

ACETONA (CAS No. 67-64-1)

por Walcimar T. Vellasco Júnior

Data de publicação na Web: 6 de Outubro de 2011

Recebido em 27 de Agosto de 2011

Aceito para publicação em 25 de Setembro de 2011

DOI: [10.5935/1984-6835.20110037](https://doi.org/10.5935/1984-6835.20110037)

▲ acetona, também conhecida como dimetilcetona, 2-propanona, propano-2-ona, β-ceto-propano ou simplesmente propanona é um líquido volátil, altamente inflamável, com odor e sabor característicos e fórmula $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$. Tem peso molecular de $58,08 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$, pK_a 24,2, ponto de fusão $-94 \text{ }^\circ\text{C}$, ponto de ebulição $56,5 \text{ }^\circ\text{C}$ e ponto de fulgor $-18 \text{ }^\circ\text{C}$. A densidade é menor do que a da água ($0,788 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ medida em $25 \text{ }^\circ\text{C}$). A acetona é miscível com água, alcoóis de baixo peso molecular (metanol, etanol, propanol, 2-propanol), dimetilformamida, clorofórmio, éter e muitos óleos.¹ Foi obtida pela primeira vez em 1595, a partir da destilação, sob baixa pressão ("dry distillation"), do acetato de chumbo por Libavius. No entanto, sua fórmula molecular só foi corretamente determinada em 1832 por Liebig e Dumas.²

A produção industrial da acetona teve início na Primeira Guerra Mundial, e só foi possível com o desenvolvimento de um processo fermentativo a partir de carboidratos, feito por Chaim Weizmann, um químico russo que mais tarde tornou-se o primeiro presidente do Estado de Israel (1948-1952). Neste processo, Weizmann utilizou uma bactéria ainda desconhecida, que depois foi identificada como sendo a *Clostridium acetobutylicum* (Figura 1).³



Figura 1. Bacilos de *C. acetobutylicum* (Reprodução da ref. 3b com autorização. Copyright© 2006 National Academy of Sciences, E.U.A.)

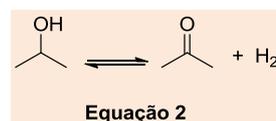
Em 2010, a produção mundial de acetona foi de aproximadamente 5,5 milhões de toneladas, com uma expectativa de crescimento de 3-4% ao ano.^{4,5} Atualmente, a maior parte da produção industrial da acetona é feita partir do propileno. Este processo, denominado Processo Hock (Figura 2), foi desenvolvido, em 1944, por Hock e Lang.

No processo Hock, o benzeno reage com o propileno (reação de alquilação) na presença de H_3PO_4 como catalisador. Na sequência o isopropilbenzeno – também denominado cumeno – formado é oxidado pelo oxigênio do ar,

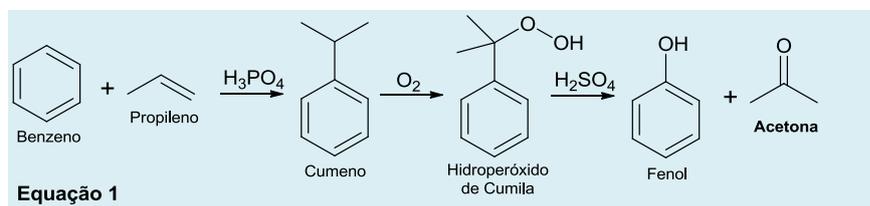
gerando o hidroperóxido de cumila, que em presença de ácido sulfúrico é clivado à acetona e fenol (Equação 1).⁶

O curioso deste processo é que seu objetivo principal é a obtenção do fenol, apesar de cerca de 80% da acetona produzida nos EUA, em 2010, ter sido obtida desta forma.⁶ No Brasil as principais empresas produtoras de acetona são a Rhodia (SP) e a Quiminvest (RJ).⁷ Ambas usam este processo para produzirem acetona e fenol.

