

**1º TERMO ADITIVO AO ACORDO DE COOPERAÇÃO INSTITUCIONAL Nº
101/2021**

**1º Termo Aditivo ao Acordo de
Cooperação Institucional nº 101/2021
celebrado entre a Fundação Universidade
Federal de São Carlos - UFSCar e a FLORA
PRODUTOS DE HIGIENE E LIMPEZA S.A.,
com a interveniência da Fundação de
Apoio ao Desenvolvimento Científico e
Tecnológico – FAI•UFSCar em 23/12/2021.**

Pelo presente instrumento, de um lado, a **FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**, fundação pública federal, com sede na Rodovia Washington Luiz, Km 235, São Carlos, SP, inscrita no CNPJ sob o nº. 45.358.058/0001-40, representada pela sua Reitora, V. Maga. a Profa. Dra. Ana Beatriz de Oliveira, inscrita no CPF nº 214.458.668-38, doravante denominada **UFSCar**; e, de outro lado

FLORA PRODUTOS DE HIGIENE E LIMPEZA S.A., pessoa jurídica de direito privado, com sede na Rua Porto União, nº 295, 2º Andar - Bairro: Brooklin Paulista, na Cidade de São Paulo - SP, Cep: 04.568-020 , inscrita no CNPJ/MF sob nº 08.505.736/0001-23, e suas filiais registradas sob CNPJ nº 08.505.736/0014-48 e CNPJ nº 08.505.736./0005-57 doravante denominada “**FLORA**”, neste ato legalmente representada por seus representantes legais, nos termos do seu estatuto social, que abaixo assinam;

com interveniência da

FUNDAÇÃO DE APOIO INSTITUCIONAL AO DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO E TECNOLÓGICO, entidade de direito privado, sem fins lucrativos, inscrita no CNPJ-MF sob o nº. 66.991.647/0001-30, com sede na Rodovia Washington Luís, Km 235 - São Carlos, SP, neste ato representada na forma de seu Estatuto por seu representante legal, que abaixo assina, doravante denominada **FAI•UFSCar**, em conformidade com o processo administrativo UFSCar nº 23112.017680/2021-71;

CONSIDERANDO o Acordo de Cooperação Institucional nº 101/2021 firmado entre a **UFSCar** e a **FLORA PRODUTOS DE HIGIENE E LIMPEZA S.A.** com a interveniência da **FAI•UFSCar**, em 23 de dezembro de 2021, para a execução do projeto “EMBRAPII - Desenvolvimento de Novos Catalisadores para Preparação de Surfactantes e Umectantes empregando Matéria- Prima Proveniente de Biomassa” sob a coordenação do Prof. Dr. Marcio Weber Paixao, do Departamento de Química da UFSCar, inserido dentro do escopo da **UNIDADE EMBRAPPI-UFSCar-Materiais em Estruturação**, doravante simplesmente Acordo;

CONSIDERANDO a necessidade de ajuste do cronograma de desembolso da FLORA;

Resolvem celebrar o presente Termo Aditivo ao referido Acordo de Cooperação Institucional nº 101/2021, nos termos e condições seguintes:

CLÁUSULA PRIMEIRA - DO OBJETO

1.1 O presente Termo Aditivo tem por objeto aditar o presente Acordo para o ajuste do Cronograma de Desembolso da Flora de acordo com o Plano de Trabalho anexo a este termo, passando a prevalecer a redação do subitem V.1.1 da seguinte forma:

Onde se lia: V.1.1- A **FLORA** custeará 60,44% (sessenta vírgula quarenta e quatro por cento) dos recursos financeiros do Projeto, por meio do aporte financeiro no valor de R\$ 362.376,93 (trezentos e sessenta e dois mil, trezentos e setenta e seis reais e noventa e três centavos).

Leia-se: V.1.1- A **FLORA** custeará 60,44% (sessenta vírgula quarenta e quatro por cento) dos recursos financeiros do Projeto, por meio do aporte financeiro no valor de R\$ 362.376,93 (trezentos e sessenta e dois mil, trezentos e setenta e seis reais e noventa e três centavos), mediante a documento fiscal emitido pela FAI.UFSCar da seguinte forma:

Parcela	Valor	Vencimento
1 ^a	R\$ 117.940,41	02/03/2022*
2 ^a	R\$ 82.790,70	02/03/2022*
3 ^a	R\$ 47.484,80	20/08/2022
4 ^a	R\$ 9.020,85	20/09/2022
5 ^a	R\$ 17.264,19	20/10/2022
6 ^a	R\$ 9.020,85	20/11/2022
7 ^a	R\$ 17.264,19	20/12/2022
8 ^a	R\$ 9.020,85	20/01/2023
9 ^a	R\$ 17.264,19	20/02/2023
10 ^a	R\$ 9.020,85	20/03/2023
11 ^a	R\$ 17.264,19	20/04/2023
12 ^a	R\$ 9.020,86	20/05/2023

*parcelas já pagas pela FLORA pelas Notas Fiscais nº 229 e 230.

