



República Federativa do Brasil
Ministério da Indústria, Comércio Exterior
e Serviços
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(11) PI 0712800-2 B1

(22) Data do Depósito: 07/06/2007

(45) Data de Concessão: 13/12/2016



(54) Título: PROCESSOS PARA CONVERTER GLICEROL EM AMINOALCOÓIS

(51) Int.Cl.: C07C 213/02; C07C 215/08; C07C 29/145; C07C 45/52

(30) Prioridade Unionista: 07/06/2006 US 60/811,704

(73) Titular(es): THE PROCTER & GAMBLE COMPANY

(72) Inventor(es): VICTOR MANUEL ARREDONDO; PATRICK JOSEPH CORRIGAN; ANGELLA CHRISTINE CEARLEY; DEBORAH JEAN BACK; MICHAEL STEVEN GIBSON; NEIL THOMAS FAIRWEATHER

PROCESSOS PARA CONVERTER GLICEROL EM AMINOALCOÓIS

CAMPO DA INVENÇÃO

As modalidades aqui descritas referem-se, de modo geral, a processos para produção de aminoalcoóis a partir
5 de glicerol.

ANTECEDENTES DA INVENÇÃO

Alguns aminoálcoois podem ser representados pela fórmula geral:



Esses aminoálcoois podem ser materiais valiosos, pois eles podem ser usados como solventes, intermediários para a produção de agentes ativos de superfície, inibidores
15 de corrosão em fluidos para metalurgia, agentes neutralizantes de lavagem ácida durante processos de purificação de gás natural ou gás de síntese, e elementos de auxílio na preparação de compostos para uso na indústria farmacêutica.

20 Atualmente, existem processos para a preparação de aminoalcoóis. Tais processos podem envolver a reação de compostos de poliidroxi, como etileno glicol, 1,2-dióis, 1,3-dióis, e poliglicóis, com compostos de amina e hidrogênio na presença de um catalisador heterogêneo. Uma
25 preocupação com tais processos é que eles podem exibir conversões e selectividades insatisfatórias a moderadas. Esses resultados indesejados podem ser causados pelo fato de que as reações podem produzir misturas de produto

complexas, que consistem em aminoálcoois, di- e triaminas, poliaminas oligoméricas, amins cíclicas (por exemplo pirrolidinas, piperidinas e piperazinas), materiais de partida não-reagidos e outros compostos não identificados.

5 Exemplos desses catalisadores e processos podem ser encontrados nas Patentes U.S. nº 6.376.713, 6.057.442, 5.288.911, 4.123.462, 4.151.204 e 4.111.840.

Alternativamente, os aminoálcoois podem ser preparados por meio da reação de um composto de amina com
10 2-cloro-1-propanol (vide, por exemplo, JP 01056652) ou pela redução estequiométrica dos aminoácidos e derivados éster correspondentes com uma variedade de agentes de redução (A. Abiko et al., Tetrahedron Lett. 1992, 33, 5517; M.J. McKennon, et al., J. Org. Chem. 1993, 58, 3568, e
15 referências dos mesmos) e pela hidrogenação catalítica de aminoácidos, por exemplo, como registrado nas Patentes U.S. nº 5.536.879, 5.731.479, e 6.310.254. Em projetos descritos por Miller, et al., (Organic Letters, 2003, 5(4), 527) sobre a conversão de alanina em produtos desejados, é
20 enfatizada a importância de se realizar hidrogenações sob baixo pH, de modo que o aminoácido esteja em forma protonada ao invés de estar em forma de carboxilato. Em geral, a hidrogenação catalítica dos aminoácidos precisa de uma solução de baixo pH em conjunto com alto carregamento
25 de catalisador, tempos de reação prolongados, e alta pressão de hidrogênio. Dessa forma, esses processos podem ser, freqüentemente, dispendiosos, uma vez que são necessárias matérias primas adicionais e reagentes caros.

Portanto, permanece a necessidade por processos para a produção de aminoálcoois a partir de matérias primas de baixo custo, como glicerol bruto, que possam, também, reduzir ou eliminar a produção de quantidades substanciais de subprodutos indesejados.

SUMÁRIO DA INVENÇÃO

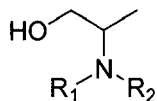
As modalidades da presente descrição relacionam-se, geralmente, a processos para produção de aminoálcoois a partir de glicerol.

10 Em uma modalidade exemplificadora, o processo da presente descrição relaciona-se, de maneira geral, à reação do glicerol com um catalisador metálico para a obtenção de hidróxi acetona, reação da hidróxi acetona com um composto de amina para se obter um aduto, e redução do
15 aduto usando-se um agente redutor para se obter um produto à base de aminoálcool.

 Em uma outra modalidade exemplificadora, os processos da presente descrição referem-se, de maneira geral, à reação do glicerol com um catalisador metálico a
20 uma temperatura de cerca de 160°C a cerca de 300°C para se obter uma hidróxi acetona, reação da hidróxi acetona com um composto de amina a uma temperatura de cerca de -20°C a cerca de 150°C para se obter um aduto, e redução do aduto usando-se um agente redutor a uma temperatura de cerca de
25 20°C a cerca de 250°C para se obter um produto à base de aminoálcool.

Ainda em outra modalidade exemplificadora, os processos da presente descrição referem-se, geralmente, à

conversão do glicerol em aminoálcool, tendo a seguinte fórmula:



5

com o processo compreendendo a reação do glicerol com um catalisador metálico a uma temperatura de cerca de 160°C a cerca de 300°C para se obter uma hidróxi acetona, reação da hidróxiacetona com um composto de amina a uma temperatura de cerca de -20°C a cerca de 150°C para se obter um aduto, e redução do aduto usando-se um agente redutor a uma temperatura de cerca de 20°C a cerca de 250°C para se obter um produto à base de aminoálcool, sendo que R₁ e R₂ são independentes um do outro e são selecionados a partir do grupo que consiste em H, alquila C₁-C₂₀, cicloalquila C₃-C₂₀, hidróxi alquila C₁-C₂₀, arila, alquilarila C₇-C₂₀, arilalquila C₇-C₂₀, e misturas dos mesmos, ou R₁ e R₂ se juntam com o nitrogênio para formar um anel heterocíclico contendo de 5 a 7 átomos anelares.

20

BREVE DESCRIÇÃO DOS DESENHOS

Acredita-se que a Descrição da Invenção será melhor compreendida em relação aos seguintes desenhos, sendo que:

A Figura 1 é um fluxograma esquemático que representa uma modalidade exemplificadora de um processo de múltiplos estágios, de acordo com a presente descrição; e

25

A Figura 2 é um fluxograma esquemático que representa uma modalidade exemplificadora de um processo de estágio único, de acordo com a presente descrição.

DESCRIÇÃO DETALHADA DA INVENÇÃO

5 A. Definições

Para uso na presente invenção, o termo "que compreende" significa que vários componentes, ingredientes ou etapas podem ser aplicados em conjunto na prática das modalidades, de acordo com a presente descrição.

10 Conseqüentemente, o termo "que compreende" abrange os termos mais restritos "consistindo essencialmente em" e "que consiste em."

Para uso na presente invenção, o termo "aduto" significa quaisquer espécies químicas formadas pela combinação ou condensação de duas ou mais substâncias,

15 como uma hidróxi acetona e um composto de amina.

Para uso na presente invenção, o termo "glicerol bruto" refere-se a um glicerol que pode conter impurezas, incluindo, mas não se limitando a, água, sais inorgânicos

20 como cloreto, sulfato, fosfato, sais de acetato e outros, compostos orgânicos como ácidos graxos, ésteres graxos, monoglicerídeos, diglicerídeos, fosfolipídeos, resíduos de proteína, metanol, ácidos, bases ou combinações dos mesmos. As impurezas podem ser responsáveis por cerca de 10% a

25 cerca de 50% do glicerol bruto, em peso.

Para uso na presente invenção, o termo "componentes da reação" referem-se, geralmente, a espécies químicas que tomam parte em uma transformação química, a título de exemplo, mas sem constituir-se em limitação,

solventes, reagentes e catalisadores. Além disso, os "componentes da reação" podem incluir um gás, um líquido, ou um sólido, ou um componente da reação dissolvido em um solvente.

5 Para uso na presente invenção, o termo "agente redutor" refere-se a qualquer elemento, composto, ou combinação de elementos e/ou compostos que reduza outras espécie, aumentando o teor de hidrogênio ou diminuindo o teor de oxigênio das outras espécies.

10 Para uso na presente invenção, o termo "RANEY®", quando usado em conjunto com um catalisador metálico, significa um catalisador que foi tratado através de um processo que ativa o catalisador, mediante a reação do catalisador com um segundo metal, como alumínio, e/ou
15 mediante o aumento da área superficial do catalisador. Por exemplo, um metal RANEY® é um catalisador sólido composto por finos grãos de uma liga de metal-alumínio, produzidos quando um bloco da liga é tratado com hidróxido de sódio concentrado para ativar o catalisador. O catalisador ativado
20 tem uma estrutura porosa com uma alta área superficial. RANEY® é uma marca registrada de W.R. Grace and Company, New York, New York, E.U.A. Outros catalisadores apropriados que podem ser usados no lugar de um catalisador RANEY® incluem catalisadores esqueléticos e/ou catalisadores de metal em
25 esponja.

 Para uso na presente invenção, o termo "glicerol" pode referir-se a qualquer glicerol bruto, tratado, ou refinado, conforme descrito na presente

invenção, a menos que o glicerol seja especificamente designado como sendo bruto, tratado, ou refinado.

Para uso na presente invenção, o termo "glicerol refinado" significa um glicerol que é, pelo menos, cerca de
5 99% puro (isto é, que contém menos que cerca de 1% de impurezas, como as impurezas aqui descritas).

Para uso na presente invenção, o termo "glicerol tratado" significa um glicerol que passou por pelo menos um processo de tratamento, de modo que o glicerol tratado
10 compreende mais que cerca de 1 % a cerca de 10 % de impurezas, como as impurezas aqui descritas.

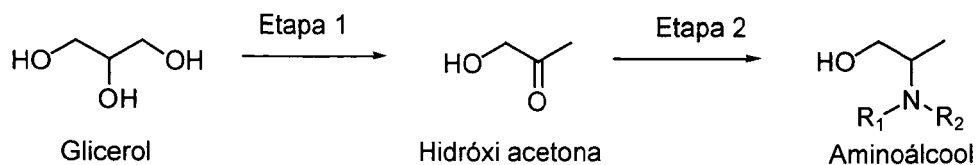
Para uso na presente invenção, o termo "tratamento" significa remover ao menos uma porção das impurezas do glicerol bruto. O "tratamento" pode ser
15 realizado através de uma variedade de métodos, incluindo, mas não se limitando a, neutralização, precipitação, filtração, evaporação, separação por arraste a vapor, troca iônica, adsorção, separação por membrana, como microfiltração, nanofiltração, osmose e osmose reversa,
20 eletrodesionização, e combinações dos mesmos.

