

Métodos de Preparação Industrial de Solventes e Reagentes Químicos**Isopropanol (CAS 67-63-0)****Gomes, G. C. C.****Rev. Virtual Quim.*, 2016, 8 (6), 2138-2146. Data de publicação na Web: 30 de dezembro de 2016<http://rvq.s bq.org.br>**Isopropanol (CAS 67-63-0)**

Abstract: Isopropanol or isopropyl alcohol is a liquid, colorless substance, with molecular formula C_3H_8O , molecular mass $60,10 \text{ g mol}^{-1}$, soluble in water, many other alcohols and organic solvents. Isopropanol global market consists in a production of almost 3 million tons per year, having its production and consumption focused on USA and Asia. Its industrial production goes back to the 1940's, when the first synthesis methodology was created, and an alternative route being presented only in 1951. Nowadays, production counts with efficient methods, obtaining up to 90% yield, due to all synthetic routes, patented or not, or using biosynthesis.

Keywords: Isopropanol; Isopropyl alcohol; industrial synthesis.

Resumo

O isopropanol ou álcool isopropílico é uma substância líquida, incolor, com fórmula molecular C_3H_8O , massa molecular $60,10 \text{ g mol}^{-1}$, solúvel em água, vários outros álcoois e solventes orgânicos. O mercado global de isopropanol consiste em uma produção de quase 3 milhões de toneladas por ano, tendo sua produção e utilização concentradas nos Estados Unidos e Ásia. A produção industrial remonta aos anos de 1940, onde foi criada a primeira metodologia de síntese, com uma rota alternativa apresentada apenas em 1951. Hoje em dia, a produção conta com métodos eficazes, tendo até 90% de rendimento, seja por métodos totalmente sintéticos, patenteados ou não, ou a partir de biossíntese.

Palavras-chave: Isopropanol; álcool isopropílico; síntese industrial.

* Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Outeiro de São João Batista s/n, Campus do Valonguinho, Centro, CEP 24020-150, Niterói-RJ, Brasil.

✉ gabrielccgomes@gmail.com

DOI: [10.21577/1984-6835.20160142](https://doi.org/10.21577/1984-6835.20160142)

Isopropanol (CAS 67-63-0)

Gabriel Camelo Cunha Gomes *

Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Outeiro de São João Batista s/n,
Campus do Valonguinho, Centro, CEP 24020-150, Niterói-RJ, Brasil.

* gabrielccgomes@gmail.com

Recebido em 24 de junho de 2016. Aceito para publicação em 28 de dezembro de 2016

1. Introdução
2. Síntese industrial
3. Toxicidade
4. Aplicações

1. Introdução

Isopropanol, também conhecido como álcool isopropílico, 2-propanol ou pelo nome oficial, propan-2-ol, é uma substância líquida incolor, com odor característico de álcoois, inflamável e explosivo. Com fórmula C_3H_8O ,

massa molecular 60,10 g/mol, densidade de 0,786 g mL⁻¹ a 20 °C, ponto de fusão igual a -90 °C, ponto de ebulição igual a 82,6 °C, ponto de fulgor no valor de 12°C, pKa 16,5, solúvel em água e vários outros álcoois, dimetilformamida, clorofórmio, éter, glicerina, benzeno e acetona.¹



Figura 1. Estrutura molecular do isopropanol

O mercado global de isopropanol tem uma produção total que chega aos 2,7 milhões de toneladas por ano, sendo um terço deste valor produzido pelos Estados Unidos, com 840 mil toneladas por ano, seguido de perto pela Ásia com 800 mil toneladas por ano. Em questão de consumo, a Ásia lidera utilizando 780 mil toneladas por ano. As maiores indústrias produtoras de isopropanol são a Royal Dutch Shell PLC (Holanda), ExxonMobil Chemical Company

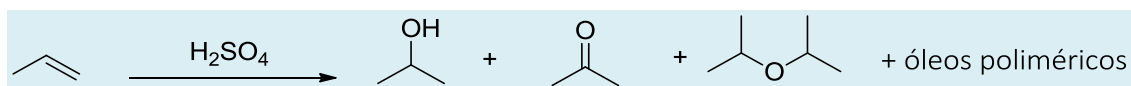
(EUA), Dow Chemical Company (EUA) e Sasol Ltd. (África do Sul).^{2,3}