Este processo vem sendo amplamente utilizado em substituição à desidrogenação do 2-propanol. As indústrias que ainda utilizam este álcool como matéria-prima, podem seguir o processo em fase líquido ou em fase gás. Entretanto, em ambos os casos, além da formação da acetona há a geração de gás hidrogênio⁸ conforme demonstrado na Equação 2.



No processo em fase líquido, a reação ocorre à temperatura de 150°C utilizando níquel de Raney como catalisador. Este processo



Processo Hock – Oxidação do Cumeno

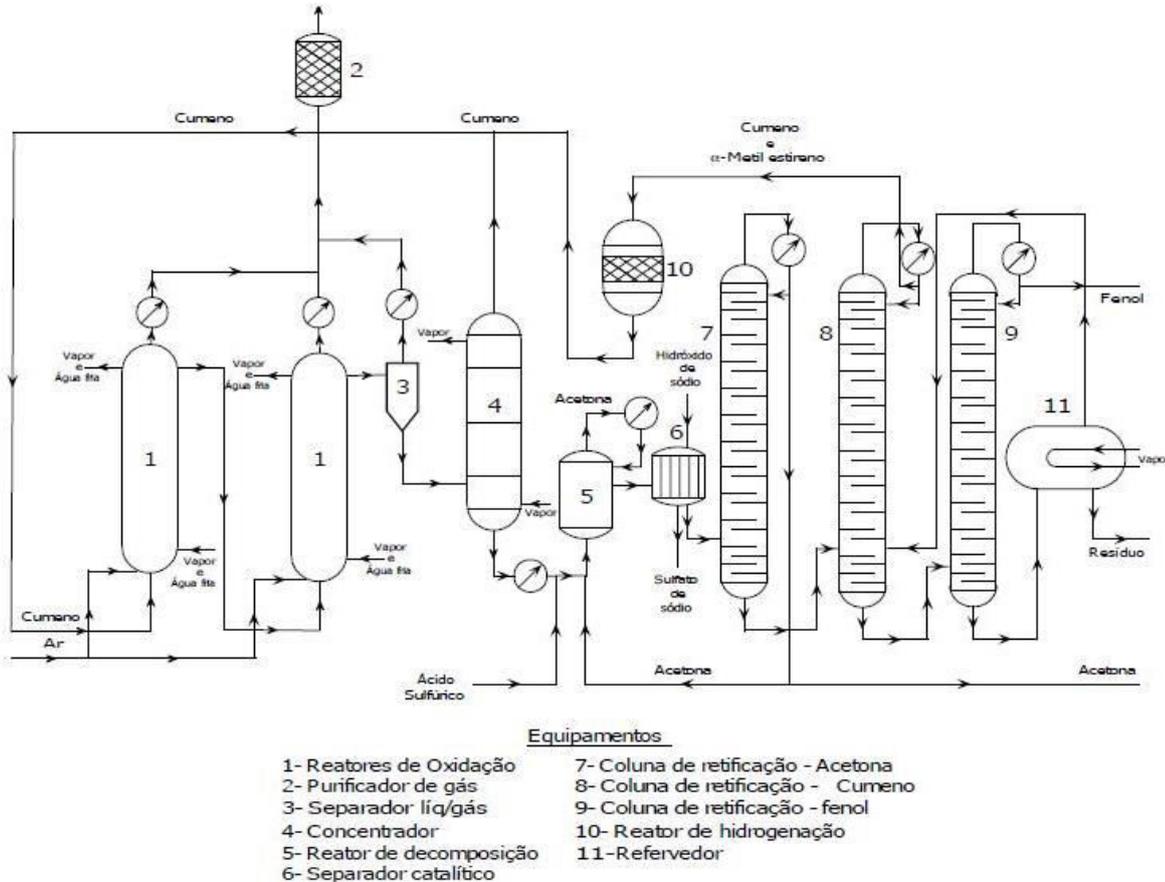


Figura 2. Planta industrial de utilização do processo Hock para obtenção de acetona (Reprodução da ref. 7 com autorização. Copyright© 2006 National Academy of Sciences, E.U.A)