Todas as porcentagens estão em peso, exceto onde for especificado em contrário.

B. Processos

As modalidades aqui descritas referem-se, de modo
25 geral, a processos em duas etapas para a produção de aminoálcoois a partir de glicerol. Mais especificamente, as modalidades da presente invenção apresentam processos em duas etapas para converter cataliticamente o glicerol em hidróxi acetona, em uma primeira etapa, e a hidróxi acetona

em um aminoálcool, em uma segunda etapa, conforme representado pelo seguinte:



5

De acordo com outras modalidades, o processo pode ser um processo de etapa única, em que a conversão do glicerol em hidróxiacetona e a conversão da hidróxiacetona em aminoálcool pode ocorrer em um único processo de reação (em um único recipiente ou em um único reator). Variações de tais processos se tornarão claras a partir da descrição a seguir.

De acordo com diversas modalidades, os processos da presente invenção envolvem a reação do glicerol com um catalisador metálico para se obter uma hidróxiacetona. De acordo com determinadas modalidades, o produto à base de hidróxi acetona pode compreender, ainda, outros componentes, como, por exemplo, qualquer glicerol não-reagido, água, propileno glicol e outras impurezas. Um glicerol aceitável para uso na presente invenção pode ser um glicerol líquido bruto, tratado ou refinado, ou um vapor de glicerol bruto, conforme descrito com mais detalhes neste documento. Com referência à Figura 1 como um todo, o glicerol bruto (100) pode conter impurezas, incluindo, mas não se limitando a, água, sais inorgânicos como cloreto, sulfato, fosfato, sais de acetato e outros, compostos orgânicos como ácidos graxos, ésteres graxos,

monoglicerídeos, diglicerídeos, fosfolipídeos, resíduos de proteína, metanol, ácidos, bases ou combinações dos mesmos. Em determinadas modalidades de glicerol bruto, as impurezas podem contar como, pelo menos, cerca de 10% do glicerol
5 bruto, e, em modalidades específicas, de cerca de 10% a cerca de 50% do glicerol bruto, em peso. Em outras modalidades, o glicerol bruto pode compreender menos que 10% de impurezas, como de 1% a 10% de impurezas. O versado na técnica irá compreender que a quantidade de impurezas no
10 glicerol bruto pode variar de acordo com o método de produção e que, em determinados processos mais eficientes, o glicerol bruto, não-tratado, pode conter teores mais baixos de impurezas que o glicerol bruto oriundo de outros processos. A pureza do glicerol "bruto" usado na reação não
15 deve ser vista como um limitador da presente invenção. De acordo com determinadas modalidades, o glicerol bruto pode ser obtido durante o curso da produção de biodiesel, ou a partir da conversão de gorduras/óleos de origem vegetal ou animal, através de saponificação, trans-esterificação ou
20 reações de hidrólise. Conforme descrito na presente invenção, em determinados processos convencionais, o glicerol bruto tem que ser, primeiramente, refinado antes do uso, de modo a facilitar o controle do processo, maximizar o rendimento do processo, evitar envenenamento do
25 catalisador e/ou reduzir as impurezas no produto final da reação. Devido ao fato de tais processos de refinação poderem ser dispendiosos, em determinadas modalidades dos processos da presente invenção, pode ser mais desejável usar o glicerol bruto diretamente ou com um mínimo de

processamento, tratamento, ou purificação. Diversas modalidades aqui descritas podem chamar a atenção para esse problema, fornecendo mais processos com boa relação custo/benefício, que permitem o uso de glicerol bruto sem
5 refinamento ou tratamento do glicerol.

Embora as modalidades da presente descrição foquem, de modo geral, o uso de glicerol bruto, os processos da presente descrição não se limitam ao uso de glicerol bruto. Por exemplo, em outra modalidade, o
10 glicerol bruto pode ser opcionalmente tratado (102) antes do uso, nos processos aqui descritos. O tratamento do glicerol bruto pode auxiliar na redução da quantidade de impurezas presentes, sem a necessidade de se refinar completamente o glicerol bruto. Dessa maneira, o tratamento
15 do glicerol bruto pode resultar em uma economia significativa, em comparação ao refinamento. Para uso na presente invenção, o "tratamento" do glicerol bruto pode ser realizado por meio de variados métodos, incluindo, mas não se limitando a, neutralização, precipitação, filtração,
20 evaporação, separação por arraste de vapor, troca iônica, adsorção, separação por membrana, como microfiltração, nanofiltração, osmose e osmose reversa, eletrodesionização, e combinações dos mesmos. Os versados na técnica compreenderão como o tratamento do glicerol bruto
25 pode ser realizado através dos vários métodos demonstrados acima, e que tal tratamento pode variar, dependendo das impurezas presentes. Independente de qual método de tratamento seja empregado, o "glicerol tratado" resultante pode compreender de cerca de 1% a cerca de 10% das

impurezas supracitadas, em peso. A redução das impurezas no glicerol tratado pode ajudar a fornecer melhores rendimentos de reação nos processos aqui descritos.

De acordo com outras modalidades, um glicerol refinado (104) tendo pureza maior do que cerca de 99% pode, também, ser aceitável para uso na presente invenção. O glicerol pode ser refinado através de qualquer método de refinamento conhecido na técnica. Em diversas modalidades, o glicerol refinado, tratado, ou bruto pode ser puro ou diluído com um solvente polar (por exemplo, água ou um álcool). Várias misturas de glicerol refinado, tratado e/ou bruto podem, também, ser adequadas ao uso, em diversas modalidades apresentadas na presente invenção.

Alternativamente, de acordo com outras modalidades, o glicerol bruto pode ser vaporizado (106) antes de se submeter o glicerol aos processos aqui descritos. Como as reações da fase de vapor podem ser mais rápidas que as reações da fase líquida, um vapor de glicerol pode ser desejado, de modo que a primeira porção do processo pode ser conduzida em uma fase de vapor, por exemplo, para acelerar a taxa de reação. A vaporização do glicerol pode ser executada usando-se qualquer vaporizador conhecido pelos versados na técnica, incluindo, mas não se limitando a, um evaporador com tanque de separação do vapor da fase líquida ou um evaporador de filme untado. O versado na técnica irá reconhecer que as condições de temperatura e pressão podem variar de acordo com o equipamento de vaporização usado. Um benefício adicional da vaporização do glicerol bruto é que a vaporização do glicerol pode reduzir

a quantidade de impurezas presentes no glicerol bruto, sem haver a necessidade de se refinar completamente o glicerol. Dessa maneira, usar vapor de glicerol pode ser uma opção com uma melhor relação custo/benefício que o uso de glicerol refinado. Para uso na presente invenção, o termo "glicerol" deve incluir glicerol bruto, tratado, ou refinado, exceto onde ele é especificamente designado como bruto, tratado ou refinado.

Pode-se fornecer, também, um catalisador metálico (108) para reagir com o glicerol, para produzir hidróxi acetona. De acordo com diversas modalidades, qualquer catalisador metálico contendo sítios ativos que compreendem um ou mais elementos metálicos de transição, pode ser usado na presente invenção. Por exemplo, de acordo com determinadas modalidades, o catalisador metálico pode incluir, mas não se limita a, cobre, cromo, níquel, zinco, cobalto, manganês, silício, alumínio, óxidos dos mesmos e combinações dos mesmos. De acordo com uma modalidade, o catalisador metálico pode ser um catalisador à base de cromita de cobre (também conhecido na técnica como um catalisador óxido à base de cobre e cromo) que pode compreender de cerca de 15% a cerca de 75% de óxido de cobre e de cerca de 20% a cerca de 75% de trióxido de cromo. De acordo com uma outra modalidade, o catalisador pode ser um catalisador à base de cobre "isento de cromo", como um catalisador à base de cobre e zinco ou um catalisador à base de óxido de cobre. Catalisadores à base de cobre, isentos de cromo, podem exibir atividade e seletividade comparável ou superior a catalisadores à base de cromita de cobre

convencionais para determinadas reações, e eliminam os problemas ambientais associados ao descarte de catalisadores contendo cromo. Em determinadas modalidades, o catalisador à base de cobre e zinco isento de cromo pode compreender de
5 cerca de 20% a cerca de 75% de óxido de cobre, de cerca de 20% a cerca de 60% de óxido de zinco, e de cerca de 20% a cerca de 70% de alumina e, em outra modalidade, o catalisador à base de óxido de cobre isento de cromo pode compreender de cerca de 20% a cerca de 80% de óxido de cobre
10 e de cerca de 25% a cerca de 70% de alumina. Adicionalmente, o catalisador metálico, por exemplo, o catalisador à base de cromita de cobre ou o catalisador à base de cobre e zinco, pode conter pequenas quantidades de estabilizadores, como óxido de bário. Em determinadas modalidades, o catalisador
15 metálico pode, também, ser promovido com um ou mais óxidos metálicos, incluindo, mas não se limitando a, magnésio, cálcio, bário, manganês, molibdênio ou silício, que podem ajudar a deixar o catalisador metálico mais ativo e/ou mais estável. Além disso, em certas modalidades, o catalisador
20 metálico pode ser usado fresco (isto é, em sua forma de óxido) ou pode ser reduzido em um fluxo de hidrogênio antes do uso. De acordo com determinadas modalidades, o uso de um catalisador reduzido pode ser desejado por várias razões. Por exemplo, em determinadas modalidades, o uso de um
25 catalisador reduzido pode produzir hidróxi acetona mais rapidamente e com menos impurezas e, em outras modalidades, o uso de um catalisador reduzido pode contribuir para um tempo de vida mais longo do catalisador, devido à resistência do catalisador a envenenamento e/ou degradação.

De acordo com diversas modalidades, a reação do glicerol e do catalisador metálico pode ocorrer em um primeiro reator (110), opcionalmente, na presença de um gás (112), em um modo fluidizado ou em um modo de leito

5 fixo. Qualquer reator conhecido pelos versados na técnica pode ser usado na presente invenção e pode incluir um reator de batelada, um reator com tanque de agitação, um reator de semi-batelada, um reator de fluxo pistonado, um reator contínuo, um reator contínuo com tanque de

10 agitação, um reator fluidizado, um reator de leito fixo, um reator tubular, um reator de coluna, um reator de leito compactado, um reator de leito fluidizado, um reator de leito gotejante, um reator de membrana, um reator de placa e armação, um reator do tipo Carberry (também chamado de

15 "Reator Notre Dame, consulte, J.J. Carberry, "Chemical and Catalytic Reaction Engineering," Dover Publications, Inc. Mineola, NY, 1976, p. 406, consulte também p. 520 para uma ilustração de vários tipo de reatores adequados para uso na presente descrição, com a descrição do mesmo aqui

20 incorporada na íntegra, a título de referência), um reator de fluxo pistonado, e uma destilação reativa, ou várias combinações dos mesmos. Deve-se compreender que a maneira pela qual o glicerol e o catalisador metálico são alimentados/adicionados ao reator pode variar, dependendo

25 do equipamento usado e a fase de cada componente de reação. Entretanto, em modalidades em que o vapor de glicerol é usado, o versado na técnica irá entender que pode ser mais vantajoso ter o catalisador metálico já colocado no primeiro reator, antes da adição do vapor de

glicerol, uma vez que isso pode simplificar o processo de contato do vapor de glicerol com o catalisador metálico.

