

# ACETONITRILA (CAS No. 75-05-8)

por Fabrício Bracht

Data de publicação na Web: 05 de Abril de 2011

Recebido em 31 de Março de 2011

Aceito para publicação em 01 de Abril de 2011

DOI: [10.5935/1984-6835.20110006](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20110006)

▲ acetonitrila, também chamada de cianeto de metila, é um composto orgânico translúcido, inflamável, com temperatura de fusão e ebulição de -45 °C e 81,6 °C. A acetonitrila é miscível com água, metanol, acetatos de metila e etila, acetona, éter etílico, hidrocarbonetos insaturados, clorofórmio, tetracloreto de carbono e cloreto de vinila. Dissolve alguns sais inorgânicos, como nitrato de prata, nitrato de lítio e brometo de magnésio.<sup>1</sup>

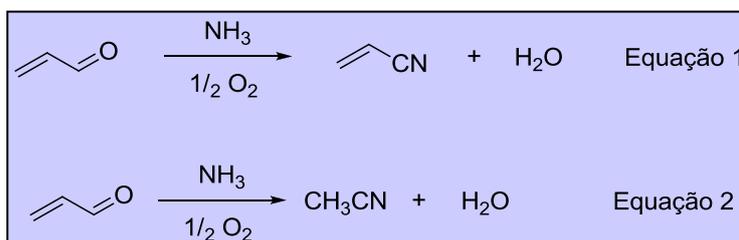
A síntese industrial da acetonitrila é feita a partir da produção preferencial pela amoxidação (processo industrial para a produção de nitrilas utilizando amônia e oxigênio) da acroleína. Um

precursor da acroleína pode ser usado sob condições específicas para que a quantidade de acetonitrila seja pelo menos o dobro da quantidade de acrilonitrila produzida.<sup>2</sup>

É bem conhecido que a oxidação da acroleína na presença de amônia leve à nitrila insaturada correspondente (Equação 1).<sup>3</sup>

Inúmeros trabalhos na literatura propõem a possibilidade de obter uma conversão completa, ou quase completa da acroleína em acrilonitrila.<sup>4</sup> No entanto, na descrição destes inúmeros processos, é mencionada sempre a existência de uma série de reações secundárias que levam à formação de pequenas quantidades de subprodutos, como: acetonitrila,

propionitrila e também vários alcoóis. A presença destes subprodutos impõe dificuldades para a separação e obtenção de acrilonitrila pura. Alguns destes compostos podem ser isolados em um grau de pureza satisfatório e são suficientemente valiosos para fazer com que o processo valha à pena. A acetonitrila é um destes subprodutos, mas nas condições de reação normalmente utilizadas, apenas uma pequena quantidade deste composto é produzida e, sendo assim, sua separação se torna difícil e custosa.<sup>2</sup>



O ajuste da metodologia tradicionalmente usada para produzir a acrilonitrila torna possível obter a acetonitrila como produto principal da reação (Equação 2).

A reação é realizada em fase vapor, a uma temperatura de 200°C a 350°C, na presença de quantidades de amônia usualmente maiores do que as utilizadas para a produção da acrilonitrila. Em reações de amoxidação para a produção de acrilonitrila, a proporção amônia/acroleína é de aproximadamente 1:1 até 1,1:1 e a temperatura é de aproximadamente 400°C. Diminuindo a temperatura e aumentando a proporção

amônia/acroleína, é possível produzir misturas com razões acetonitrila/acrilonitrila de pelo menos 2:1.<sup>2</sup> Contaminantes comuns na acetonitrila comercial incluem, acrilonitrila, H<sub>2</sub>O, acetamida, NH<sub>4</sub>OAc e NH<sub>3</sub>.<sup>5</sup>

Apesar de nitrilas serem amplamente usados na síntese de aminas, amidas, cetonas, aldeídos e uma variedade de outros compostos, a acetonitrila é usada principalmente como solvente em técnicas como cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE).<sup>6</sup>

A acetonitrila apresenta um perfil tóxico por diversas vias de absorção e é um agente teratogênico. Efeitos sistêmicos em humanos causados pela ingestão deste composto incluem: convulsões, náusea ou vômito e acidose metabólica.<sup>7</sup> O vapor de acetonitrila é prontamente absorvido pelo trato respiratório e é metabolizado principalmente pelo fígado. O metabolismo resulta na formação de cianeto e tiocianato, com a possível formação de ácido fórmico e formaldeído.<sup>8</sup>

## Referências bibliográficas

<sup>1</sup> O'Neil, M. J.; *Merck Index*, 14<sup>a</sup> ed., Merck: Whitehouse Station, NJ, 2006.

<sup>2</sup> Borrel, M.; Marion, J.; Metzger, J.; *Production of Acetonitrile. US Patent 3725457 1973*.

- <sup>3</sup> Adams, C. R.; Jennings, T. J. J. *Catal.* **1963**, 2, 63. [CrossRef]
- <sup>4</sup> James, H. D.; Albin, W. C.; *US Patent 3009943* **1961**.
- <sup>5</sup> Armarego, W. L. F; Chai, C.; *Purification of Laboratory Chemicals*, 6<sup>a</sup> ed., Elsevier Inc, 2009.
- <sup>6</sup> Sadek, P. C.; *The HPLC Solvent Guide*, 2<sup>a</sup> ed., John Wiley and Sons, Inc., Publications., 2002.
- <sup>7</sup> Lewis, R. J.; *SAX'S Dangerous Properties of Industrial Materials*, 9<sup>a</sup> ed., Van Nostrand Reinhold: US, 1996.
- <sup>8</sup> Greenberg, M.; *Toxicological Review of Acetonitrile*, U.S. Environmental Protection Agency Washington, DC, 1999.

### Acetonitrile (CAS No. 75-05-8)

**Abstract:** This paper reviews data regarding the industrial synthesis of acetonitrile. Alongside are some detailed data on toxicity, purity, physicochemical properties and the use of this solvent.

**Keywords:** organic synthesis; solvents; acetonitrile; industrial synthesis.

**Resumo:** Esta publicação revisa dados a respeito da síntese industrial da acetonitrila. Juntamente estão detalhados alguns dados sobre a toxicidade, pureza, propriedades físico-químicas bem como o uso deste solvente.

**palavras-chave:** síntese orgânica; solventes; acetonitrila; síntese industrial.



✉ bracht@iq.ufrj.br

Universidade Federal do Rio de Janeiro, IQ - LABMMOL. Centro de Tecnologia, Instituto de Química, Bloco A, Sala 609, Ilha do Fundão, 21941-902 - Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

*Fabrício Bracht é bolsista de Doutorado do programa de pós graduação em química da UFRJ. Possui graduação em Farmácia pela Universidade Estadual de Maringá (2006). Obteve seu título de mestre pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (2010). Têm experiência na área de bioquímica, metabolismo e energética com ênfase em metabolismo hepático e química computacional, atuando nos seguintes temas: metabolismo hepático em ratos do NAD<sup>+</sup> extracelular, gliconeogênese, eicosanoides e artrite, modelagem molecular, dinâmica molecular e cálculo de energia livre. Teve ingresso no curso de doutorado em química pelo Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, onde desenvolve sua tese na área de química computacional e bioquímica Laboratório de Físico-Química Orgânica e Modelagem Molecular (LABMMOL).*