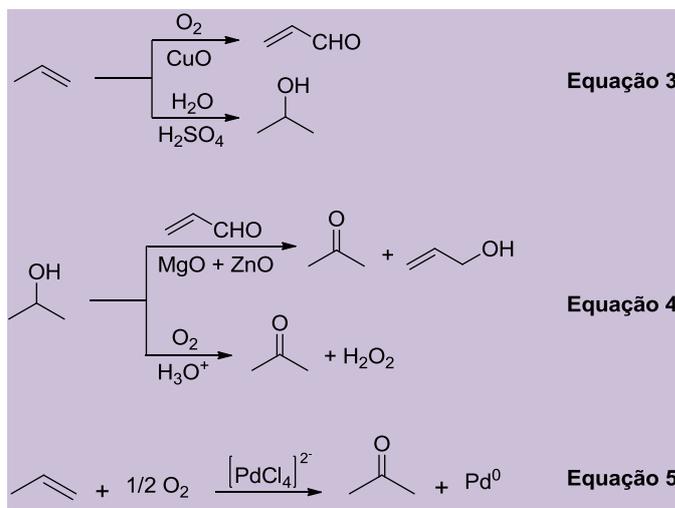
apresenta como vantagens a alta

pureza dos produtos e o rendimento em torno de 98%. Já o processo em fase gás ocorre em temperaturas mais elevadas (300-400°C) e utiliza catalisadores de cobre ou zinco. Além disso, a manutenção da temperatura na faixa ideal é dificultada e os rendimentos ficam na casa de 90%, o que muitas vezes torna necessária a utilização de três colunas adicionais para separar a acetona do azeótropo formado com o 2-propanol a ser reciclado.⁸

Ainda tendo como base o 2-propanol, a acetona pode ser

obtida mediante sua oxidação em um processo que foi utilizado, até 1980, pela Shell Chemical. Assim como no processo Hock, o

óxido de cobre como catalisador enquanto a outra parte era hidratada, em meio sulfúrico, à 2-propanol (Equação 3).⁸



principal objetivo da indústria não era a obtenção da acetona, mas obter glicerina a partir de propileno. Uma parte do propileno era oxidada à acroleína utilizando

Em uma etapa posterior utilizando como catalisadores óxidos de magnésio e zinco, a acroleína reage com parte do 2-propanol produzindo acetona e álcool alílico e a parte restante de 2-propanol é oxidada em meio levemente acidificado, produzindo acetona e peróxido de hidrogênio (Equação 4), que juntamente ao álcool alílico seguem no processo para obtenção da glicerina.⁸

A acetona pode ser obtida ainda pela oxidação de olefinas

com cloreto de paládio como catalisador (Equação 5).⁹ Este processo, conhecido como Wacker-Hoechst, originalmente foi utilizado para a formação do acetaldeído a partir do etileno no final da década de 1950 e marcou o início da utilização de paládio como catalisador de reações orgânicas, culminado inclusive com os acoplamentos de Heck e de Suzuki, ambos vencedores do prêmio Nobel de Química de 2010 com seus trabalhos de formação de ligação carbono-carbono.¹⁰

Um dos maiores inconvenientes industriais deste processo, a geração do paládio metálico, foi prontamente resolvida pelos próprios inventores do método. Todo o metal gerado no meio é totalmente recuperado através de

uma reação de oxirredução com cloreto cúprico, assim como o reagente de cobre utilizado nesta etapa, uma vez que o cloreto cuproso produzido é rapidamente oxidado em presença de ácido clorídrico (Equação 6).¹¹ Assim, este processo de obtenção da acetona torna-se cíclico, algo extremamente atraente para um processo industrial.

A acetona é um reagente de extrema utilidade e uma das suas principais aplicações industriais é na síntese do bisfenol **A**, uma matéria-prima importante para a obtenção de plásticos de policarbonato e resinas epóxi, que estão presentes na constituição desde garrafas plásticas até automóveis.¹² A síntese do bisfenol **A** envolve um equivalente de

acetona e dois equivalentes de fenol, sob catálise de ácido clorídrico, gerando, além do produto desejado apenas água (Equação 7),¹³ o que torna este processo bastante atrativo.