Embora a quantidade de catalisador metálico possa variar, em uma modalidade, a quantidade pode ser de cerca
5 de 0,01% a cerca de 100%, e, em outra modalidade, de cerca de 0,01% a cerca de 5%, em peso, em relação ao glicerol, por exemplo, em um reator fluidizado. Para outros reatores, como um reator contínuo, por exemplo um reator de leito fixo (incluindo reatores de leito gotejante), a carga de
10 catalisador do reator pode variar e pode depender do design do reator de leito, como o volume do reator e/ou a taxa de fluxo do reagente. O versado na técnica irá reconhecer que a quantidade de catalisador metálico usado pode variar, dependendo do tipo de reator usado e a velocidade desejada da reação. Por exemplo, reações mais rápidas podem ser
15 vantajosas, uma vez que elas geralmente permitem o uso de um equipamento de reação mais compacto e podem resultar na formação de menos subprodutos, enquanto reações mais lentas podem ser vantajosas, porque elas podem, freqüentemente,
20 ser executadas usando-se menos catalisador, o que pode levar a custos operacionais mais baixos. Em certas modalidades, onde pode ser desejada uma velocidade de reação mais rápida, a quantidade de catalisador metálico pode ser aumentada.

25 De acordo com determinadas modalidades, a reação do glicerol com o catalisador metálico pode ocorrer sob pulverização de gás. Se for usado um gás (112), qualquer gás conhecido pelos versados na técnica pode ser aceitável para uso na presente invenção. Exemplos de gases que podem

ser úteis em certas modalidades dos presentes processos podem incluir os gases nobres (por exemplo, hélio ou argônio), nitrogênio, dióxido de carbono, vapor superaquecido, e combinações dos mesmos. Em certas
5 modalidades, o gás pode compreender nitrogênio. Sem se ater à teoria, acredita-se que a inclusão de um gás, em combinação com a temperatura de reação, pode ser benéfica, pois ele pode otimizar o rendimento e a seletividade da reação ao reduzir o tempo de contato entre o catalisador e
10 o produto à base de hidróxi acetona, auxiliando continuamente na remoção da hidróxi acetona e da água da mistura de reação como um vapor. Por exemplo, conforme o produto à base de hidróxi acetona é formado sob as condições de reação e temperatura, ele pode ser vaporizado
15 e o vapor de hidróxiacetona é transmitido para fora do reator por meio de um fluxo de gás. Por sua vez, isso pode evitar que a hidróxi acetona reaja ainda mais com o catalisador metálico e gere subprodutos indesejados.

De acordo com uma modalidade específica, o
20 primeiro reator (110) pode ser um reator de leito gotejante. O reator de leito gotejante pode compreender ao menos uma coluna recheada, sendo que a coluna é preenchida com o catalisador metálico. Em determinadas modalidades, o reator de leito gotejante pode compreender uma pluralidade
25 de colunas, como, por exemplo, de 2 a 10 colunas, dispostas em série ou em paralelo. O versado na técnica irá reconhecer que o número de colunas no reator de leito gotejante pode variar, de acordo com o tempo de reação necessário, a taxa de fluxo do processo, e/ou a altura, o

volume total do leito, ou a carga de catalisador da coluna. No reator de leito gotejante, para a conversão do glicerol em hidróxi acetona, o glicerol líquido é alimentado no reator a um fluxo baixo, de modo que uma fina
5 camada do líquido se forme sobre ao menos uma porção da superfície das partículas de catalisador metálico que estão compactadas dentro da coluna. Em determinadas modalidades, o espaço entre as partículas do catalisador pode ser alimentado com o gás (112), de modo que, conforme o
10 glicerol é convertido em produto à base de hidróxi acetona (116), o produto à base de hidróxiacetona é volatilizado e o vapor de hidróxiacetona é carregado para fora do reator pelo gás.

Independentemente do modo de introdução dos
15 vários componentes da reação, uma vez dentro do primeiro reator, o glicerol e o catalisador metálico podem reagir, na presença do gás, caso esteja incluído, para produzir um produto à base de hidróxi acetona que, em adição à hidróxi acetona, pode compreender qualquer um dentre glicerol não-
20 reagido, água, propileno glicol, e outras impurezas. Sem se ater à teoria, acredita-se que a hidróxi acetona pode ser formada por meio da combinação das reações de desidrogenação e desidratação. Mais especificamente, o glicerol pode ser, primeiramente, desidrogenado para
25 gliceraldeído, em equilíbrio com seu tautômero enólico. O grupo hidroxila primário deste tautômero enólico pode, então, interagir com o sítio ácido presente no óxido de cromo, catalizando, por meio disso, a perda de água (desidratação) com a reorganização concomitante da ligação

dupla para produzir hidróxi acetona. De maneira alternativa, um grupo hidroxila primário do glicerol pode interagir fortemente com um sítio ácido no catalisador para facilitar a perda de água e produzir hidróxi acetona por meio do tautômero enólico.

Tendo em vista o que foi citado acima, deve-se compreender que as condições de reação podem variar dependendo dos componentes da reação em particular (isto é, glicerol, catalisador metálico e gás, caso esteja presente) e do tipo de reator selecionado. Em certas modalidades, a reação do glicerol com o catalisador metálico pode ocorrer no primeiro reator a uma temperatura de cerca de 160°C a cerca de 300°C, e, em outra modalidade, de cerca de 200°C a cerca de 240°C. De acordo com determinadas modalidades, a reação do glicerol com o catalisador metálico pode ocorrer quase a uma pressão atmosférica, apesar do fato de que pressões acima e abaixo da pressão atmosférica, por exemplo, em uma modalidade, pressões de cerca de 0,01 MPa (0,1 bar) a cerca de 6 MPa (60 bar) podem ser usadas na presente invenção e, em outra modalidade, pressões de cerca de 0,01 MPa (0,1 bar) a cerca de 1 MPa (10 bar), podem ser usadas na presente invenção. Similarmente, o tempo necessário para realizar a reação pode variar, dependendo dos componentes da reação usados, por exemplo, em uma modalidade a reação pode ser realizada por cerca de 1 minuto a cerca de 24 horas, conforme medido pelo tempo de permanência no reator, quando o glicerol está na fase líquida, por exemplo. Em outras modalidades, quando o glicerol está em uma fase de vapor, o tempo de reação pode

ser de cerca de 1 segundo a cerca de 1 hora. Os versados na técnica compreenderão como selecionar os parâmetros de processo adequados, com base em fatores como componentes da reação, fases do reagente, e equipamento usado.

5 Uma vez que ocorra a reação entre o glicerol e o catalisador metálico, um produto à base de hidróxi acetona (116), bem como um fluxo de reciclagem (118), podem ser obtidos. Para uso na presente invenção, o termo "produto à base de hidróxia-cetona" significa a(s) composição(ões) resultante(s) da, ou remanescente após a reação com o
10 glicerol e o catalisador metálico, opcionalmente na presença do gás inerte, no primeiro reator. Embora não se deva limitar a tal, o produto à base de hidróxi acetona estará, de modo geral, na fase de vapor (que, em certas
15 modalidades, pode ser condensada antes da etapa seguinte no processo). Em adição à hidróxi acetona, o produto à base de hidróxiacetona pode compreender qualquer um dentre glicerol não-reagido, propileno glicol, água, impurezas e combinações dos mesmos. O produto à base de hidróxi acetona
20 pode, também, compreender qualquer gás (112), se o mesmo for usado na reação.

 O fluxo de reciclagem (118) pode estar, de modo geral, na fase líquida e pode compreender o catalisador metálico, glicerol não-reagido, bem como impurezas com alto
25 ponto de ebulição. Em uma modalidade, o fluxo de reciclagem (118) pode ser retornado ao primeiro reator (110) para ser reciclado e reutilizado. Em outra modalidade, o catalisador metálico no fluxo de reciclagem (118) pode ser parcial ou completamente separado (120) e o glicerol não-reagido

restante (122) (e quaisquer impurezas presentes) podem ser retornados ao reator (110) para serem reciclados. Uma vez que o catalisador metálico pode perder uma parte de sua atividade ao longo do tempo, ele pode, então, ser regenerado (124) antes de ser reciclado (126) no primeiro reator para reutilização. Opcionalmente, o catalisador metálico reciclado (126), regenerado ou não, pode ser misturado com o catalisador metálico fresco (108) e/ou com o glicerol não-reagido (122), sendo adicionado de volta no primeiro reator (110) para substituir ao menos uma porção dos componentes de reação usados/removidos.

Similarmente, quando se lida com o produto à base de hidróxi acetona (116), o gás (caso seja usado) pode ser opcionalmente separado (128) do produto à base de hidróxi acetona restante (130) e retornar ao primeiro reator (110) para ser reciclado e reutilizado. O restante do produto à base de hidróxi acetona (130), que, conforme anteriormente mencionado, pode incluir hidróxi acetona, bem como, em certas modalidades, qualquer glicerol não-reagido, água, propileno glicol e impurezas como 1,3-dimetanol-p-dioxano e (2,4-dimetil-1,3-dioxolan-2-il)metanol pode ser adicionalmente separado, caso se deseje (132), para isolar a hidróxiacetona (134) do glicerol não-reagido (136), da água (138), do propileno glicol (140) e das impurezas (142). De modo geral, a água e as impurezas podem ser descartadas ou recicladas, enquanto qualquer propileno glicol pode ser coletado para uso em outras aplicações e qualquer glicerol não-reagido pode ser reciclado de volta para uso como um componente de

reação, enquanto a hidróxi acetona (134) pode ser adicionada a um segundo reator (146) para processamento adicional.

Mais especificamente, a hidróxi acetona (134) e
5 um composto de amina (144) podem ser reagidos em um segundo reator (146) para obtenção de um aduto (148). O composto de amina (144) pode ser selecionado do grupo que consiste em amônia, hidróxido de amônio, hidroxilamina, aminas primárias, amina secundária, alcanolaminas e combinações
10 dos mesmos. Em uma modalidade, o composto de amina pode ser uma amônia, enquanto que, em outra modalidade, o composto de amina pode ser um hidróxido de amônio. Em outra modalidade, o composto de amina pode ser uma hidroxilamina. Alguém que seja versado na técnica, com base na descrição
15 da presente invenção, entenderá que a seleção do composto de amina adequado dependerá da estrutura do produto à base de aminoálcool desejado. Por exemplo, em certas modalidades onde se deseja um produto à base de aminoálcool primário, um composto de amina tal como a amônia (gasosa ou líquida)
20 ou hidróxido de amônio seriam selecionados, considerando que um produto à base de aminoálcool secundário ou um produto à base de aminoálcool terciário utilizariam um composto de amina primária ou um composto de amina secundária, respectivamente.