CLÁUSULA SEGUNDA – DA RATIFICAÇÃO

2.1 Permanecem válidas e inalteradas as demais disposições do Acordo, não alteradas por este Termo Aditivo.

E POR ESTAREM ASSIM JUSTAS E ACORDADAS, as Partes assinam eletronicamente o presente termo, na presença das testemunhas abaixo identificadas.

São Carlos, assinado e datado eletronicamente.

Dra. Ana Beatriz de Oliveira
Reitora – UFSCar

Targino de Araújo Filho
Diretor Executivo – FAI•UFSCar

Sergio Roberto Caldas Junior
Diretor Executivo - FLORA

Ciente e de Acordo(Coordenadores):

Marcio Weber Paixao
Coordenação Técnica

Ernesto Chaves Pereira de Souza
Coordenação Geral

Juliana R. L. de Araujo
Coordenadora – FLORA

Testemunhas:

1- _____
Nome: Hamilton V. Duque de Sousa
CPF: 391.070.978-83

2- _____
Nome: Luan Ariel de Oliveira
CPF: 360.063.238-85



PLANO DE TRABALHO

PROJETO EMBRAPII

Proponentes:

- Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)
- Unidade EMBRAPII-UFSCar (Materiais Avançado)
- Departamento de Química
- EMPRESA FLORA

Equipe:

- Professor Dr. MÁRCIO WEBER PAIXÃO (Departamento)
- Professor Dr. MARCO ANTONIO BARBOSA FERREIRA (Departamento)
- Dr. GABRIEL DOS SANTOS SCATENA (Departamento de Química)
- Dr. A SER DETERMINADO (Departamento de Química)
- MS. EVERTON ALVES TORDATO (PPGQ)
- PABLO SILVA CARNEIRO (Aluno do curso Química)
- ARIEL DE ARAUJO (Aluno do curso Química)
- A SER DETERMINADO (Aluno do curso Química)

1. Resumo do Projeto

Modalidade: Projeto Unidade EMBRAPPI UFSCar - Materiais.

Duração: 18 meses.

Valor total do projeto: R\$ 718.714,16

Valor aportado pela Empresa: R\$ 362.376,93

Valor aportado pela EMBRAPPI: R\$ 237.175,67

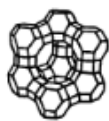
Valor da contrapartida UFSCar: R\$ 119.161,56

Objetivos: O projeto de pesquisa tecnológico tem por finalidade o desenvolvimento de materiais para posterior aplicação como catalisadores sustentáveis e econômicos em reações de esterificação e de amidação. Efetivamente, as propriedades catalíticas dos materiais selecionados serão estudadas na obtenção do surfactante/tensoativo análogos ao caproyl methyl glucamide e ao umectante ethyl linoleate. Na busca dos materiais catalisadores e nos protocolos de síntese orgânica empregaremos métricas de química verde para melhor alcançar conceitos de sustentabilidade e de economia circular, visando assim, um desenvolvimento sustentável.

Estado da Arte: Matérias-primas oriundas de biomassa vêm sendo apontadas, nas últimas décadas, como uma promissora alternativa ao uso de derivados de petróleo na produção de compostos de valor agregado (p.ex. combustíveis, plásticos, química fina, entre outros). Apesar das inúmeras aplicações, a maioria das tecnologias para produção e manipulação de compostos plataforma apresentam sérios inconvenientes, como uso de ácidos homogêneos não recuperáveis, altas temperaturas e pressões. Com a intenção de melhorar esses aspectos, nosso grupo de pesquisa vem dedicando esforços no desenvolvimento de materiais e suas aplicações como catalisadores bifuncionais (sítios de ácido de Brønsted e de Lewis) em reações de valorização da biomassa lignocelulósica.

Baseados em nosso know-how (materiais + biomassa + síntese orgânica), planejamos dois estudos sistemáticos para produção de moléculas análogas ao surfactante/tensoativo caproyl methyl glucamide, e do umectante ethyl linoleate. Para esse fim, materiais porosos e nanoestruturados, já desenvolvidos pelo grupo da UFSCar, serão avaliados e otimizados como catalisadores sustentáveis e de baixo custo em reações de esterificação, transesterificação, redução e amidação (Esquema 1).

materiais porosos e
nanoestruturados



Propriedades
a serem
otimizadas

morfologia
porosidade/volume
área superficial
estabilidade
acidez/basicidade

Esquema 1

Macro entregáveis:

1. Estudo de viabilidade de reações de aminação reductiva, amidação, esterificação e transesterificação.

- Duração total de 4 meses.
- Valor a ser aportado pela Empresa: R\$ 117.940,41
- Valor a ser aportado pela Embrapii: R\$ 77.191,99
Primeiro aporte é condição para início das atividades.