Outra importante aplicação industrial da acetona é a síntese do metacrilato de metila. O processo (Equação 8) data de 1930¹⁴ e utiliza ácido cianídrico na primeira etapa, quando é produzida a acetona cianidrina. Na sequência, a adição de ácido sulfúrico em 140°C e posterior metanolise levam ao produto que

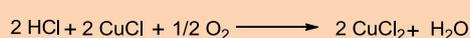
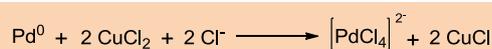
laboratórios de síntese orgânica que é a condensação aldólica. Após a reação de condensação, segue uma desidratação e posterior hidrogenação utilizando paládio como catalisador.^{6,16,17}

A capacidade de realizar condensações aldólicas da acetona também é explorada para a obtenção de derivados da dibenzilidenoacetona (Equação 10), eficazes como agentes de imagem para o diagnóstico da doença de Alzheimer devido a sua afinidade pelas placas β -amilóides que são características da doença.¹⁸

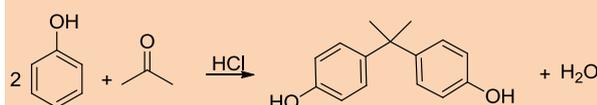
Outra aplicação em laboratórios de síntese é a sua utilização como agente protetor de grupos hidroxila, formando acetais. Esta propriedade é bastante empregada

para a derivatização seletiva de carboidratos, em especial do manitol, na busca de novos agentes com potencial atividade biológica.^{19,20}

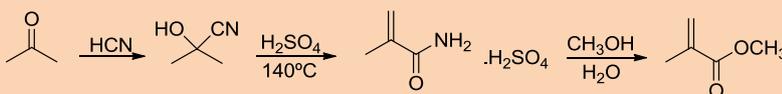
Um estudo recente também demonstrou que a acetona é uma matéria-prima interessante na construção de novos *N*-cloro-heterociclos com potencial atividade antimicrobiana.²¹ Na primeira etapa do processo, onde ocorre efetivamente a construção do heterociclo, 100% da acetona utilizada é consumida após oito horas de reação com acetonitrila, sulfeto e cloreto de amônio em água a 80 °C (Equação 12).



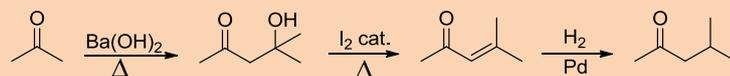
Equação 6



Equação 7



Equação 8

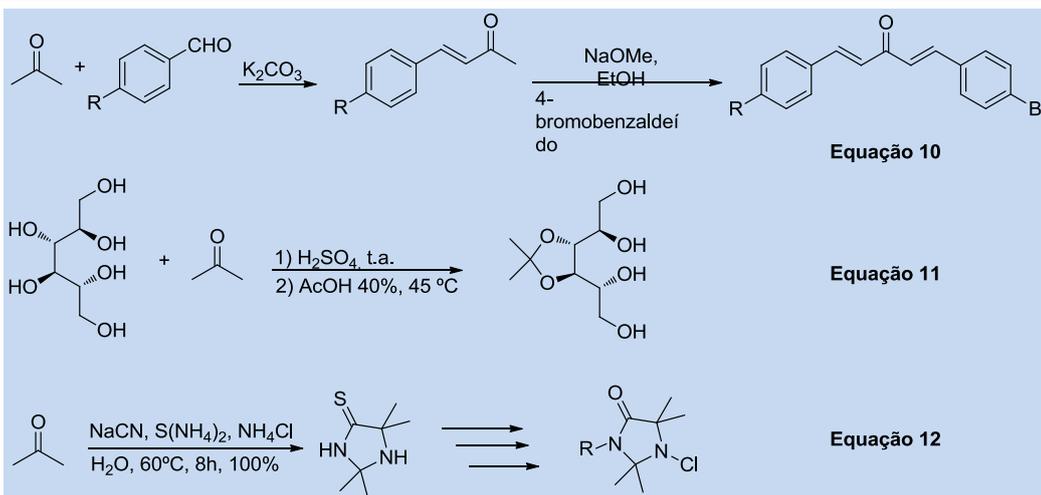


Equação 9

é o monômero constituinte do acrílico.