25 Em certas modalidades, a reação opcional da hidróxi acetona com o composto de amina para se obter o aduto, pode compreender, ainda, a adição opcional de um catalisador ácido à hidróxiacetona e ao composto de amina. Por exemplo, em determinadas modalidades, a taxa da reação

entre a hidróxi acetona e o composto de amina pode ser aumentada por meio da adição de um catalisador ácido, como, por exemplo, um ácido de Brønsted-Lowry, um ácido de Lewis, ou combinações dos mesmos. Os versados na técnica

5 compreenderão como selecionar um catalisador ácido, como um catalisador ácido sólido, com base em fatores como equipamento e parâmetros de custo. Alguns catalisadores ácidos sólidos exemplificadores aceitáveis para uso na presente invenção podem incluir óxidos metálicos ou óxidos

10 mistos metálicos dos elementos Zr, Ti, Mo, W, Fe, B, Al e Si; zeólitos, sais metálicos ou de amônio de ácidos minerais como ácido clorídrico, ácido sulfúrico, ácido nítrico, ácido fosfórico ou ácidos orgânicos como ácido fórmico, ácido acético e ácidos sulfônicos; resinas de troca de íons de

15 poliestireno sulfonatadas reticuladas, como AMBERLISTE™ (Rohm & Haas, USA, PA), resina de ácido poliperfluorosulfônico, como NAFION® (Dupont, Delaware, EUA), com ou sem nanocompósito de sílica; Kieselguhr, alumina, titânia ou argilas impregnadas com um ácido forte.

20 Embora não se pretenda limitar por qualquer mecanismo em particular, acredita-se que o catalisador ácido possa ativar a carbonila da hidróxi acetona através de ataque nucleofílico pelo composto de amina. O catalisador ácido pode ser adicionado à hidróxi acetona antes,

25 concomitantemente, ou depois da adição do composto de amina. Em outra modalidade, uma mistura da hidróxi acetona e do composto de amina pode ser passada sobre ou através de uma resina ácida. Em outras modalidades, a catálise ácida pode não ser necessária, uma vez que o composto de amina pode

reagir diretamente com a hidróxi acetona para produzir o aduto.

O segundo reator (146) pode ser qualquer reator conhecido pelos versados na técnica incluindo, mas não se limitando a, reator de batelada, um reator com tanque de agitação, um reator de semi-batelada, um reator contínuo, um reator contínuo com tanque de agitação, um reator fluidizado, um reator de leito fixo, um reator tubular, um reator em coluna, um reator de leito compactado, um reator de leito fluidizado, um reator de leito gotejante, um reator de membrana, um reator de placa e armação, um reator do tipo Carberry, um reator de fluxo pistonado, e uma destilação reativa, ou várias combinações dos mesmos. Deve-se compreender que a maneira pela qual a hidróxi acetona e o composto de amina são alimentados/adicionados ao reator pode variar dependendo do equipamento usado e da fase de cada componente de reação.

Em uma modalidade, o segundo reator (146) é um reator de leito gotejante. O reator de leito gotejante pode compreender ao menos uma coluna recheada, sendo que a coluna é preenchida com o catalisador de hidrogenação. Em determinadas modalidades, o reator de leito gotejante pode compreender uma pluralidade de colunas preenchidas com o catalisador de hidrogenação, como, por exemplo, de 2 a 10 colunas, dispostas em série ou em paralelo. O versado na técnica irá reconhecer que o número de colunas no reator de leito gotejante pode variar, de acordo com o tempo de reação necessário, a taxa de fluxo do processo, e/ou a

altura, o volume total do leite, ou a carga de catalisador da coluna.

A reação entre a hidróxi acetona e o composto de amina pode ser executada, de maneira geral, a uma
5 temperatura de cerca de -20°C a cerca de 150°C , e, em uma modalidade, de cerca de -10°C a cerca de 30°C . Em determinadas modalidades, a reação da hidróxi acetona com o composto de amina pode ocorrer sob pressões de cerca de 0,1 MPa (1 bar) a cerca de 20 MPa (200 bar), e, em uma outra
10 modalidade, de cerca de 0,1 MPa (1 bar) a cerca de 10 MPa (100 bar). O composto de amina pode estar em excesso, com a razão molar entre o composto de amina e a hidróxi acetona sendo de cerca de 1:1 a cerca de 10:1, e, em uma outra modalidade, de cerca de 2:1 a cerca de 4:1. A reação pode
15 ser executada de cerca de 1 minuto a cerca de 3 horas e, em uma outra modalidade, de cerca de 15 minutos a cerca de 90 minutos. Alguém que seja versado na técnica irá entender como o tempo de reação pode variar, dependendo das condições de reação e do equipamento usado.

20 Conforme descrito anteriormente, a reação entre a hidróxi acetona e o composto de amina pode resultar na formação de um aduto (148). Para uso na presente invenção, o termo "aduto" refere-se a quaisquer espécies químicas formadas pela combinação ou condensação de duas ou mais
25 substâncias. Atualmente, as duas substâncias podem ser uma hidróxi acetona (134) e um composto de amina (144).

O aduto resultante (148) pode, então, ser adicionado a um terceiro reator (150) junto com um agente redutor (152) para produzir um produto à base de aminoálcool

(154). A reação de um composto contendo carbonila com uma amina para formar um aduto, que é subsequentelemente reduzido, é conhecida como aaminação redutora. A aaminação redutora do aldeído ou compostos contendo cetona pode prosseguir por

5 várias etapas e por meio de vários mecanismos, dependendo da estrutura dos reagentes e das condições de reação. Consulte Maschmeyer, T., et al., Adv. Synth. Catal. N° 10, 344, 1037-1057 (2002), a descrição do qual está aqui incorporada em sua totalidade por referência da presente invenção. Durante

10 a aaminação redutora de hidróxi acetona, a reação entre a hidróxi acetona e o composto de amina resulta na formação do aduto (148). Em uma modalidade, a hidróxi acetona pode ser adicionada gradualmente ao composto de amina, de modo a manter baixas as concentrações de hidróxi acetona na mistura

15 de reação, que, sob redução, pode gerar propileno glicol, diminuindo, dessa forma, o rendimento do aminoálcool desejado. Além disso, o versado na técnica irá reconhecer que a aaminação redutora pode ser executada de forma opcional em um único reator, mediante a adição da hidróxi acetona, do

20 composto de amina, e do agente redutor (como um catalisador de hidrogenação e um hidrogênio) no mesmo reator, por exemplo, ou no segundo reator ou no terceiro reator. Em determinadas modalidades, o agente redutor pode ser qualquer agente redutor conhecido na técnica. Por exemplo, as reações

25 de redução adequadas incluem hidrogenação com gás hidrogênio e um catalisador de hidrogenação, redução com uma fonte de hidreto (incluindo, mas não se limitando a, boroidreto de sódio, acilóxi boroidretos, triacetóxi boroidreto, cianoboroidretos, e similares), reduções metálicas solúveis,

e amálgamas de redução de alumínio-mercúrio. Em determinadas modalidades, o agente redutor (152) pode compreender gás hidrogênio na presença de um catalisador de hidrogenação, como um catalisador de hidrogenação metálico, selecionado do grupo consistindo em níquel, cobalto, níquel RANEY®, cobalto RANEY®, níquel RANEY® ou cobalto RANEY® dopado com outros metais de transição, óxido de níquel, cobre, paládio, platina, ródio, rutênio, cromo, irídio, rênio, molibdênio, ferro, manganês, titânio, zircônio, magnésio, óxidos dos mesmos, e combinações dos mesmos. Em modalidades específicas, o catalisador de hidrogenação pode ser um níquel RANEY®, um cobalto RANEY®, ou combinações dos mesmos. Em determinadas modalidades, o catalisador de hidrogenação pode ser suportado em um material selecionado do grupo que consiste em alumina, óxido de titânio, zircônia, carvão vegetal, óxido de cromo, sílica, zeólitos e combinações dos mesmos. O catalisador de hidrogenação pode ser solúvel ou insolúvel e pode ser dissolvido na mistura de reação ou situado dentro do terceiro reator (150) como um leito fluidizado ou compactado. Embora a quantidade de catalisador de hidrogenação usado possa variar, em determinadas modalidades, de cerca de 0,01% a cerca de 100% de catalisador pode ser usado e, em outra modalidade, de cerca de 1% a cerca de 20% de catalisador pode ser usado, com base no peso a seco, em relação ao aduto, por exemplo, em um reator fluidizado. Para outros reatores, como um reator contínuo, por exemplo um reator de leito fixo (incluindo reatores de leito gotejante), a carga de catalisador do reator pode variar e pode depender do design

do reator de leito, como o volume do reator e/ou a taxa de fluxo do reagente.

De acordo com diversas modalidades, as condições de reação em que o aduto pode ser reduzido pelo agente redutor podem ser diferentes. Em determinadas modalidades onde o agente redutor (152) compreende hidrogênio e o catalisador de hidrogenação, o hidrogênio pode estar a uma pressão parcial de cerca de 0,1 MPa (1 bar) a cerca de 35 MPa (350 bar), e, em outras modalidades, o hidrogênio pode estar a uma pressão parcial de cerca de 1 MPa (10 bar) a cerca de 15 MPa (150 bar). De acordo com determinadas modalidades, a redução pode ser executada a uma temperatura na faixa de cerca de 20°C a cerca de 250°C e, em outras modalidades, de cerca de 40°C a cerca de 85°C. O tempo de reação também pode variar, dependendo do agente redutor e/ou condições de reação. Por exemplo, em determinadas modalidades, a redução do aduto pode ocorrer de cerca de 1 minuto a cerca de 24 horas, e, em outras modalidades, de cerca de 30 minutos a cerca de 6 horas.

De acordo com diversas modalidades, o terceiro reator é selecionado do grupo que consiste em um reator de batelada, um reator com tanque de agitação, um reator de semi-batelada, um reator contínuo, um reator contínuo com tanque de agitação, um reator fluidizado, um reator de leito fixo, um reator tubular, um reator em coluna, um reator de leito compactado, um reator de leito fluidizado, um reator de leito gotejante, um reator de membrana, um reator do tipo Carberry, um reator de placa e armação, um reator de fluxo pistonado, e uma destilação reativa, ou várias combinações

dos mesmos. Deve-se compreender que a maneira pela qual o aduto e o agente redutor (como o gás hidrogênio e o catalisador de hidrogenação) são alimentados/adicionados ao reator pode variar, dependendo do equipamento usado e da
5 fase de cada componente de reação.