Micro entregáveis (Etapas de cada macro entregável):

- i. Título: Estudo de viabilidade de reações de aminação reductiva;
Detalhamento: Neste micro entregável será realizado o estudo de viabilidade de diferentes catalisadores para promover a síntese de aminas derivadas de sacarídeos. Ainda, um estudo de agentes redutores será devidamente realizado.
- ii. Título: Estudo de viabilidade de reações de amidação;
Detalhamento: Estudaremos a viabilidade da reação de amidação frente a diferentes condições catalíticas.
- iii. Título: Estudo de viabilidade de reações de esterificação e transesterificação.
Detalhamento: Realização de estudos de viabilidade das reações de esterificação e transesterificação frente a diferentes condições reacionais e catalisadores.

2. Síntese, purificação e caracterização de dois análogos do surfactante/tensoativo caproyloyl/caproyl/lauroyl/myristoyl methyl glucamide e de dois análogos do umectante ethyl linoleate.

- Duração total de 4 meses.
- Valor a ser aportado pela Empresa: R\$ 82.790,70
- Valor a ser aportado pela Embrapii: R\$ 54.186,50
Aporte a ser realizado após aprovação do relatório referente à Macro entrega 1.

Micro entregáveis (Etapas de cada entregável):

- i. Título: Preparação de dois possíveis surfactante/tensoativo
Detalhamento: Com base nos resultados no macro entregável 1, neste segundo momento realizaremos a síntese de dois novos possíveis surfactantes/tensoativo. O design destas moléculas será direcionado após

reuniões com a indústria parceira. Estes serão entregues à indústria parceira para realização de estudos de aplicação. Ressaltamos que existe ainda a possibilidade de o corpo técnico da empresa solicitar a produção de uma maior quantidade do primeiro composto, em lugar desses dois novos compostos.

ii. Título: Preparação de dois possíveis umectantes

Detalhamento: Com base nos resultados do macro entrega 1, neste segundo momento realizaremos a síntese de dois novos possíveis umectantes. O design destas moléculas será direcionado após reuniões com a indústria parceira. Estes serão entregues a indústria parceiras para realização de estudos de aplicação. Ressaltamos que existe ainda a possibilidade de o corpo técnico da empresa solicitar a produção de uma maior quantidade do primeiro composto, em lugar desses dois novos compostos.

iii. Título: Purificação e caracterização dos compostos obtidos

Detalhamento: Diferentes abordagens de purificação dos dois compostos acima citados serão avaliadas, e estes com alto grau de pureza serão caracterizados com técnicas espectroscópicas e espectrométricas.

3. Síntese, purificação e caracterização de dois análogo do surfactante/tensoativo caproyloyl/caproyl/lauroyl/myristoyl methyl glucamide e de dois análogos do umectante ethyl linoleate.

- Duração total de 4 meses.
- Valor a ser aportado pela Empresa: R\$ 82.790,70
- Valor a ser aportado pela Embrapii: R\$ 54.186,50

Aporte a ser realizado após aprovação do relatório referente à Macro entrega 2.

Micro entregáveis (Etapas de cada entregável):

i. Título: Preparação de dois possíveis surfactante/tensoativo

Detalhamento: Com base nos resultados no macro entregável 2, neste terceiro momento realizaremos a síntese de dois novos possíveis surfactantes/tensoativo. O design destas moléculas será direcionado após reunião com a indústria parceira. Este será entregue a indústria parceira para realização de estudos de aplicação. Ressaltamos que existe ainda a possibilidade de o corpo técnico da empresa solicitar a produção de uma maior quantidade de algum dos compostos anteriores, em lugar desse novo composto.

ii. Título: Preparação de dois possíveis umectantes

Detalhamento: Com base nos resultados do macro entrega 2, neste terceiro momento realizaremos a síntese de dois novos possíveis umectantes. O design destas moléculas será direcionado após reunião com a indústria parceira. Estes serão entregues a indústria parceiras para realização de estudos de aplicação. Ressaltamos que existe ainda a possibilidade de o corpo técnico da empresa solicitar a produção de uma maior quantidade de algum dos compostos anteriores, em lugar desses novos composto.

iii. Título: Purificação e caracterização dos compostos obtidos

Detalhamento: Diferentes abordagens de purificação dos dois compostos acima citados serão avaliadas, e estes com alto grau de pureza serão caracterizados com técnicas espectroscópicas e espectrométricas.

4. Síntese, purificação e caracterização de um análogo do surfactante/tensoativo caproyloyl/caproyl/lauroyl/myristoyl methyl glucamide e de um análogo do umectante ethyl linoleate.

- Duração total de 6 meses.
- Valor a ser aportado pela Empresa: R\$ 78.855,13
- Valor a ser aportado pela Embrapii: R\$ 51.610,67

Aporte a ser realizado após aprovação do relatório referente à Macro entrega 3.