Um ponto favorável desta rota sintética reside justamente na obtenção do intermediário acetona cianidrina, que tem grande aplicação na síntese de inseticidas, produtos farmacêuticos e agentes flavorizantes. Além disso, assim como outras cianidrinhas são bastante utilizadas na obtenção de diversas classes de compostos orgânicos como aminonitrilas, α -hidroxiácidos, ésteres e β -aminoálcoois.¹⁵

Ainda na indústria química, a acetona também é utilizada na produção de metil-isobutilcetona (Equação 9). O processo clássico utiliza uma das principais formas de aplicação da acetona em



Disponível em: <http://www.dequi.ee.usp.br/~barcza/Oxidacao.pdf>. Acesso em: 21 junho 2011.

⁸ Chauvel, A. Em *Petrochemical Process Technical And Economic Characterisitcs*; Chauvel, A.; Lefebvre, G., eds; Institut Français du Pétrole Publications: Paris, 1989, cap. 10.

A acetona é utilizada como solvente na fabricação de tintas e vernizes e na indústria farmacêutica na produção de esmaltes e como principal constituinte de produtos removedores de esmaltes. Ainda é utilizada como agente estabilizante do acetileno, sendo este gás transportado de forma segura apenas quando dissolvido em acetona em cilindros de aço.²² É um produto irritante, podendo provocar eritema ou ressecamento da pele em contatos prolongados ou repetidos. Já o contato pelas vias aéreas pode provocar dor de cabeça, fadiga, excitação, irritação bronquiolar e em grandes quantidades narcose, entretanto, casos de envenenamentos severos com este solvente são raros. A DL_{50} em ratos é de 10,7 mL/kg por via oral¹. Apesar de seus efeitos tóxicos, a acetona também ocorre de forma natural no organismo humano, sendo um dos subprodutos da degradação dos ácidos graxos para a obtenção de energia em casos de jejum prolongado. Ela é detectada na primeira urina da manhã de cerca de 30% dos indivíduos em jejum, porém seus níveis encontram-se elevados em pacientes diabéticos, sendo um dos principais marcadores biológicos desta doença.²³

¹ O'Neil, M. J.; *The Merck Index*, 14^a ed., Merck: New Jersey, 2006.

² Miller, R. J. Em *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 2nd ed., vol. 1, Interscience Publishers, New York, 1963. Andreas Libavius (1540-1616) foi um médico e alquimista saxão, luterano ortodoxo, anticalvinista e ferrenho opositor das ideias de Paracelso. Autor da obra *Alchymia* (1597), considerada o primeiro manual de química moderna da Europa. Reeditado em 1606, foi o primeiro livro sistemático de química que incluiu instruções para a preparação de diversos ácidos fortes.

³ a) Weizmann, C.; Hamlyn, A. *U.S. Pat.* 1,329,214, **1920**; [Link] b) Sítio da Edimburgh Napier University. Disponível em: <http://www.napier.ac.uk/randkt/rktcentres/bfrc/Pages/ABEhistory.aspx> Acesso em: 21 junho 2011.

⁴ Sítio do SRI Consulting. Disponível em: <http://www.sriconsulting.com/WP/Public/Reports/acetone> Acesso em: 14 setembro 2011.

⁵ Sítio do Chemical Industry News & Intelligence. Disponível em: <http://www.icis.com/v2/chemicals/9074858/acetone/uses.html> Acesso em 14 setembro 2011.

⁶ Sifniades, S.; Levy, A. B. Em *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

⁷ Barcza, M. V., *Processos Unitários Orgânicos – PU191 – Oxidação*.

⁹ Smidt, J.; Hafner, W.; Jira, R.; Sedlmeier, J.; Sieber, R.; Rüttinger, R.; Kojer, H. *Angew. Chem.* **1959**, *71*, 176. [CrossRef]

¹⁰ Sítio do Prêmio Nobel em Química. Disponível em: http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2010/. Acesso em: 26 junho 2011.