Em uma modalidade, o terceiro reator é um reator de leito gotejante. Conforme descrito na presente invenção, no reator de leito gotejante, o fluxo de alimentação (como o fluxo de alimentação do aduto) é
10 alimentado a coluna a um fluxo baixo, de modo que uma fina camada de líquido se forme sobre ao menos uma porção da superfície das partículas de catalisador de hidrogenação (ou do catalisador de hidrogenação na superfície do material de suporte). Quando o processo de redução for um
15 processo de hidrogenação, o espaço entre as partículas pode ser alimentado com o gás hidrogênio. Sem a intenção de ser limitado por qualquer mecanismo em particular, acredita-se que a distância através da qual as moléculas de hidrogênio precisam se deslocar desde a fase gasosa até
20 a superfície do catalisador é a da fina camada de líquido, o que resulta em uma transferência de massa eficiente e em um aumento da velocidade de reação, em comparação a outras configurações de reator. O reator de leito gotejante pode compreender ao menos uma coluna recheada, sendo que a
25 coluna é preenchida com o catalisador de hidrogenação. Em determinadas modalidades, o reator de leito gotejante pode compreender uma pluralidade de colunas preenchidas com o catalisador de hidrogenação, como, por exemplo, de 2 a 10 colunas, dispostas em série ou em paralelo. O versado na

técnica irá reconhecer que o número de colunas no reator de leito gotejante pode variar, de acordo com o tempo de reação necessário, a taxa de fluxo do processo, e/ou a altura, o volume total do leito, ou a carga de catalisador da coluna.

O produto à base de aminoálcool (154) pode compreender, também, em adição a um aminoálcool, qualquer um selecionado dentre um aduto não-reagido, amina não-reagida, agente redutor, impurezas, água e propileno glicol. Semelhante às reações anteriores, as condições de reação em que o aduto pode ser reduzido pelo agente redutor podem ser diferentes.

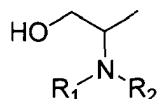
Uma vez que o produto à base de aminoálcool é obtido, os vários componentes do produto à base de aminoálcool, bem como o agente redutor, podem, opcionalmente, ainda ser separados um do outro em um ou mais processos de separação, usando-se qualquer método adequado que seja conhecido pelos versados na técnica. Por exemplo, o agente redutor pode ser opcionalmente separado (156) do produto à base de aminoálcool e ser retornado para o terceiro reator (150), sendo reciclado (158) para reutilização. Se o agente redutor compreender hidrogênio na presença de um catalisador de hidrogenação, o hidrogênio pode ser adicionalmente separado do catalisador de hidrogenação e ambos podem ser reciclados novamente para reutilização em processos posteriores (não mostrados).

Da mesma forma, o produto à base de aminoálcool pode ser separado (160), de modo que sejam obtidos os produtos individuais (isto é, aduto não-reagido (162),

amina não-reagida (166), impurezas (168), água (170), e propileno glicol (172)). Por exemplo, fluxos de aduto não-reagido (162) e de amina não-reagida (166) podem ser reciclados para reutilização, para se economizar em custos com matéria prima. A água (170), as impurezas (168) e o propileno glicol (172) podem ser considerados subprodutos da reação e, desse modo, podem ser separados e removidos dos outros produtos de reação, podendo ser processados para uso posterior em uma outra aplicação (propileno glicol), reciclados, ou descartados (água e impurezas). O processo de separação (160) pode incluir qualquer processo de separação que seja conhecido na técnica, incluindo, mas não se limitando a, destilação em equilíbrio, destilação fracionada, cromatografia, extração, passagem através de uma resina ácida, e combinações dos mesmos. Finalmente, o aminoálcool (174) pode ser coletado como o produto desejado para uso em uma variedade de aplicações como, por exemplo, solventes, intermediários para a produção de agentes ativos de superfície, inibidores de corrosão em fluidos para metalurgia, agentes neutralizantes de lavagem ácida em processos de purificação de gás natural ou gás de síntese, e elementos de auxílio na preparação de compostos para uso na indústria farmacêutica. Conforme será entendido pelos versados na técnica, os processos de separação específicos usados e o grau de separação irão depender da pureza desejada dos produtos de reação.

O aminoálcool desejado pode ser um 2-amino-1-propanol. Em determinadas modalidades, o produto à base de

aminoálcool pode ser um 2-amino-1-propanol com a seguinte fórmula geral:



5

onde R_1 e R_2 são independentes um do outro e são selecionados a partir do grupo que consiste em H, alquila C_1-C_{20} com cadeia linear ou ramificada (como metila, etila, n-propila, isopropila, n-butila, isobutila, sec-butila, t-butila, n-pentila, isopentila, sec-pentila, neopentila, n-hexila, n-heptila, n-octila, 2-etil hexila, n-decila, n-dodecila, 2-butiloctila, n-tridecila, n-tetradecila), cicloalquila C_3-C_{20} (por exemplo, cicloalquila C_3-C_8 , como ciclopropila, ciclobutila, ciclopentila, ciclohexila, cicloheptila, e ciclooctila), hidróxi alquila C_1-C_{20} (como 2-hidróxi etila, 2-hidróxi-n-propila, 3-hidróxi-n-propila, 1-hidróxi-metil-etila), arila (como fenila, 1-naftila, 2-naftila, 1-antrila, 2-antrila, e 9-antrila), alquil arila C_7-C_{20} (como 2-metilfenila, 3-metilfenila, 4-metilfenila, 2,4-dimetilfenila, 2,5-dimetilfenila, 2,6-dimetilfenila, 3,4-dimetilfenila, 3,5-dimetilfenila, 2-etilfenila, 3-etilfenila, 4-etilfenila, 2-n-propilfenila, 3-n-propilfenila, 4-n-propilfenila), arilalquila C_7-C_{20} (como benzila, 1-fenetila, 2-fenetila, 1-fenilpropila, 2-fenilpropila, 3-fenilpropila, 1-fenilbutila, 2-fenilbutila, 3-fenilbutila, 4-fenilbutila) e misturas dos mesmos. Em outras modalidades, R_1 e R_2 podem se unir para formar um anel heterocíclico contendo de 5 a 7 átomos anelares, incluindo o átomo de nitrogênio. Tendo em vista os processos aqui descritos, o versado na técnica irá entender que outras

30

estruturas para os grupos R_1 e R_2 são possíveis, dependendo da estrutura do composto de amina usado na etapa opcional dos processos, e estarão dentro do escopo da presente descrição, conforme expresso nas reivindicações.

5 Tendo em vista o que foi citado acima, deve-se compreender que modalidades dos presentes processos podem ser realizadas usando-se um modo por batelada, por semi-batelada, ou contínuo.

Embora determinadas modalidades da presente
10 descrição possam ser descritas como um processo em dois estágios, aqueles que são versados na técnica irão apreciar que o mesmo resultado pode ser obtido em um processo de estágio único. Agora, será feita referência à Figura 2, em que o glicerol (200) e a corrente de gás opcional (212) são
15 alimentados no reator (210). Estes dois fluxos podem, opcionalmente, passar através do evaporador (206) antes de serem alimentados no reator (210). O evaporador (206) pode remover compostos não-voláteis (218) do suprimento de glicerol. O composto de amina (244) é alimentado, ou
20 diretamente no reator (210), ou misturado com os outros reagentes (200, 212), antes de entrar no reator (210). A reação de glicerol para hidróxi acetona para o aminoálcool ocorre no reator (210). A mistura de produtos brutos é alimentada em um condensador (260), sendo que a mistura de
25 produtos desejada (274) é separada dos gases não-reagidos e de outros subprodutos (272). Os fluxos de alimentação (200, 212 e 244) são iguais àqueles descritos acima, no que se refere ao processo em dois estágios da Figura 1. Em determinadas modalidades, onde o composto de amina é um
30 gás, como amônia gasosa, o composto de amina pode servir como o gás (212). Em outras modalidades, onde o agente

reductor (252) é hidrogênio e um catalisador de hidrogenação, o gás hidrogênio pode servir como o gás (212). Em outras modalidades, o gás (212) pode ser uma mistura de gases, incluindo uma amina gasosa e/ou hidrogênio. Da mesma forma, o equipamento usado (206, 210 e 260) pode ser qualquer um dos evaporadores, reatores, e condensadores aqui descritos. Em determinadas modalidades, o reator pode ser um reator de leito fixo, como um reator de leito gotejante, conforme descrito na presente invenção. Em determinada modalidade, o reator de leito fixo pode conter ou ser preenchido com uma mistura do catalisador metálico e do catalisador de hidrogenação (conforme descrito na presente invenção). Em outras modalidades, o catalisador metálico e o catalisador de hidrogenação podem ser iguais.

Os seguintes exemplos representativos são incluídos para propósitos ilustrativos e não limitadores.

Exemplos

Exemplo 1

Cerca de 300 g de glicerol refinado (Marca Superol, P&G Chemicals, EUA) e cerca de 8,5 g de catalisador à base de cromita de cobre (CU-1886P, Engelhard, EUA) foram pesados e transferidos para um frasco de reação de 500 mL, equipado com um agitador mecânico, um termopar, um condensador/coletor de Dean Stark, e uma entrada de gás. O artigo de vidro foi montado de modo que a hidróxi acetona volátil fosse removida do reator à medida em que ela fosse formada (isto é, pulverização do gás N₂) e de modo que se pudesse coletar amostras, ao longo do tempo, para análise posterior. Os componentes da reação foram aquecidos até cerca de 230°C,

com agitação constante à pressão atmosférica. Amostras do produto à base de hidróxi acetona resultante foram analisadas em um Cromatograma de Gás Agilent 6890N, usando-se uma coluna de filme SPB-1701 de 30 m x 25 mm I.D. x 0,25 μ m (Supelco). Padrões de propileno glicol e de hidróxi acetona foram usados como padrões de referência. As amostras também foram analisadas quanto ao teor de água, usando-se um auto-titulado modelo V-200 AquaStar Karl Fisher (EMScience) (recentemente calibrado com o padrão para água). Cerca de 238,6 g de produto à base de hidróxi acetona foram obtidos, contendo cerca de 65,9% de hidróxi acetona e cerca de 21,7% de água. A separação foi executada usando-se destilação fracionada sob vácuo, para produzir cerca de 155 g de hidróxiacetona a 90%. Cerca de 43 g da hidróxi acetona foram carregados em um frasco e resfriados até cerca de 0°C. Cerca de 120 mL de hidróxido de amônio aquoso a 30% foram adicionados à hidróxi acetona, por gotejamento, com agitação, ao mesmo tempo em que a temperatura de reação era mantida abaixo de cerca de 10°C. A mistura foi agitada durante cerca de 60 a 90 minutos e o avanço da reação foi monitorado por meio de cromatografia a gás. O aduto resultante foi carregado em um reator Parr de 300 mL, junto com cerca de 5 g de um catalisador de níquel (Actimet M, Engelhard, EUA). O reator foi limpo com fluxo de gás hidrogênio, pressurizado a cerca de 7,58 MPa (1.100 psig) e aquecido até cerca de 85°C. O avanço da reação foi monitorado em vários intervalos de tempo por meio do uso de um Cromatograma de Gás Agilent 6890N, usando-se uma coluna de filme SPB-1701 de 30 m x 25 mm I.D. x 0,25 μ m (Supelco). Padrões de propileno glicol, hidróxi acetona, e 2-amino-1-propanol

foram conduzidos para fins de referência. O reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador de níquel foi separado por meio de filtração, para produzir cerca de 71,5% de 2-amino-1-propanol.