2. Síntese industrial

A produção de isopropanol remonta aos anos de 1940, onde foi utilizada a primeira metodologia de produção, que consistia na

hidratação do propeno, também chamado de propileno, em duas etapas. Só em 1951, uma metodologia alternativa foi apresentada onde reagia-se o propileno com ácido sulfúrico 60%, hidrolisando o reagente em

apenas uma etapa. Extraía-se e purificava-se o isopropanol de outros subprodutos, como éter diisopropílico, acetona e óleos poliméricos de baixa massa molecular.^{4,5}



Esquema 1. Formação de isopropanol utilizando ácido sulfúrico

A síntese industrial de isopropanol possui vários métodos de obtenção. Muitos já protegidos por patentes há décadas e alguns com propriedade intelectual já acessível ou por meio de tecnologia inovadoras, seja por síntese orgânica ou síntese bioorgânica. A maioria das patentes são referentes à formação de isopropanol a partir da acetona

produzida na metodologia de obtenção do cumeno, como apresentadas nos esquemas 2 e 3^{6,7,8}, mas também há outras a partir de biossíntese, utilizando enzimas geneticamente modificadas oriundas de bactérias do gênero *Clostridium* adicionadas ao processo de formação como por exemplo, na figura a seguir:⁹

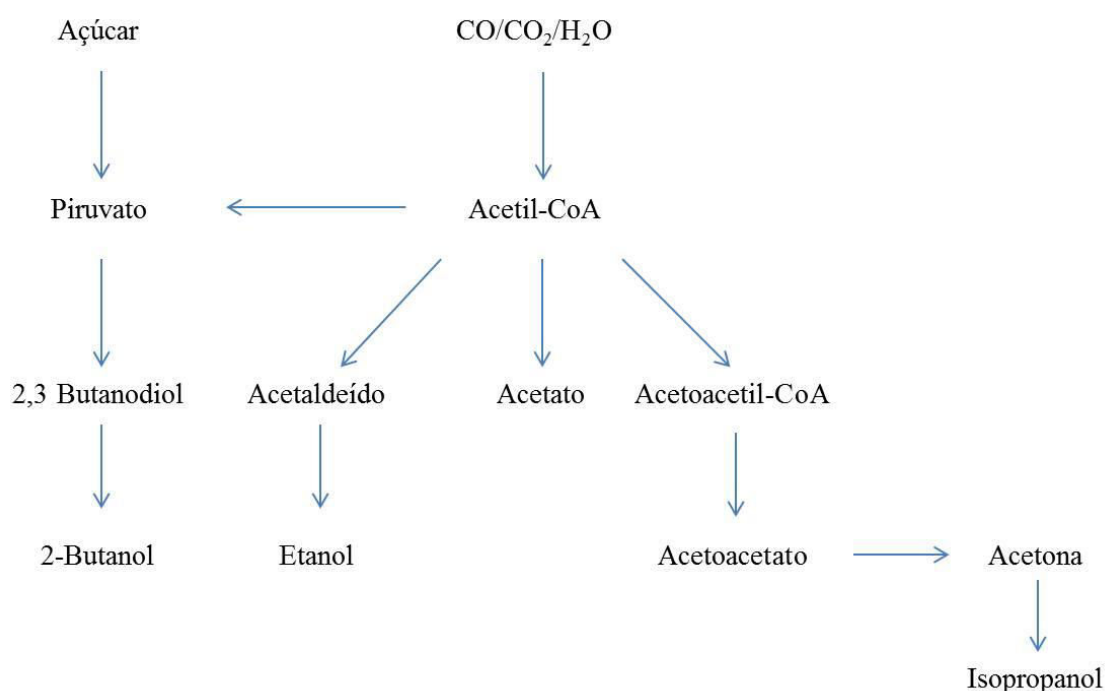
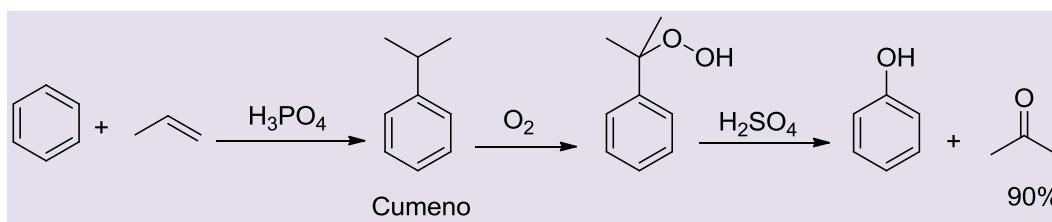