Micro entregáveis (Etapas de cada entregável):

i. Título: Preparação de um possível surfactante/tensoativo

Detalhamento: Com base nos resultados no macro entregável 3, neste quarto momento realizaremos a síntese de um novo possível surfactantes/tensoativo. O design desta molécula será direcionado após reuniões com a indústria parceira. Este será entregue a indústria parceira para realização de estudos de aplicação. Ressaltamos que existe ainda a possibilidade de o corpo técnico da empresa solicitar a produção de uma maior quantidade de algum dos compostos anteriores, em lugar desse novo composto.

ii. Título: Preparação de dois possíveis umectantes

Detalhamento: Com base nos resultados do macro entrega 3, neste quarto momento realizaremos a síntese de um novo possível umectante. O design desta molécula será direcionado após reunião com a indústria parceira. Este será entregue a indústria parceiras para realização de estudos de aplicação. Ressaltamos que existe ainda a possibilidade de o corpo técnico da empresa solicitar a produção de uma maior quantidade de algum dos compostos anteriores, em lugar desse novo composto.

iii. Título: Purificação e caracterização dos compostos obtidos

Detalhamento: Diferentes abordagens de purificação dos dois compostos acima citados serão avaliadas, e estes com alto grau de pureza serão caracterizados com técnicas espectroscópicas e espectrométricas.

Dentro dos entregáveis, e, de acordo com a disponibilidade do corpo técnico da empresa serão realizadas reuniões mensais entre os pesquisadores e a empresa. Estas terão por objetivo a apresentação e discussão dos resultados obtido naquele período.

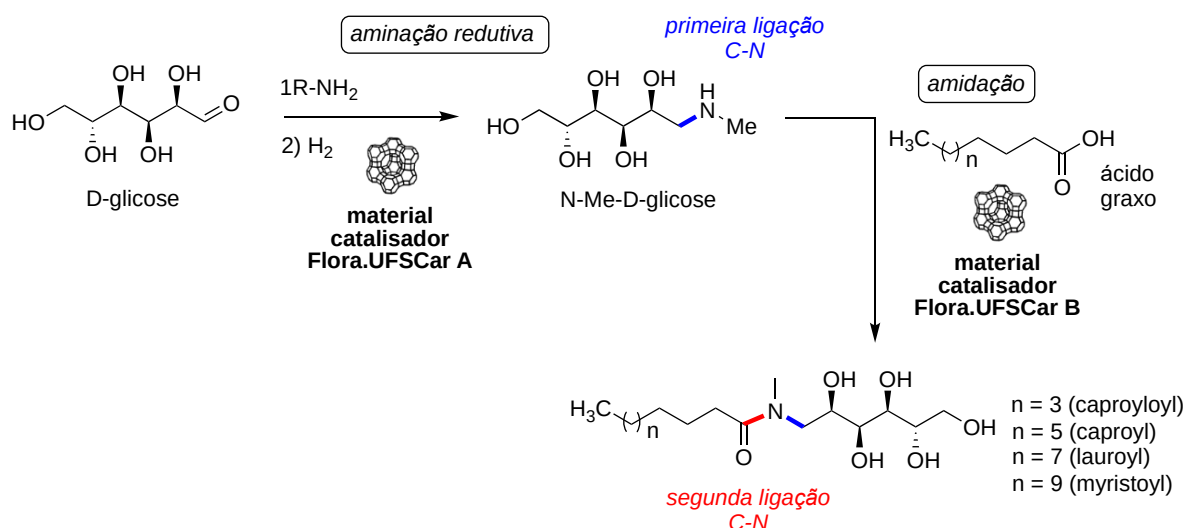
OBS:

- Citar caso etapas ocorram simultaneamente.
- Citar quais etapas compõe cada macro entrega.
- Citar a quais macro entregas a liberação de cada parcela está vinculada.

3. Descrição Metodológica

Subprojeto 1. Avaliação catalítica de catalisadores (materiais) em reações de aminação redutiva e de amidação – emprego da tecnologia na síntese de análogos ao surfactante/tensoativo caproyloyl/caproyl/lauroyl/myristoyl methyl glucamide.