5 Exemplo 2

Cerca de 375 g de glicerol refinado (96% de glicerol, P&G Chemicals, EUA) e cerca de 11,25 g de catalisador à base de cromita de cobre (CU-1886P, Engelhard, EUA) foram pesados e transferidos para um frasco
10 de reação de 500 mL, equipado com um agitador mecânico, um termopar, um condensador/coletor de Dean Stark, e uma entrada de gás. O equipamento de vidro foi montado, de modo que a hidróxi acetona volátil fosse removida do reator na medida em que ela fosse sendo formada (isto é, pulverização
15 de gás N₂). Os componentes da reação foram aquecidos até cerca de 230°C, com agitação constante à pressão atmosférica. Amostras do produto à base de hidróxi acetona resultante foram coletadas e analisadas conforme descrito no Exemplo 1. Cerca de 274,9 g do produto à base de hidróxi
20 acetona (contendo cerca de 63,7% de hidróxi acetona) foram obtidos e separados por destilação. Cerca de 43 g da hidróxiacetona resultante (contendo cerca de 90% de pureza) foram carregados em um frasco a uma temperatura de cerca de 10°C. Cerca de 120 mL de hidróxido de amônio aquoso a 30%
25 foram adicionados por gotejamento, com agitação, ao mesmo tempo em que a temperatura de reação foi mantida a cerca de 10°C. A mistura foi agitada por cerca de 60 a 90 minutos e o avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás. O aduto resultante foi, então, carregado em um
30 reator Parr de 300 mL, junto com cerca de 10 g de um catalisador de níquel (Actimet M, Engelhard, EUA). O reator

foi pulverizado com lavado com fluxo de hidrogênio, pressurizado a cerca de 7,58 MPa (1.100 psig) e aquecido até cerca de 85°C. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás, conforme descrito no Exemplo 1. O reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador de níquel foi separado do produto à base de aminoálcool por meio de filtração, produzindo cerca de 84,6% de 2-amino-1-propanol.

Exemplo 3

Cerca de 88 g de glicerol bruto (glicerol a 88,7% , Twin Rivers Technologies, EUA) foram pulverizados em um frasco de reação de 500 mL equipado com um agitador mecânico, um termopar, um condensador/coletor Dean Stark, e uma entrada de gás. Cerca de 9 g de catalisador à base de cromita de cobre (CU-1886P, Engelhard, USA) foram adicionados ao reator. O equipamento de vidro foi montado, de modo que a hidróxi acetona volátil fosse removida do reator, na medida em que fosse sendo formada (isto é, pulverização de gás N₂). Amostras do produto à base de hidróxi acetona resultante foram coletadas e analisadas conforme descrito no Exemplo 1. Cerca de 207,9 g do produto à base de hidróxi acetona (contendo cerca de 49,8% de hidróxi acetona) foram obtidos. Cerca de 50 g do produto à base de hidróxi acetona foram, então, carregados em um frasco e cerca de 61 mL de hidróxido de amônio aquoso a 30% foram adicionados por gotejamento, com agitação, a temperatura ambiente. A mistura foi agitada durante cerca de 90 minutos e o avanço da reação foi monitorado usando-se cromatografia a gás. O aduto resultante foi carregado em um reator Parr de 300 mL, junto com cerca de 6 g de um catalisador de níquel

(Actimet M, Engelhard, EUA). O reator foi limpo com fluxo de gás hidrogênio, pressurizado a cerca de 7,58 MPa (1.100 psig) e aquecido até uma temperatura de cerca de 85°C. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás, conforme descrito no Exemplo 1. O reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador de níquel foi separado do produto à base de aminoálcool resultante, por meio de filtração, com rendimento de cerca de 83,5% de 2-amino-1-propanol.

10 Exemplo 4

Cerca de 299 g de glicerol refinado (Marca Superol, P&G Chemicals, EUA) e cerca de 8,5 g de catalisador à base de cromita de cobre (CU-1955P, Engelhard, EUA) foram pesados e transferidos para um frasco de reação de 500 mL. O frasco foi equipado com um agitador mecânico, um termopar, um condensador/coletor Dean Stark, e uma entrada de gás. O equipamento de vidro foi montado, de modo que a hidróxi acetona volátil fosse removida do reator na medida em que fosse sendo formada (isto é, pulverização de gás N₂ é usada). Amostras do produto à base de hidróxi acetona resultante foram coletadas e analisadas conforme descrito no Exemplo 1. Cerca de 235 g do produto à base de hidróxi acetona foram obtidos e determinou-se que ele continha cerca de 59,4% de hidróxiacetona. O produto à base de hidróxi acetona foi separado usando-se destilação fracionada, sob vácuo, rendendo cerca de 150 g de hidróxiacetona a 90%, sendo que cerca de 95 g da mesma foram, então, carregados em um frasco. O gás de amônia (Mattheson Tri Gas, EUA) foi lentamente borbulhado através da hidróxi acetona por cerca de 30 minutos, enquanto se mantinha a temperatura em ou abaixo de cerca de 20°C,

seguido de agitação por um período adicional de 30 minutos. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás. O aduto resultante foi carregado em um reator Parr de 300 mL, junto com cerca de 18 g de um catalisador de níquel (Actimet M, Engelhard, EUA). O reator foi limpo com fluxo de gás hidrogênio, pressurizado a cerca de 7,58 MPa (1.100 psig) e aquecido até uma temperatura de cerca de 85°C. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás, conforme descrito no Exemplo 1. O reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador de níquel foi separado do produto à base de aminoálcool resultante, por meio de filtração, produzindo cerca de 33,4% de 2-amino-1-propanol.

Exemplo 5

Neste exemplo, a hidróxi acetona foi convertida em 2-amino-1-propanol, usando-se um catalisador de hidrogenação à base de óxido de níquel. A hidróxi acetona (36,71 g, 0,50 mol) foi carregada em um frasco de fundo redondo de 250 mL, à temperatura ambiente. O hidróxido de amônio (100 mL, 1,48 mol) foi adicionado por gotejamento, com agitação. A reação foi agitada durante um tempo total de 90 minutos. O avanço foi monitorado através de cromatografia a gás. A solução de aduto resultante foi carregada em um reator Parr de 300 mL, junto com óxido de níquel em Kieselguhr (Sud-Chemie, G-49B RS: 1,52 g, 1,1 %, em peso,). O reator foi limpo quatro vezes com fluxo H₂, foi pressurizado com H₂ a 15,17 MPa (151,7 bar), e aquecido até 85°C, com agitação à 1.500 rpm, usando-se uma hélice de carregamento de gás. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás, conforme descrito no Exemplo 1. O reator foi resfriado até a temperatura

ambiente e o catalisador foi separado por meio de filtração, para produzir 2-amino-1-propanol com uma conversão de 96% e uma seletividade de 98%.

Exemplo 6

5 Neste exemplo, a hidróxi acetona foi convertida em 2-amino-1-propanol, usando-se um catalisador de hidrogenação à base de óxido de níquel, a uma pressão mais baixa de hidrogênio. A hidróxi acetona (36,92 g, 0,50 mol) foi carregada em um frasco de fundo redondo de 250 mL, à
10 temperatura ambiente. O hidróxido de amônio (100 mL, 1,48 mol) foi adicionado por gotejamento, com agitação. A reação foi agitada durante um tempo total de 90 minutos. O avanço foi monitorado através de cromatografia a gás. A solução de aduto resultante foi carregada em um reator Parr de 300 mL,
15 junto com óxido de níquel em kieselguhr (Sud-Chemie, G-49B RS: 1,55 g, 1,1 %, em peso,). O reator foi lavado quatro vezes com fluxo de H₂, pressurizado com H₂ a 3,45 MPa (34,5 bar), e aquecido até 85°C, com agitação à 1.500 rpm, usando-se uma hélice de carreamento de gás. O avanço da
20 reação foi monitorado através de cromatografia a gás, conforme descrito no Exemplo 1. O reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador foi separado por meio de filtração, para produzir 2-amino-1-propanol com uma conversão de 92% e uma seletividade de 73%.

Exemplo 7

25 Neste exemplo, a hidróxi acetona foi convertida em uma mistura de produto que compreende propileno glicol e 2-amino-1-propanol, em um tipo de processo por lote. A hidróxi acetona (98,91 g, 1,34 mol) foi carregada em um frasco de
30 fundo redondo de 250 mL, à temperatura ambiente. O hidróxido de amônio (46,0 mL, 0,68 mol) foi adicionado por

gotejamento, com agitação. A reação foi agitada durante um tempo total de 90 minutos. O avanço foi monitorado através de cromatografia a gás. A solução de aduto resultante foi carregada em um reator Parr de 300 mL, junto com cerca de 5 g de um catalisador de níquel (Actimet M, Engelhard, EUA). O reator foi limpo com fluxo de H₂, pressurizado com H₂ a 15,17 MPa (151,7 bar), e aquecido até 85°C, com agitação à 1.500 rpm, usando-se uma hélice de carregamento de gás. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás, conforme descrito no Exemplo 1. O reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador foi separado por meio de filtração, para produzir uma mistura de produto que compreende 2-amino-1-propanol (17,9%) e propileno glicol (30,7%).

15 Exemplo 8

Neste exemplo, a hidróxi acetona foi convertida em propileno glicol em um tipo de processo por lote. A hidróxi acetona bruta, 70 g, (obtida conforme descrito no Exemplo 1) foi carregada em um reator Parr de 300 mL, junto com 0,5 g de um catalisador de Ru/C (Aldrich Chemicals, Milwaukee, WI, EUA). O reator foi limpo com fluxo de H₂ diversas vezes, pressurizado com H₂ a 1,03 MPa (10,3 bar) e aquecido até 120°C, sob agitação vigorosa por 3 horas. O reator foi, então, resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador foi separado por meio de filtração, para produzir a mistura de produto com uma composição de acordo com a Tabela 1.

Tabela 1. Mistura de Produto a partir da
Redução de Hidróxi Acetona

%, em peso, de Componente	Hidróxi acetona Bruta	Produto de Reação
Hidróxi acetona	63,9	4,0
Propileno glicol	3,0	67,6
Água	19,6	21,6
Glicerol	1,2	3,1
Subprodutos	12,3	3,8

5

Exemplo 9

Neste exemplo, o glicerol foi convertido em propileno glicol par meio de uma reação de estágio único (no reator). O glicerol (100 g, 1,1 mol) foi carregado em um reator PArr de 300 mL, junto com 5 g de um catalisador à base de cromita de cobre (CU-1886P, Engelhard, EUA). O reator foi limpo com fluxo de H₂ diversas vezes, pressurizado com H₂ a 10,34 MPa (103,4 bar) e aquecido até 230°C, sob agitação vigorosa a 550 rpm. O avanço da reação foi monitorado através de cromatografia a gás. Após 21 horas, o reator foi resfriado até a temperatura ambiente e o catalisador foi separado por filtração, para produzir uma mistura de produto contendo 55% de glicerol, 35% de propileno glicol, 3,9% de propanol, e outras impurezas como etileno glicol, metanol e etanol.