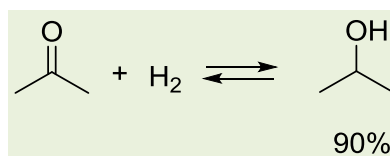
Figura 2. Formação de isopropanol por enzimas geneticamente alteradas

Outra metodologia empregada na preparação do isopropanol, utiliza a acetona oriunda da produção industrial. A acetona obtida na manufatura do fenol, também pode ser usada. As etapas reacionais consistem na produção do cumeno, com

posterior oxidação do mesmo, gerando a acetona e, por fim, há a hidrogenação da acetona utilizando níquel de Raney, formando isopropanol. Apesar da acetona não ser o produto principal desta reação, condiz com 80% da produção nos EUA.¹⁰



Esquema 2. Formação de acetona a partir do cumeno

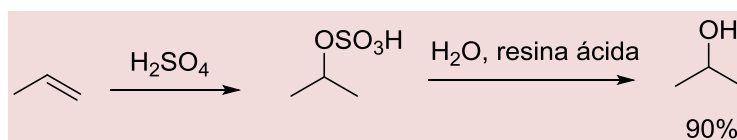


Esquema 3. Obtenção do isopropanol a partir da acetona

Alternativamente ao uso do níquel de Raney, estudos com paládio semico e poroso demonstram um aumento de eficiência na hidrogenação da acetona na ordem de 10^6 além de uma opção menos nociva ao meio ambiente.¹¹

Outras duas metodologias mais utilizadas e mais antigas na indústria química, como citado anteriormente, consistem na

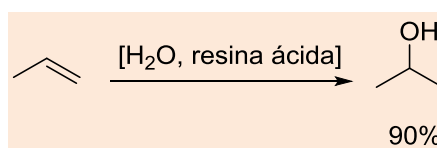
hidratação do propileno, seja em duas etapas ou em apenas uma. O método de duas etapas consiste na hidrogenação do propileno com ácido sulfúrico, formando mono ou diisopropilidrogenosulfato, com posterior hidrólise usando uma resina ácida de poliestireno para formar isopropanol, com rendimento de 90%.^{12,13}



Esquema 4. obtenção do isopropanol a partir da resina ácida em duas etapas

Já o método de apenas uma etapa consiste no uso da resina ácida de poliestireno para hidratar diretamente o

propileno a isopropanol. Pode-se utilizar fase gasosa com ácido fosfórico, ou fase líquida com um catalisador de tungstênio.⁴



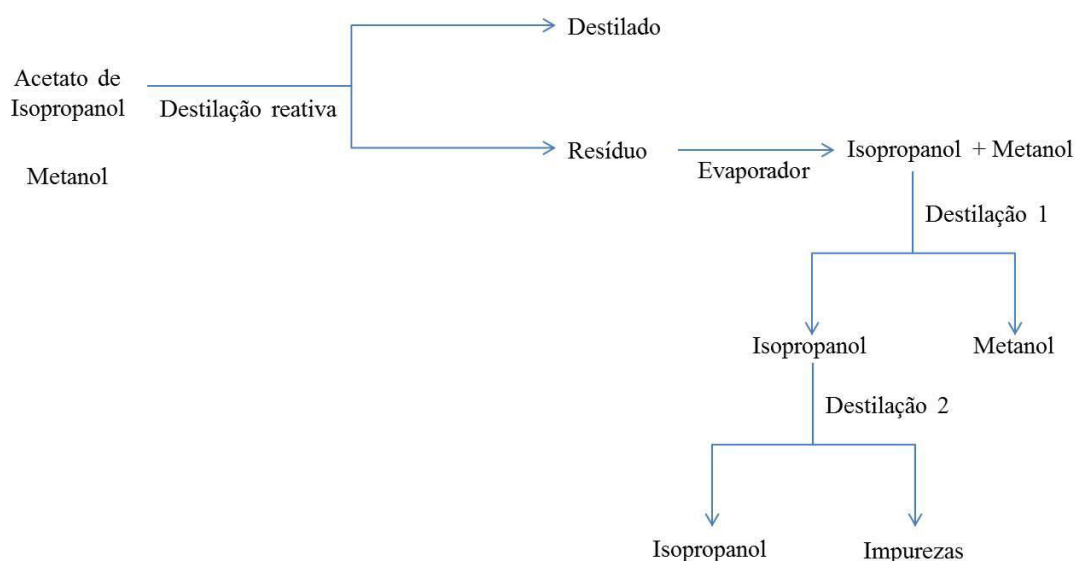
Esquema 5. obtenção do isopropanol a partir da resina ácida em uma etapa