¹¹ Keith, J. A.; Henry, P. M. *Ang. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 9038. [CrossRef]

¹² Sítio do Bisphenol-A. Disponível em: <http://www.bisphenol-a.org/>. Acesso em: 29 junho 2011.

¹³ Zincke, T. *Justus Liebigs Ann. Chem.* **1905**, *343*, 75. [CrossRef]

¹⁴ Bauer Jr, W. Em *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

¹⁵ Sítio do Chemicaland21. Disponível em: <http://chemicaland21.com/industrialchem/organic/ACETONE%20CYANOHYDRIN.htm>. Acesso em: 27 setembro 2011.

¹⁶ Conant, J. B.; Tuttle, N. *Org. Synth.* **1941**, *Coll. Vol. 1*, 199. [Link]

¹⁷ Conant, J. B.; Tuttle, N. *Org. Synth.* **1941**, *Coll. Vol. 1*, 345. [Link]

¹⁸ Cui, M.; Ono, M.; Kimura, H.; Liu, B.; Saji, H. *J. Med. Chem.* **2011**, *54*, 2225. [CrossRef] [PubMed]

¹⁹ Oliveira, P. S. M.; Ferreira, V. F.; Souza, M. V. N. *Quim. Nova* **2009**, *32*, 2042. [CrossRef]

²⁰ Ferreira, M. L.; Vasconcelos, T. R. A.; Carvalho, E. M.; Lourenço, M. C.

S.; Wardell, S. M. S. V.; Wardell, J. L.; Ferreira, V. F.; Souza, M. V. N. *Carb. Res.* **2009**, *344*, 441-452. [CrossRef] [PubMed]

²¹ Francavilla, C.; Turtle, E. D.; Kim, B.; O'Mahony, D. J. R.; Shiau, T. P.; Low, E.; Alvarez, N. J.; Celeri, C. E.; D'Lima, L.; Friedman, L. C.; Ruado, F. S.; Xu, P.; Zuck, M. E.; Anderson,

M. B.; Najafi, R.; Jain, R. K. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21*, 2029. [CrossRef]

²² Sítio da Indústria Brasileira de Gases. Disponível em: <<http://www.ibg.com.br/portal/pdf/Acetileno.pdf>>. Acesso em: 29 junho 2011.

²³ Gross, J. L.; Silveiro, S. P.; Camargo, J. L.; Reichelt, J. L.; de Azevedo, M. J. *Arq. Bras. Endocrinol. Metab.* **2002**, *46*, 16. [CrossRef]

Acetone (CAS No. 67-64-1)

Abstract: The present manuscript reviews the industrial synthesis of acetone. It also presents some detailed data about toxicity, purity, physical-chemical properties and applications of this solvent.

Keywords: acetone; industrial synthesis; physical-chemical properties; solvent.

Resumo: Este trabalho apresenta uma revisão da síntese industrial da acetona. Também estão detalhados alguns dados sobre a toxicidade, pureza, propriedades físico-químicas, bem como aplicações desse solvente.

palavras-chave: acetona; síntese industrial; propriedades físico-químicas; solvente.



Universidade Federal Fluminense, IQ – HETBIO. Instituto de Química, Pós-Graduação em Química, Outeiro de São João Batista, s/nº Campus Valonguinho, 24020-150, Niterói-RJ, Brasil.

Walcimar Trindade Vellasco Júnior é bolsista de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal Fluminense onde desenvolve sua tese na área de Síntese Orgânica no Laboratório de Heterociclos Bioativos (HETBIO). Possui mestrado em Química pela Universidade Federal Fluminense (2010), graduação em Farmácia Industrial pela Universidade Federal Fluminense (2006) e graduação em Farmácia-Bioquímica pela Universidade Federal Fluminense (2010). Tem experiência na área de Química, com ênfase em Síntese Orgânica e Química Medicinal, atuando principalmente nos seguintes temas: inibidores de protease, antimalarial, antimicrobiano, hidroxietilmercaptoazóis, heterociclos e oxatiolonas.

✉ walcimar@vm.uff.br