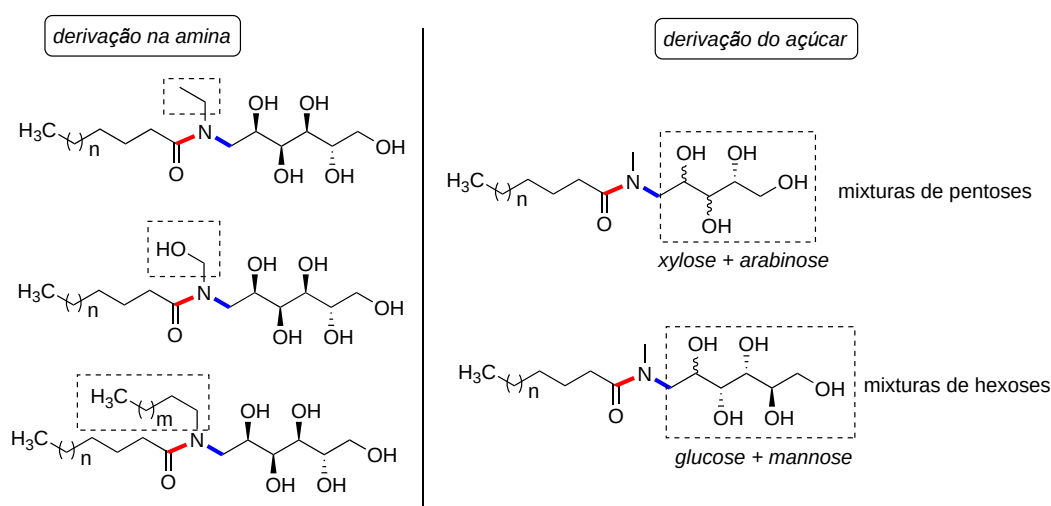
Reações de aminação redutiva e de amidação são elencadas entre as mais importantes no setor produtivo, sendo utilizadas em diversas aplicações para a preparação de agroquímicos, de tensoativos/surfactantes e de insumos farmacêutico ativos (IFAs). Cada uma destas reações possui o seu desafio particular, havendo em ambos os casos a necessidade do uso de catalisadores para alcançar a eficiência desejada do processo. Portanto, nesse subprojeto, pretende-se desenvolver o emprego de materiais catalisadores para preparação de análogos aos surfactantes/tensoativos caproyloyl/caproyl/lauroyl/myristoyl methyl glucamide. Para tal, as duas reações anteriormente citadas serão exploradas utilizando uma nova tecnologia de sistemas catalíticos, os quais serão fundamentais para formação seletiva das ligações C-N apresentadas no Esquema 2. Esta nova tecnologia permitirá, convenientemente, a preparação dos compostos de interesse a partir da simples escolha do ácido graxo. Vale também ressaltar que a N-Me-D-glicose é um insumo de alta demanda no Brasil, mas que não apresenta fabricação no mercado nacional. Nesse sentido, este subprojeto também contempla a construção do conhecimento para nacionalização de um importante insumo químico.



Esquema 2

Esta mesma tecnologia permitirá obter análogos de interesse buscando tanto aumentar a eficiência das propriedades desejadas dos já mencionados surfactantes/tensoativos, quanto o desenvolvimento de novas substâncias de propriedades análogas, mas de custo mais baixo e, ainda, com baixa pegada de carbono. Para tal, poderá ser selecionada a mudança nas posições R e a fonte

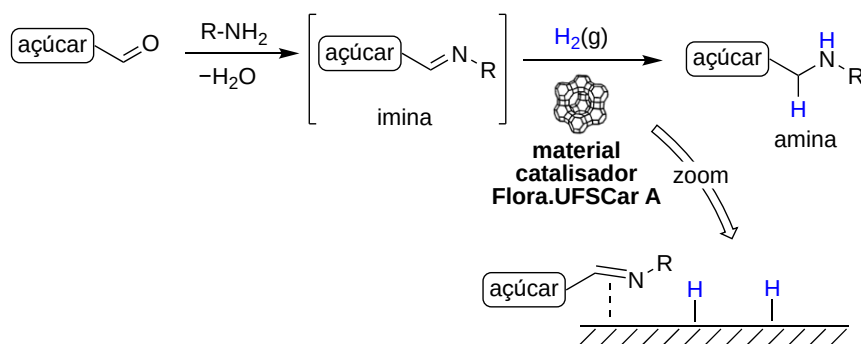
de açúcares, com possibilidade de ajuste das porções lipofílica e hidrofílica, respectivamente. Em particular, pretendemos substituir a D-glicose, proveniente da celulose, que tem alta demanda de consumo e compete com a cadeia produtiva alimentar. Com isso, iremos utilizar misturas de pentoses e hexoses derivadas da hemicelulose, que deverão fornecer a cadeia hidrofílica análoga à D-glicose. Alguns destes análogos são sugeridos no Esquema 3, podendo ser reformulados de acordo com a necessidade do produto ao qual estes surfactantes/tensoativos serão utilizados. Ressaltamos que a partir desta nova tecnologia, os materiais de partida utilizados para preparação de novos surfactantes/tensoativos pretendidos poderão ser desenhados visando matérias-primas oriundas de biomassa e/ou encontradas no mercado nacional.