Outros métodos de obtenção de metanol são pesquisados, a fim de obter uma produção ambientalmente sustentável e

financeiramente interessante. Um destes métodos faz uso de uma destilação reativa, que consiste em ter um solvente para

destilação ao mesmo tempo que ele atua como reagente, para produção através de transesterificação de acetato de isopropila

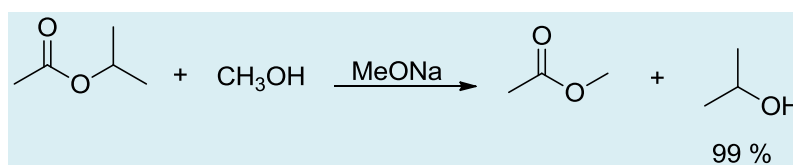
com metanol usando metóxido de sódio como catalisador.¹⁴



Esquema 6. Esquema geral do processo de obtenção do isopropanol

Nesta metodologia, o acetato de isopropila é inserido junto com o metanol e o metóxido de sódio na coluna de destilação reativa. Ao se separar o destilado do resíduo, este é evaporado, obtendo-se isopropanol e

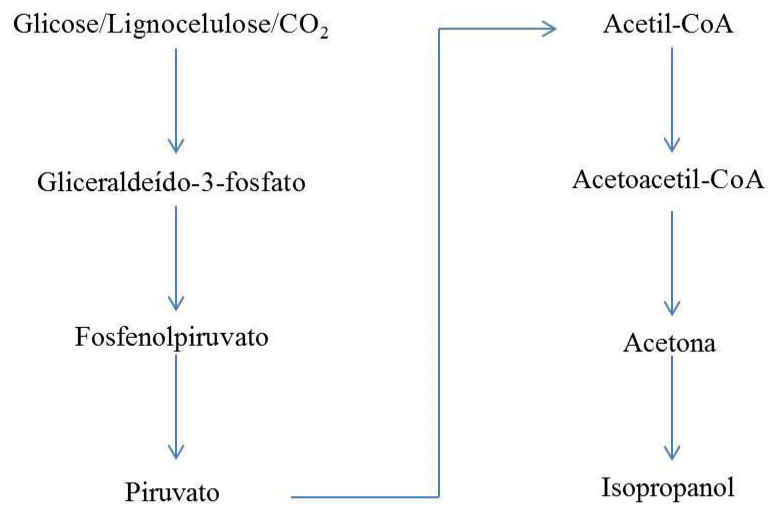
resquícios de metanol, que são separados por uma coluna de destilação. Para fins de purificação, o isopropanol é submetido a outra coluna de destilação, obtendo, assim, um rendimento de 99%.



