

SÍNTESE E MODELAGEM MATEMÁTICA DE AMÔNIOS QUATERNÁRIOS ODS (9)

Industria, Inovação e infraestruturas

Natália Vitória Garcia Mendes (Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo),

Leandro Gonçalves de Aguiar (Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo)

Eduardo Rezende Triboni (Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo)

Introdução

Devido a propriedades antimicrobianas, surfactantes e anti-eletrostáticas dos amônios quaternizados, a utilização de compostos de amônio quaternário é fundamental em diversos setores para garantir a higiene, segurança e eficácia de produtos e processos. Esses compostos desempenham um papel crucial na desinfecção em ambientes hospitalares, na sanitização na indústria alimentícia, na formulação de produtos cosméticos e no tratamento de águas industriais (Arnold et al., 2023; Elena e Miri, 2018; Vereshchagin et al., 2021). A ausência desses agentes, portanto, podem resultar em riscos significativos, como contaminação microbiana causada pela formação de biofilmes, comprometendo a segurança alimentar, a saúde pública e a degradação de produtos (Alvarez-Ordóñez et al., 2019; Yuan et al., 2018; Brooks e Flint, 2008). Estudos como o realizado por Goni *et al.* (2024) relacionam a utilização de amônios quaternários à inibição de processos corrosivos, mostrando que a ausência desses compostos pode impactar negativamente a operação industrial, trazendo prejuízos nas em diversas áreas. Sendo assim, a utilização de amônios quaternários é indispensável para manter altos padrões de segurança e qualidade em várias indústrias (Arnold *et al.*, 2023). Este projeto de pesquisa tem como uma das vertentes o estudo da síntese de amônios quaternários através de reações de substituição nucleofílicas (SN₂), de forma a entender a cinética das reações para que futuramente, seja possível otimizá-las.

Revisão da literatura

A conversão de aminas terciárias em amônios quaternários é amplamente obtida através do mecanismo de reação de substituição nucleofílica (SN₂). Em reações SN₂, a utilização de solventes apróticos, como dimetilsulfóxido (DMSO) e acetonitrila, aumenta a

velocidade da reação (Bruice, 2014). Este efeito é atribuído ao campo elétrico induzido pelas moléculas de solvente. As moléculas de solvente aceleram a reação gerando energia de estabilização induzida pelo campo de $\mu \times ES$ (μ , o momento dipolar da molécula; ES , a força do campo) diminuindo assim a barreira reativa (Bruice, 2014; Silva, 2006).

Método

O processo de síntese proposto envolve a produção de amônios quaternários através de duas reações: (i) 1,4-dibromobutano e trietanolamina; (ii) 1,12-dibromododecano e trietanolamina. Todos com acetonitrila como solvente. As reações foram conduzidas em 100°C com refluxo. Para o processo reacional, foram necessários: um balão de duas bocas (reator batelada), manta de agitação magnética e aquecimento, um termostato, um condensador e duas mangueiras para refluxo de solvente. A modelagem matemática foi realizada com a utilização de códigos no Scilab. Para a obtenção da constante de velocidade da reação, amostras foram coletadas ao longo do tempo. Ao serem recolhidas, 3 ml foram imediatamente diluídas em 8 ml de éter etílico e refrigeradas (a 10°C) por 30 minutos para levar à precipitação do amônio quaternário e, também, a interrupção da reação. Posteriormente, as alíquotas foram centrifugadas por 4 minutos a 3600 rpm. Em seguida, foi removido o sobrenadante, enquanto o precipitado foi mantido à temperatura ambiente por 30 minutos, secado e pesado.

Resultados ou Resultados Esperados

As duas reações estudadas (i) e (ii) apresentaram formação de precipitado, correspondente ao amônio quaternário (Figura 1). As reações podem ser representadas pela equação (1):



Na equação (1), A corresponde aos compostos bromados 1,4-dibromobutano e 1,12-dibromododecano; B a trietanolamina; C ao cátion do amônio quaternário; D ao ânion de bromo. Assim sendo, o termo reacional relacionado a cada componente da reação pôde ser escrito da seguinte forma:

$$-r_A = kC_A^a C_B^b$$

$$-r_B = 2kC_A^a C_B^b$$

$$r_C = kC_A^a C_B^b$$

$$r_D = 2kC_A^a C_B^b$$

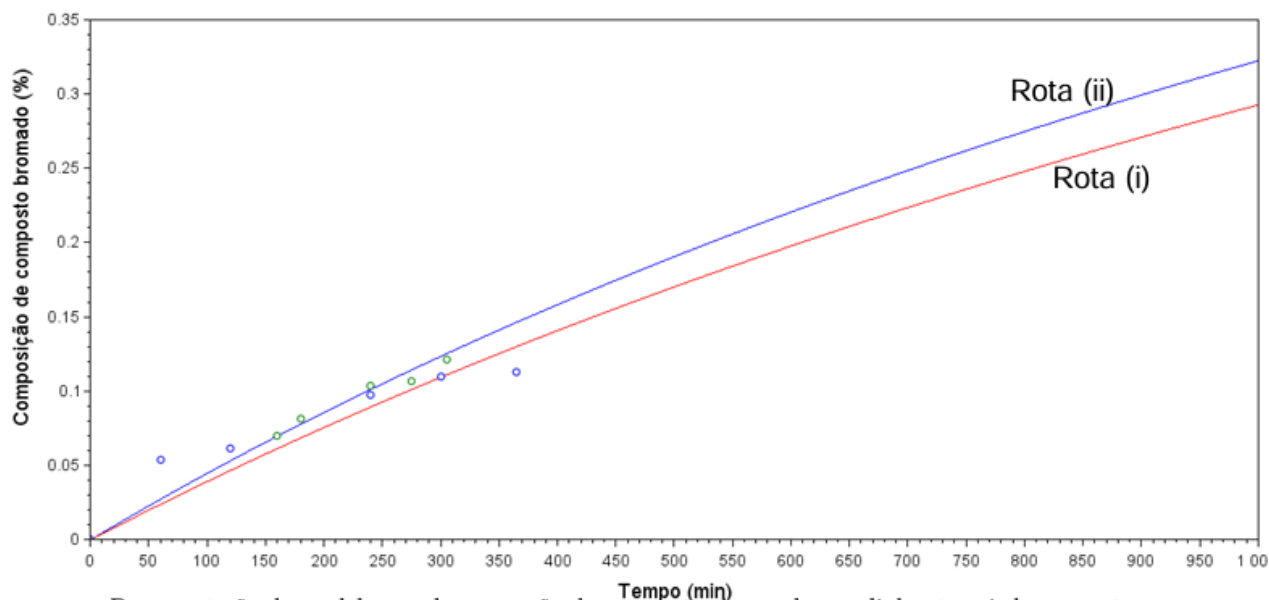
Através de dados experimentais, foi possível identificar os parâmetros cinéticos das reações, como mostrado na Tabela 1 e na Figura 1.