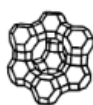
Esquema 3

Objetivo 1.1 - Reação de aminação redutiva

Hipótese e justificativa de trabalho: O material catalisador **Flora/UFSCar A** derivado de carbono (nitreto de carbono, grafeno ou outras matrizes) será responsáveis por promover a transferência de hidrogênio para o grupo imina formando a amina de interesse. É amplamente conhecido que materiais catalisadores formados por metais de transição (Ni, Pd, Pt, etc) possuem a habilidade de transferir hidrogênios dispersos em sua superfície. Baseado no potencial de outros agentes de redução utilizados para estas reações, como os borohidretos, o hidrogênio molecular em conjunto com materiais catalisadores é o mais interessante devido a sua abundância, sendo o mais barato, além de não gerar nenhum resíduo. Podemos concluir que esta metodologia é a mais apropriada para a síntese sustentável e econômica de aminas (esquema 4).



materiais porosos e nanoestruturados



otimização neste subprojeto

grande área superficial

acidez de Lewis

facilidade na formação de hidretos metálicos (M-H)

Esquema 4.

Metodologia: Nós pretendemos inicialmente promover a reação de condensação dos açúcares com as aminas, levando à formação do derivado imina e água. Esta é uma reação altamente eficiente e poderá ser conduzida na presença de ácido ou base inorgânico. A segunda etapa compreende o processo inovativo em que o material catalisador será o responsável por transferir os hidrogênios dispersos em sua superfície. Serão testados diferentes materiais catalisadores e solventes, em diferentes condições de temperatura e pressão. Os materiais nanoestruturados buscados neste caso deverão ter alta área superficial e afinidade com substrato/produto ajustada a partir da acidez de Lewis no material. Outra propriedade desejada e que será otimizada refere-se a facilidade na formação de hidretos metálicos (M-H) responsáveis pela quebra do gás H_2 . Buscar-se á alternativas econômicas que agreguem custo efetivo do processo, usando metais menos nobres, mas buscando condições não tão agressivas em termos de temperatura e pressão.

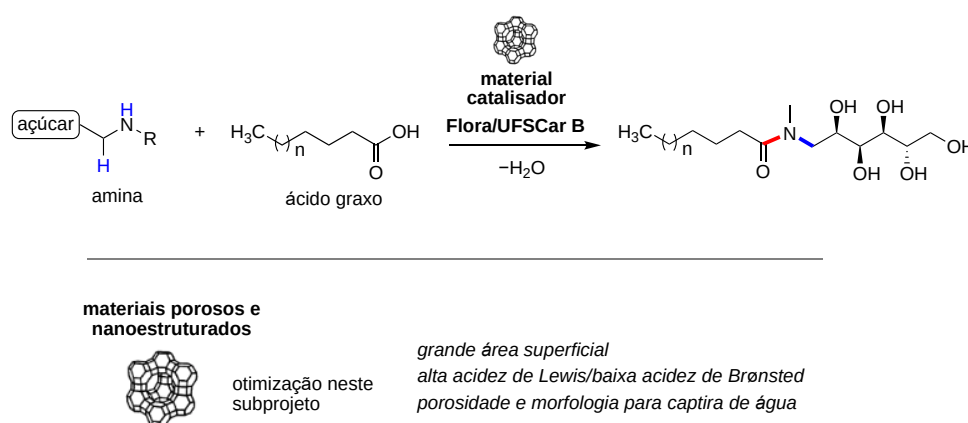
Risco: Esta etapa do projeto apresenta um risco médio, pois uma miríade de catalisadores pode ser utilizada para promover a reação desejada. O desafio maior será na síntese do material catalisador **Flora/UFSCar A** em controlar a adição do hidrogênio apenas no grupo funcional imina, uma vez que é conhecido na literatura a possibilidade de inserção de hidrogênio em ligações C-O, causando a desoxigenação da porção açúcar em algum grau. No entanto, estamos confiantes de que podemos resolver esse problema controlando os parâmetros de reação, como razão molar, concentração do meio e arquitetura do catalisador.

Importância: Essa etapa é muito importante, pois os produtos desta etapa serão os precursores da próxima. Além disso, o eficiente desenvolvimento deste processo trará de forma inédita uma

tecnologia nacional para a produção de derivados de alta demanda do setor produtivo, conforme apontado anteriormente.

Objetivo 1.2 - Reação de amidação

Hipótese e justificativa de trabalho: As amidas constituem um dos grupos funcionais mais importantes em moléculas orgânicas. Apesar de existirem várias metodologias para síntese de amidas, a maioria sofre de vários inconvenientes em termos de eficiência e sustentabilidade. Métodos típicos empregam quantidades estequiométricas de reagentes de acoplamento em uma estratégia de duas etapas, produzindo grandes quantidades de resíduos, além de usar CH_2Cl_2 ou DMF como solventes. A alternativa mais sustentável e econômica deve empregar a condensação direta de um ácido carboxílico e de uma amina, usando um material catalisador reutilizável, e produzindo como subproduto uma molécula de água. São conhecidos catalisadores homogêneos que podem proceder na formação de amidas de forma direta, mas, no geral, para uma boa performance do catalisador é necessária a remoção da água da reação por destilação azeotrópica. O novo material catalisador **Flora/UFSCar B** será um dos responsáveis por ativar a carbonila do ácido carboxílico para promover o ataque da amina e levar à eliminação de água, além de poder ser removido facilmente da reação por filtração (Esquema 5).