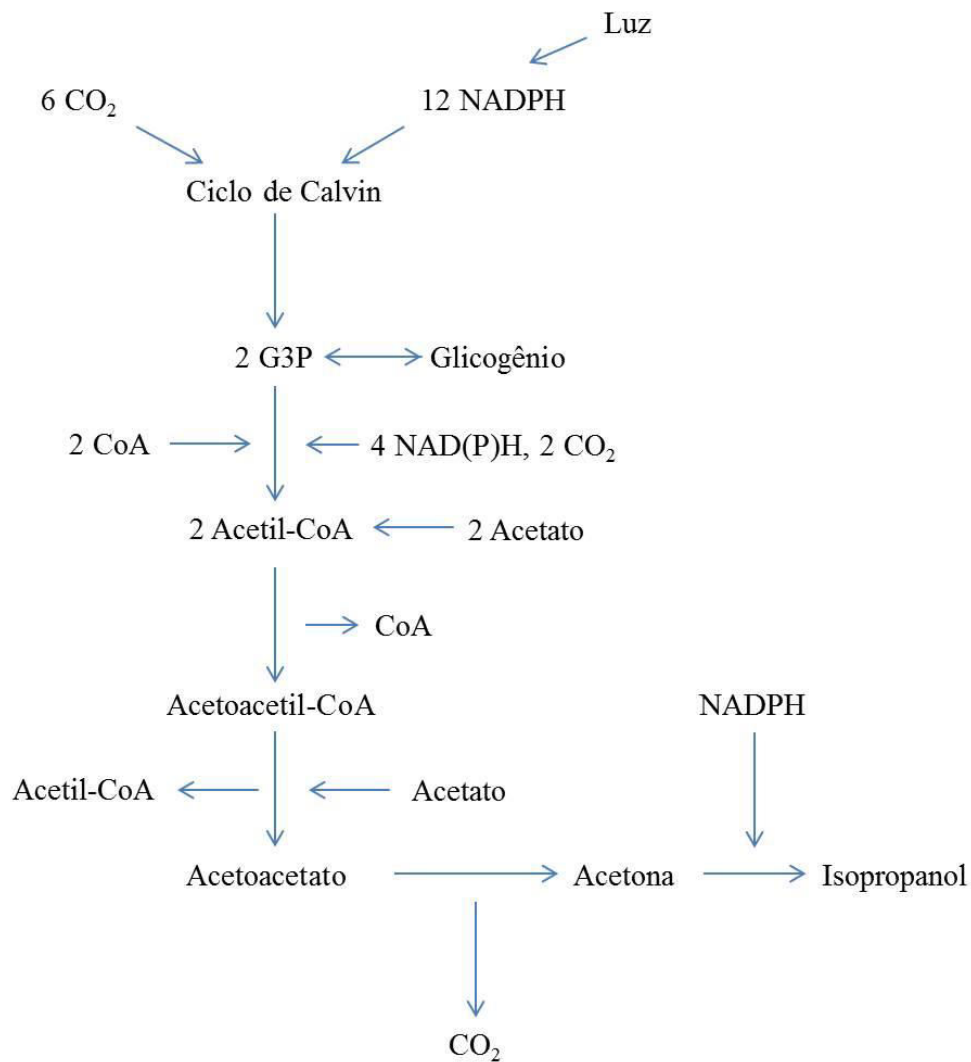
Esquema 7: esquema de produção de isopropanol a partir de acetato de isopropila

Além dos métodos de síntese citados, há numerosos meios utilizando bioengenharia de bactérias visando a obtenção do isopropanol como produto final ou até subproduto. A grande maioria alterando, ativando ou até mesmo implantando geneticamente o gene NRRL B593 (*adh*) utilizando a via do acetyl-Coenzima A para produzir acetona e posterior hidrogenação, gerando isopropanol. Estudos com

cianobactérias *Synechococcus elongatus* com este gene implantado oriundo da bactéria *Clostridium acetobutylicum* visam uma produção utilizando apenas dióxido de carbono e energia luminosa, com resultado produtivo de 26,5 mg L⁻¹ de isopropanol em 9 dias.¹⁵ Outro exemplo é o estudo do uso de procariontes em meio de glicose, lignocelulose e CO₂ para produção de biodiesel, incluindo o isopropanol.¹⁶



Esquema 8. Bioprodução do isopropanol a partir de cianobactérias



Esquema 9. Bioprodução do isopropanol a partir de procariontes

3. Toxicidade

A toxicidade do isopropanol é considerada baixa em seres humanos, já que é convertido rapidamente em acetona, produto natural de processos metabólicos corpóreos. Excesso de exposição pode causar irritação aos olhos, nariz e garganta, assim como pode causar depressão do sistema nervoso central. Estes efeitos não exibem perigo porque são modestos e podem ser cessados com o término de exposição.² O perigo toxicológico está associado à produção, especificamente na metodologia do ácido sulfúrico, uma vez que este causa câncer no trato respiratório superior por excesso de contato.^{4,5}