20

Exemplo 10

Neste exemplo, a hidróxi acetona reagiu com o hidróxido de amônio para gerar o aduto, que foi convertido em 2-amino-1-propanol através do uso de um reator de leito gotejante. A hidróxi acetona (37,33 g, 0,50 mol) foi

carregada em um frasco de fundo redondo de 250 mL, à temperatura ambiente. O hidróxido de amônio (100 mL, 1,48 mol) foi adicionado por gotejamento, com agitação. A reação foi agitada durante um tempo total de 90 minutos. O avanço
 5 foi monitorado através de cromatografia a gás. O aduto foi submetido ao reator de leito gotejante.

Foi usado um reator de leito gotejante com um comprimento de 37,9 cm e um diâmetro interno de 2,54 cm. A solução de aduto foi alimentada no reator por meio de uma
 10 bomba de HPLC. O catalisador usado foi um catalisador de níquel RANEY® (Raney 5886, disponível comercialmente junto à GRACE Davison), fornecido sob a forma de partículas. A pressão de H₂ no reator foi de 3,1 MPa (31,0 bar). A reação foi conduzida em três passagens, alterando-se o tempo de
 15 permanência no reator, a razão entre hidrogênio e o aduto, a taxa de fluxo de alimentação e a taxa de fluxo de gás. As condições de cada passagem são apresentadas na Tabela 2. Amostras de produto do reator foram condensadas e foram analisadas em um Cromatograma a Gás Agilent 6890N, mediante
 20 o uso de uma coluna de filme SPB-1701 de 30 m x 25 mm I.D. x 0,25 µm (disponível junto à Supelco). Os resultados das três passagens são apresentadas na Tabela 3.

Tabela 2. Condições de Reação

Exemplo	10,1	10,2	10,3
Temperatura de Entrada, em °C	85	85	85
Temperatura da Coluna, em °C	85	85	85
Pressão, em MPa (bar)	3,1 (31,0)	3,1 (31,0)	3,1 (31,0)
Tempo de Permanência, em s	1.200	2.400	600
Razão Entre Hidrogênio e Aduto	8	16	16
Taxa de Fluxo de Alimentação (mL/min)	0,5	0,25	1,0
Taxa de Fluxo de Gás (sccm)	49,8	49,8	102,6

Tabela 3. Resultados para a Produção de 2-Amino-1-Propanol por Leito Gotejante

Exemplo	10,1	10,2	10,3
% de Aduto	38,9	25,1	63,4
% de 2-Amino-1-Propanol	58,8	60,8	29,7
% de hidróxi acetona	2,3	3,6	2,9
% de Propileno glicol	0	0	0
% de Outros	0	10,5	4

Exemplo 11

5 Neste exemplo, um reator de leito gotejante é usado para converter hidróxi acetona em propileno glicol. É usado um reator de leito gotejante com um comprimento de 37,9 cm e um diâmetro interno de 2,54 cm. Uma solução de hidróxi acetona contendo 20 %, em peso, de água é alimentada no reator por meio de uma bomba de HPLC. O catalisador usado é um catalisador de níquel RANEY® (Raney 5886, disponível comercialmente junto à GRACE Davison), fornecido sob a forma de partículas.

15 As condições de reação usadas são apresentadas na Tabela 4. As amostras de produto do reator são condensadas e analisadas em um Cromatograma de Gás Agilent 6890N, mediante o uso de uma coluna DB-1 de 25 m x 0,53 mm I.D. x 5,00 microns (disponível junto à J & W Scientific. N° de catálogo 1251025).

20 A análise dos constituintes orgânicos, através de cromatografia a gás do produto de reação, mostra uma mistura que compreende propileno glicol, hidróxi acetona e água. A água e a hidróxi acetona são evaporadas do produto,

mediante o uso de um secador à vácuo giratório de laboratório, deixando um produto final que compreende propileno glicol

Tabela 4. Condições de Reação

Alimentação	Hidróxi acetona Purificada (> 99%)
Pressão	cerca de 3,1 MPa (31,0 bar)
Temperatura	cerca de 85°C
Taxa de Fluxo do Hidrogênio	cerca de 90 sccm
Taxa de Fluxo da Amônia	cerca de 10 sccm
Taxa de Fluxo de Alimentação	cerca de 0,5 mL/min

5

Exemplo 12

Neste exemplo, um reator de leito gotejante é usado para converter hidróxi acetona em uma mistura de produto que compreende propileno glicol e 2-amino-1-propanol, através de um intermediário de aduto. Um reator de
 10 leito gotejante com um comprimento de 37,94 cm, um diâmetro interno de 2,54 cm e contendo cerca de 190 cc de catalisador é preparado. O catalisador é um catalisador de níquel RANEY® (Raney 5886, disponível comercialmente junto à GRACE Davison), fornecido sob a forma de partículas.

15

Uma solução de hidróxi acetona é alimentada ao reator por meio de uma bomba HPLC. Amostras de produto oriundas do reator foram condensadas e analisadas em um Cromatograma de Gás Agilent 6890N, mediante o uso de uma coluna DB-1 de 25 m x 0,53 mm I.D. x 5,00 microns (disponível junto à J & W Scientific. N° de catálogo

1251025). As condições de reação usadas são apresentadas na Tabela 5.

A análise dos constituintes orgânicos, através de cromatografia a gás do produto de reação, mostra uma
 5 mistura de 2-amino-1-propanol, propileno glicol, hidróxi acetona e água. A água e a hidróxi acetona são evaporadas do produto, mediante o uso de um secador à vácuo giratório de laboratório, deixando um produto final composto de 2-amino-1-propanol e propileno glicol

10

Tabela 5. Condições de Reação

Alimentação	Hidróxi acetona Purificada (> 99%)
Pressão	cerca de 3,1 MPa (31,0 bar)
Temperatura	cerca de 85°C
Taxa de Fluxo do Hidrogênio	cerca de 90 sccm
Taxa de Fluxo da Amônia	cerca de 10 sccm
Taxa de Fluxo de Alimentação	cerca de 0,5 mL/min

Exemplo 13

Neste exemplo, o glicerol foi convertido em
 15 propileno glicol mediante o uso de um reator de leito gotejante. O reator usado para a versão contínua desse processo foi um reator de leito gotejante, com um comprimento de 37,94 cm, um diâmetro interno de 2,54 cm e contendo 190 cc de catalisador. O catalisador usado foi um

catalisador à base de cromita de cobre (CU-1808 T 1/8, disponível comercialmente junto à Engelhard) sob a forma de péletes extrudados de 3,2 mm.

O catalisador, uma vez carregado, foi ativado,
5 primeiramente, por um suprimento de fluxo de 100% de nitrogênio ao reator, aquecendo-se o reator até que o mesmo alcançasse a temperatura de ativação desejada de 130°C. O fluxo de gás nitrogênio foi, então, substituído por um fluxo incluindo 98% por volume de nitrogênio e 2%
10 por volume de hidrogênio, e as condições foram mantidas até que nenhuma exoterma fosse notada no leito de catalisador. Durante essa operação, que durou várias horas, foi importante evitar que a temperatura ultrapassasse os 170°C. O hidrogênio foi aumentado de
15 maneira incremental (2, 5, 10, 25, 50, 100%) até que o fluxo fosse somente de hidrogênio.

Quinze processos foram conduzidos, enquanto as condições de reação variavam (temperatura, taxa de fluxo de glicerol, taxa de fluxo de hidrogênio, razão molar
20 entre o hidrogênio e o glicerol, e tempo de permanência dentro do reator). As condições de reação para os vários processos estão contidas na lista da Tabela 6. As amostras de produto foram analisadas em um Cromatograma de Gás Agilent 6890N, mediante o uso de uma coluna DB-1 de 25 m x
25 0,53 mm I.D. x 5,00 microns (disponível junto à J & W Scientific. N° de catálogo 1251025). As composições da mistura de produto, para cada um dos quinze processos, estão contidas na lista da Tabela 7.

Tabela 6. Condições de Reação

Análise n°	Temperatura (°C)	Pressão (MPa (bar))	Taxa de Fluxo do Glicerol (mL/min)	Taxa de Fluxo do H ₂ (sccm)	Razão Molar (H ₂ :Gly)	Tempo de Permanência (min)
1	200	3,2 (32,0)	0,5	36	4 para 1	15 m
2	200	3,2 (32,0)	0,5	178,3	20 para 1	15 m
3	200	3,2 (32,0)	0,5	356,5	40 para 1	15 m
4	200	3,2 (32,0)	0,12	11,14	5 para 1	60 m
5	200	3,2 (32,0)	0,25	34,3	10 para 1	30 m
6	200	3,2 (32,0)	0,25	76,25	20 para 1	30 m
7	200	3,2 (32,0)	0,5	73,025	10 para 1	15 m
8	180	3,2 (32,0)	0,25	36,51	10 para 1	30 m
9	220	3,2 (32,0)	0,25	36,51	10 para 1	30 m
10	220	3,2 (32,0)	0,25	109,54	30 para 1	30 m
11	180	3,2 (32,0)	0,75	36,51	3,33 para 1	10 m
12	180	3,2 (32,0)	0,25	109,54	30 para 1	30 m
13	220	3,2 (32,0)	0,75	36,51	3,33	10 m

					para 1	
14	180	3,2 (32,0)	0,75	109,54	10 para 1	10 m
15	220	3,2 (32,0)	0,75	109,54	10 para 1	10 m

Tabela 7. Resultados para Produção de Propileno

Glicol em Leito Gotejante

Análise n°	Dados do Cromatógrafo a Gás, em % de peso			
	% de PG	% de HA	% Gli	% de Outros
1	37,8%	1,9%	52,8%	7,5%
2	41,2%	2,8%	44,8%	11,2%
3	38,8%	2,2%	51,2%	7,8%
4	62,4%	8,9%	18,3%	10,4%
5	72,4%	5,6%	10,3%	11,8%
6	62,4%	9,2%	19,9%	8,5%
7	38,9%	1,6%	40,3%	19,2%
8	35,3%	8,4%	29,6%	26,6%
9	49,6%	6,1%	12,8%	31,5%
10	45,7%	2,9%	22,7%	28,7%
11	13,0%	2,9%	70,1%	13,9%
12	26,5%	6,6%	24,5%	42,4%
13	36,8%	5,6%	16,2%	41,3%
14	11,7%	0,8%	76,3%	11,3%
15	36,0%	3,6%	21,9%	38,5%

PG = propileno glicol, HA = hidróxi acetona, Gli = glicerol

As dimensões e valores apresentados na presente invenção não devem ser compreendidos como estando estritamente limitados aos exatos valores numéricos mencionados. Em vez disso, exceto onde especificado em
5 contrário, cada uma dessas dimensões se destina a significar tanto o valor mencionado como uma faixa de valores funcionalmente equivalentes em torno daquele valor. Por exemplo, uma dimensão apresentada como "40 mm" destina-se a significar "cerca de 40 mm".