Esquema 5.

Metodologia: Nós pretendemos inicialmente promover a reação de amidação a partir da condensação direta da amina e do ácido carboxílico, levando a formação do derivado amida e de água. O novo material catalisador será o responsável por ativar a carbonila do ácido carboxílico. Serão testados diferentes materiais catalisadores, como materiais com propriedades ácidas, aumentando a acidez de Lewis, mas evitando a acidez de Brønsted que poderia levar a eliminação de água a partir das hidroxilas do açúcar. Alta área superficial, assim como a utilização de enzimas

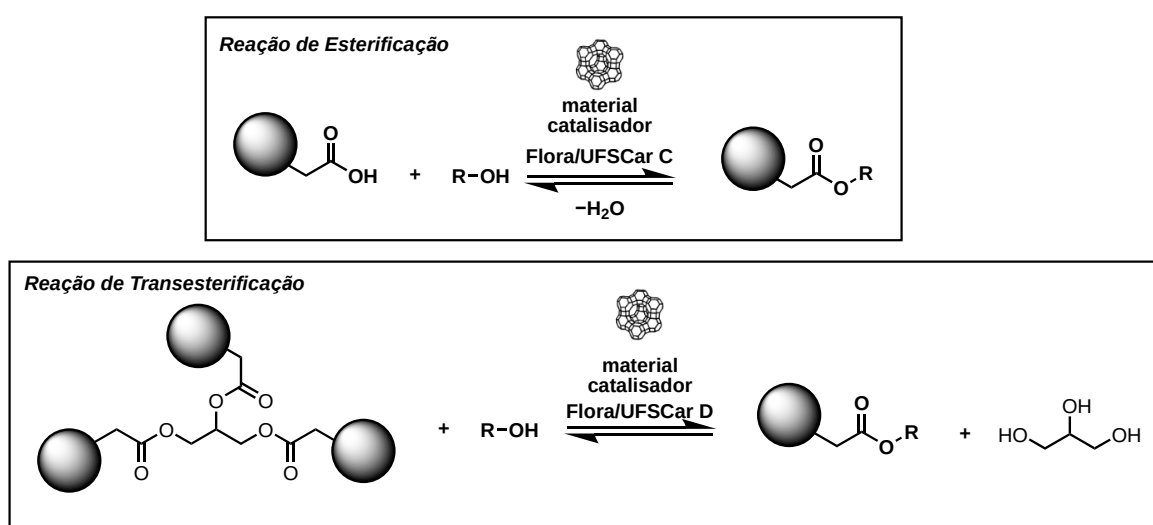
suportadas combinadas com solventes em diferentes condições de temperatura e pressão serão avaliadas. Por fim, o material poderá atuar como uma “esponja” para remoção de água do meio reacional visando deslocamento de equilíbrio em difereção aos reagentes.

Risco: Esta etapa do projeto apresenta um risco médio, uma vez que a literatura já relata o uso de catálise heterogênea para este fim. O desafio maior estará na seletividade do ataque da amina sobre a carbonila, evitando o ataque das hidroxilas dos açúcares, o que levaria a derivados esterificados. Apesar disso, confiamos que esse problema de seletividade poderá ser controlado a partir da adequada escolha dos parâmetros de reação, como razão molar, concentração do meio e arquitetura do catalisador.

Importância: Essa etapa é de extrema importância, pois levará a formação do produto final esperado. Será necessário que a reação forneça rendimentos quantitativos, evitando a necessidade de remoção de materiais de partida ou de subprodutos provenientes deste processo.

Subprojeto 2. Avaliação catalítica de catalisadores (materiais) em reações de esterificação e transesterificação – emprego da tecnologia na síntese de análogos do umectante ethyl linoleate.