Tabela 1 – Parâmetros cinéticos das reações (i) e (ii)

Rota (i)	CA0	0,000
	CB0	0,000
	K	$9,699 \cdot 10^{-5}$
Rota (ii)	CA0	0,000
	CB0	0,000
	K	$9,9 \cdot 10^{-5}$
	R ²	0,99853188

Parâmetros cinéticos de cada rota reacional: CA0 (concentração inicial de composto bromado); CB0 (concentração inicial de amina); K (constante de velocidade da reação); R2 (coeficiente de correlação da modelagem matemática em relação aos valores experimentais). Fonte: Autora.

Figura 1 - Comparação entre os valores experimentais e as modelagens matemáticas das rotas reacionais



Representação da modelagem da conversão de compostos bromados em linhas tracejadas nas rotas: (i) (linha vermelho); (ii) (linha azul) em comparação com os dados experimentais, representados por pontos (verdes para a Rota (i); azuis para a Rota (ii)). Fonte: Autora.

Conclusões ou Considerações finais

As reações levaram à formação de amônios quaternários e com os métodos adotados foi possível modelar as reações com bons índices de correlação. Porém, ainda

é necessário um estudo quanto à atividade antimicrobiana desses compostos, bem como a realização de análises estruturais: infravermelho e ressonância magnética nuclear (RMN).

Referências

ALVAREZ-ORDÓÑEZ A.L., COUGHLAN M., BRIANDET R., COTTER P.D. Biofilms in food processing environments: Challenges and opportunities. *Annu. Rev. Food Sci. Technol.* 2019;10:173–195. doi: 10.1146/annurev-food-032818-121805. [\[DOI\]](#) [\[PubMed\]](#) [\[Google Scholar\]](#)

ARNOLD WA, BLUM A, BRANYAN J, BRUTON TA, CARIGNAN CC, CORTOPASSI G, DATTA S, DEWITT J, DOHERTY AC, HALDEN RU, HARARI H, HARTMANN EM, HRUBEC TC, IYER S, KWIATKOWSKI CF, LAPIER J, LI D, LI L, MUÑIZ ORTIZ JG, SALAMOVA A, SCHETTLER T, SEGUIN RP, SOEHL A, SUTTON R, XU L, ZHENG G. Quaternary Ammonium Compounds: A Chemical Class of Emerging Concern. *Environ Sci Technol.* 2023 May 23;57(20):7645-7665. doi: 10.1021/acs.est.2c08244. Epub 2023 May 8. PMID: 37157132; PMCID: PMC10210541.

BROOKS J.D., FLINT S.H. Biofilms in the food industry: Problems and potential solutions. *Int. J. Food Sci. Technol.* 2008;43:2163–2176. doi: 10.1111/j.1365-2621.2008.01839.x. [\[DOI\]](#) [\[Google Scholar\]](#)

BRUICE, Paula Yurkanis. Fundamentos de química orgânica. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2014.

ELENA P.; MIRI K. Formation of Contact Active Antimicrobial Surfaces by Covalent Grafting of Quaternary Ammonium Compounds. *Colloids Surf., B* 2018, 169, 195–205. 10.1016/j.colsurfb.2018.04.065.

GONI et al. Synthesis of a new quaternary ammonium salt for efficient inhibition of mild steel corrosion in 15% HCl: Experimental and theoretical studies. *Heliyon*, v. 10, n. 19, e38425, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e38425>

SILVA, Renato Augusto da. Aminoação redutiva de aldeídos e cetonas promovida por zinco em meio aquoso. 2006. 103 f. Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Departamento de Química Fundamental, Programa de Pós-Graduação em Química, Recife, 2006.

VERESHCHAGIN A. N.; FROLOV N. A.; EGOROVA K. S.; SEITKALIEVA M. M.; ANANIKOV V. P. Quaternary Ammonium Compounds (QACs) and Ionic Liquids (ILs) as Biocides: From Simple Antiseptics to Tunable Antimicrobials. *Int. J. Mol. Sci.* 2021, 22 (13), 6793. 10.3390/ijms22136793.

YUAN L., SADIQ F.A., BURMØLLE M., LIU T., He G. Insights into bacterial milk spoilage with particular emphasis on the roles of heat-stable enzymes, biofilms, and quorum sensing. *J. Food Prot.* 2018;81:1651–1660. doi: 10.4315/0362-028X.JFP-18-094.