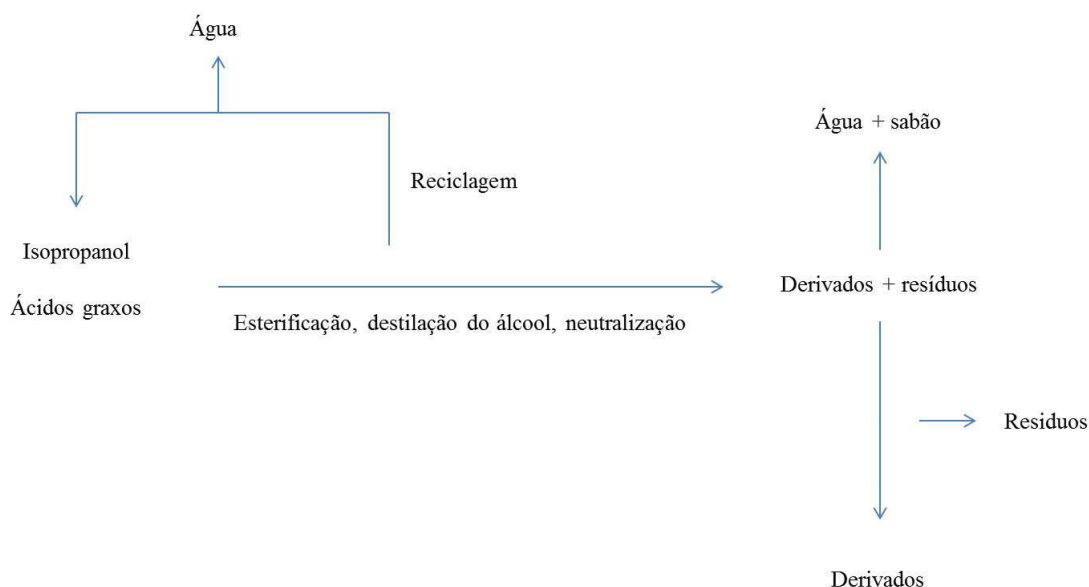
4. Aplicações

As utilidades do isopropanol são bem versáteis. Como solvente, possui uma vasta amplitude de utilização, por exemplo, solvente de processos (extração, purificação, cristalização, carreador, etc.), agente de limpeza e secagem de equipamentos eletrônicos e metálicos, o mais utilizado neste propósito pois possui menos de 1% de água, portanto não apresenta risco de dano aos equipamentos. Nas indústrias farmacêutica e cosmética, isopropanol é usado na fabricação de sabonetes líquidos, loções pós-barba e loções para o corpo e

antissépticos, além de lacas, diluentes, produtos de limpeza, tintas e polidores e para esterilização e desinfecção de superfícies em hospitais, unidades de processamento de alimentos e similares. Utilizado também como solvente aerossol, para uso médico, veterinário e inseticida.

Como insumo químico, pode ser intermediário na produção de éter diisopropílico, na indústria de cosméticos; ésteres isopropílicos, solventes em celulose e tintas; aminas isopropílicas, usadas para produção de herbicidas glifosfatadas atuantes contra ervas daninha; entre outros.^{2,12,13} A produção dos ésteres isopropílicos consiste em uma transesterificação utilizando o isopropanol e também ácidos graxos de 14 ou 16 carbonos. Após a esterificação, há a destilação do álcool para purificação dos derivados, assim como uma neutralização por conta do meio ácido necessário para a reação e retirada de água, sabão e resíduos.

Três derivados são destaque na indústria de cosméticos e petroquímica: Laurato, miristato e palmitato de isopropila. O miristato de isopropila é emoliente e lubrificante em várias aplicações cosméticas e farmacêuticas, como xampus, desodorantes, loções, entre outros. O laurato de isopropila tem usos cosméticos e também aditivo de óleo lubrificante. O palmitato de isopropila é largamente utilizado como agente espessador, formando loções que aderem facilmente à pele.²