10 Todos os documentos citados na Descrição Detalhada da Invenção estão, em sua parte relevante, aqui incorporados, a título de referência. A citação de qualquer documento não deve ser interpretada como admissão de que este represente técnica anterior com respeito à presente
15 invenção. Se algum significado ou definição de um termo deste documento escrito entrar em conflito com algum significado ou definição do termo em um documento incorporado por referência, o significado ou definição atribuída ao termo neste documento escrito terá
20 precedência.

Embora tenham sido descritas modalidades específicas adequadas ao uso no método da presente invenção, ficará óbvio aos versados na técnica que diversas alterações e modificações da presente invenção podem ser feitas sem que
25 se afaste do espírito e do escopo da invenção. Portanto, pretende-se cobrir nas reivindicações anexas, todas essas alterações e modificações que se enquadram no escopo da presente invenção.

REIVINDICAÇÕES

1. Processo para converter glicerol em um produto à base de aminoálcool, **caracterizado** pelo fato de que o processo compreende:

- 5 - reagir o glicerol com um catalisador metálico para se obter hidróxi acetona;
- reagir a hidróxi acetona com um composto de amina, para se obter um aduto; e
- reduzir o aduto, mediante o uso de um agente
- 10 reductor, para se obter um produto à base de aminoálcool.

2. Processo, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o catalisador metálico é selecionado a partir do grupo que consiste em cobre, cromo, níquel, zinco, cobalto, manganês, silício, alumínio,

15 cromita de cobre, cobre-zinco, óxidos do mesmo, e combinações dos mesmos.

3. Processo, de acordo com a reivindicação 1 ou 2, **caracterizado** pelo fato de que a etapa de reação do glicerol com o catalisador metálico é realizada a uma

20 temperatura de 160°C a 300°C.

4. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2 ou 3, **caracterizado** pelo fato de que a etapa de reação do glicerol com o catalisador metálico é realizada a uma pressão de 0,01 MPa (0,1 bar) a 1 MPa (10

25 bar).

5. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3 ou 4, **caracterizado** pelo fato de que o composto de amina é selecionado a partir do grupo que consiste em amônia, hidróxido de amônio, hidroxilamina,

aminas primárias, amina secundária, alcanolaminas e combinações dos mesmos.

6. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4 ou 5, **caracterizado** pelo fato de
5 que o aduto é reduzido a uma temperatura de 20°C a 250°C.

7. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5 ou 6, **caracterizado** pelo fato de que a reação do glicerol com o catalisador metálico ocorre sob aspersão de gás.

10 8. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5, 6 ou 7, **caracterizado** pelo fato de que o agente redutor compreende hidrogênio na presença de um catalisador de hidrogenação selecionado do grupo consistindo em níquel, cobalto, níquel RANEY®, cobalto
15 RANEY®, níquel RANEY® ou cobalto RANEY® dopado com outros metais de transição, óxido de níquel, cobre, paládio, platina, ródio, rutênio, cromo, irídio, rênio, molibdênio, ferro, manganês, titânio, zircônio, magnésio, óxidos dos mesmos, e combinações dos mesmos; de preferência, em que o
20 hidrogênio está a uma pressão na faixa de 0,1 MPa (1 bar) a 35 MPa (350 bar); e, de preferência em que o catalisador de hidrogenação é suportado em um material selecionado do grupo consistindo em alumina, óxido de titânio, zircônia, carvão vegetal, óxido de cromo, sílica, zeólitos, e combinações dos
25 mesmos.

9. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 ou 8, **caracterizado** pelo fato de que a reação do glicerol com o catalisador metálico para se obter hidróxi acetona ocorre em um primeiro reator,

de preferência um reator de leito gotejante, e sendo que a hidróxi acetona é transferida para um ou mais outros reatores para completar a reação até o produto à base de aminoálcool.

5 10. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5 ou 6, **caracterizado** pelo fato de que a redução do aduto mediante o uso de um agente redutor ocorre em um reator de leito gotejante.

10 11. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5 ou 6, **caracterizado** pelo fato de que a reação do glicerol com o catalisador metálico ocorre em um primeiro reator de leito gotejante e a redução do aduto mediante o uso de um agente redutor ocorre em um segundo reator de leito gotejante.

15 12. Processo, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5 ou 6, **caracterizado** pelo fato de que a reação do glicerol com o catalisador metálico para se obter hidróxi acetona ocorre em um primeiro reator, de preferência um reator de leito gotejante, e a hidróxi
20 acetona é convertida em um produto à base de aminoálcool no primeiro reator.

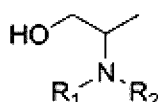
 13. Processo para converter glicerol em um produto à base de aminoálcool, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 ou 12,
25 **caracterizado** pelo fato de que o processo compreende:

 - reagir o glicerol com um catalisador metálico a uma temperatura de 160°C a 300°C, para se obter hidróxi acetona;

- reagir a hidróxi acetona com um composto de amina a uma temperatura de -20°C a 150°C para a obtenção de um aduto; e

- reduzir o aduto mediante o uso de um agente redutor a uma temperatura de 20°C a 250°C para se obter um produto à base de aminoálcool.

14. Processo para converter glicerol em um produto à base de aminoálcool, com a fórmula



de acordo com qualquer uma das reivindicações 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 ou 13, **caracterizado** pelo fato de que o processo compreende:

- reagir o glicerol com um catalisador metálico, a uma temperatura de 160°C a 300°C para obter hidróxi acetona;

- reagir a hidróxi acetona com um composto de amina a uma temperatura de -20°C a 150°C para obter um aduto; e

- reduzir o aduto usando um agente redutor a uma temperatura de 20°C a 250°C para obter um produto a base de aminoálcool;

sendo que R_1 e R_2 são independentes entre si e são selecionados a partir do grupo consistindo em H, alquila $\text{C}_1\text{--C}_{20}$, cicloalquila $\text{C}_3\text{--C}_{20}$, hidróxi alquila $\text{C}_1\text{--C}_{20}$, arila, alquil $\text{C}_7\text{--C}_{20}$ arila, aril $\text{C}_7\text{--C}_{20}$ alquila, ou R_1 e R_2

que se unem com o nitrogênio para formar um anel heterocíclico tendo de 5 a 7 átomos anelares.

15. Processo para converter glicerol em 2-amino-1-propanol, de acordo com qualquer uma das reivindicações
5 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 ou 14, **caracterizado** pelo fato de que o processo compreende:

- reagir o glicerol com um catalisador metálico para obter hidróxi acetona;
- reagir a hidróxi acetona com hidróxido de
10 amônio para obter um aduto; e
- reduzir o aduto usando um agente redutor para obter 2-amino-1-propanol.

FIG. 1

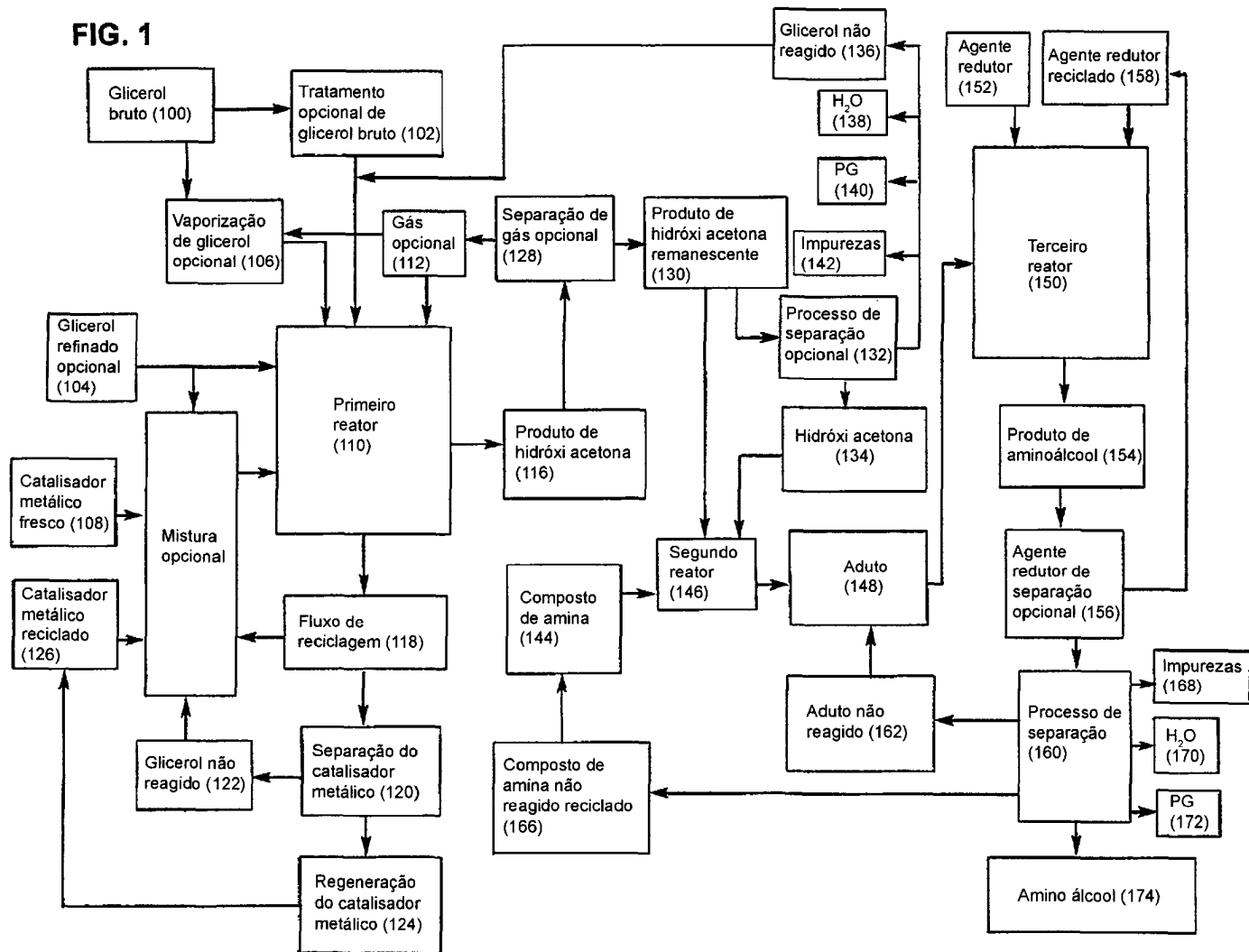


FIG. 2

