÉRIO P.P.; CREN E.C. Kinetic Predictions of Total Carotenoids Retention in Macauba Oil Under Interesterification Conditions. **Sodebras Journal**. 12(141):219–224, 2017.

VASCONCELOS, S. F. *et al.* Obtenção e análise dos dados cinéticos da reação de hidrólise alcalina de ésteres do Acetato de Etila em um reator Batelada agitado. **Blucher Chemistry Proceedings**, v. 3, n. 1, p. 943-951, 2015.

WANG, L. M. *et al.* Sodium stearate-catalyzed multicomponent reactions for efficient synthesis of spirooxindoles in aqueous micellar media. **Tetrahedron**, v. 66, n. 1, p. 339-343, 2010.

ZHAN, Y. Q. *et al.* Sodium stearate, an effective amphiphilic molecule buffer material between organic and metal layers in organic light-emitting devices. **Applied physics letters**, v. 83, n. 8, p. 1656-1658, 2003.