Esquema 10. Produção de derivados do isopropanol

Referências Bibliográficas

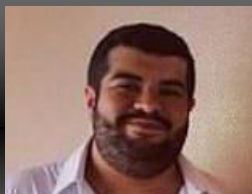
- ¹ O'Neil, M. J.; *The Merck Index*, 14a ed., Merck: New Jersey, 2006.
- ² Dutia, P., Isopropyl alcohol: A techno-commercial profile. Disponível em: [http://www.chemicalweekly.com/Profiles/Isopropyl Alcohol.pdf](http://www.chemicalweekly.com/Profiles/Isopropyl%20Alcohol.pdf). Acesso em: 15 janeiro 2015.
- ³ De Angelis, A., Propanol market to increase at an annualized rate of 3.9%. Disponível em: <http://www.companiesandmarkets.com/News/Chemicals/Propanol-market-to-increase-at-an-annualised-rate-of-3-9/NI8029>. Acesso em: 15 janeiro 2015.
- ⁴ OECD SIDS. Disponível em: [http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD SIDS/67630.pdf](http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD_SIDS/67630.pdf). Acesso em: 15 janeiro 2015.
- ⁵ International Agency for Research on Cancer, Monographs on the evaluation of carcinogenic risk to man. Disponível em: <http://monographs.iarc.fr/ENG/Monographs/vol100F/mono100F-32.pdf>. Acesso em: 15 janeiro 2015.
- ⁶ Fukuhara, I. H.; Matsunaga, W. F.; Shibuta, I. Y.; Tachi, K. T.; Preparation of isopropanol, *United States Patent* **1992**. (US005081321A)
- ⁷ Birkhoff, R.; Hwang, S. H.; Process for producing cumene, *World Intellectual Property Organization* **2014**. (WO 2014/008268 A1)
- ⁸ Birkhoff, R.; Bhoomi, R.; Integrated process for producing cumene and purifying isopropanol, *World Intellectual Property Organization* **2014**. (WO 2014/028003 A1)
- ⁹ Koepke, M.; Patrick, W. M.; Maddock, D. J.; Gerth, M.; Enzyme-altered metabolite activity, *World Intellectual Property Organization* **2013**. (WO 2013/152236 A1)
- ¹⁰ Vellasco Junior, W. T. ACETONA (CAS No. 67-64-1). *Revista Virtual de Química* **2011**, 3, 4. [CrossRef]
- ¹¹ Balouch, A.; Umar, A. A.; Shah, A. A.; Salleh, M. M.; Oyama, M. Efficient Heterogeneous Catalytic Hydrogenation of Acetone to Isopropanol on Semihollow and Porous Palladium Nanocatalyst, *ACS Applied Materials & Interfaces* **2013**, 5, 9843. [CrossRef]
- ¹² DOW COMPANY. Disponível em: <http://www.dow.com/productsafety/finder/iso.htm>. Acesso em: 16 janeiro 2015.
- ¹³ Extreme IX. Disponível em: <http://www.extremeix.com/Extremeix/Pages/ISO%20Propanol%20%20Petrochemicals.html>. Acesso em: 17 janeiro 2015.

¹⁴ Qiu, T.; Zhang, P.; Yang, J.; Xiao, L.; Ye, C. A Novel Procedure for Production of Isopropanol by Transesterification of Isopropyl Acetate with Reactive Distillation. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **2014**, *53*, 13881. [CrossRef]

¹⁵ Kusakabe, T.; Tatsuke, T.; Tsuruno, K.; Hirokawa, Y.; Atsumi, S.; Liao, J. C.; Hanai, T. Engineering a synthetic pathway in

cyanobacteria for isopropanol production directly from carbon dioxide and light. *Metabolic Engineering* **2013**, *20*, 101. [CrossRef]

¹⁶ Gronenberg, L.S.; Marcheschi, R.J.; Liao, J.C. Next generation biofuel engineering in prokaryotes. *Current Opinion in Chemical Biology* **2013**, *17*, 462. [CrossRef]



✉ gabrielccgomes@gmail.com

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Pesquisa de Produtos Naturais, Centro de Ciências da Saúde, Av. Carlos Chagas Filho, Cidade Universitária, CEP 21941-590, Rio de Janeiro-RJ, Brasil.

Gabriel Camelo Cunha Gomes possui graduação em Farmácia Industrial na Universidade Federal Fluminense (2013), é Mestre em Química na Universidade Federal Fluminense (2015) e atualmente é aluno de doutorado em Química na Universidade Federal do Rio de Janeiro (2016). Tem experiência nas áreas de Química e Farmácia, com ênfase em Química Computacional, Catálise, Físico-Química Orgânica e Síntese Orgânica de Moléculas Bioativas.