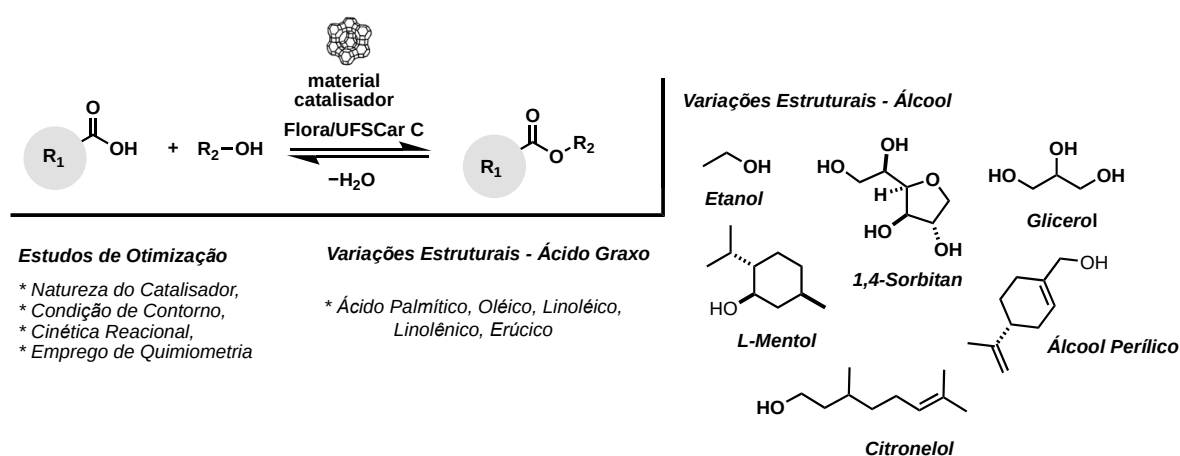
Ésteres são compostos usados em diferentes segmentos do setor produtivo, com atuação destacada na indústria alimentícia, cosmética e de combustíveis. Estes são obtidos, principalmente, por síntese química através das reações de esterificação e de transesterificação. No entanto, essas reações acontecem com baixa velocidade, e, portanto, necessitam ser mediadas por catalisadores ácidos, básicos e enzimáticos. Ainda, um devido cuidado deve ser tomado quanto às condições de contorno empregadas para permitir sua síntese em rendimentos satisfatórios (Esquema 6).



Esquema 6

Objetivo 2.1 – Reação de Esterificação

Hipótese e justificativa de trabalho: Ésteres são compostos orgânicos obtidos pela reação entre um ácido carboxílico e um álcool catalisada por um ácido forte. Podem, também, serem formados através da reação de ácidos inorgânicos, anidridos ácidos e halogênios, entre outros compostos. Entre as alternativas mais sustentáveis e econômicas, elencamos a condensação direta de um ácido carboxílico e de um álcool na presença de um material catalisador reutilizável. Esse processo apresenta uma elevada economia atômica e um baixo Fator E, uma vez que produz o produto desejado e, como subproduto único, uma molécula de água. A literatura relata, em ampla maioria, o emprego de catalisadores homogêneos em reações de esterificação. Apesar de apresentarem uma boa performance, esses catalisadores não contribuem para um desenvolvimento sustentável, além de ocasionar problemas de corrosão nos equipamentos utilizados. Com o intuito de solucionar esses problemas, o material catalisador **Flora/UFSCar C** será responsável por ativar a carbonila do ácido carboxílico e promover o ataque do álcool, levando à formação do éster desejado, com a concomitante eliminação de água. Ainda, o material poderá atuar como uma “esponja” para remoção de água do meio reacional. No esquema 7 estão mostrados o estudo de otimização que deverá ser realizado para apenas um sistema (reação modelo) e possibilidades de variações estruturais dos parceiros reacionais.



Esquema 7

Metodologia: A reação de esterificação será realizada pela condensação direta de um álcool correspondente e do ácido carboxílico, levando à formação do derivado éster e de água. O material catalisador será o responsável por ativar a carbonila do ácido carboxílico. Serão testados diferentes materiais catalisadores, como materiais com propriedades ácidas, básicas e enzimas suportadas e solventes em diferentes condições de contorno (temperatura, pressão, regime de fluxo contínuo e remoção da água).

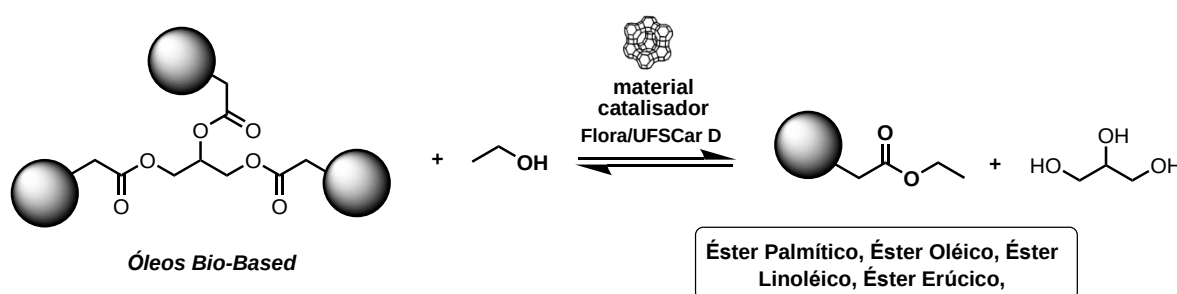
Risco: Esta etapa do projeto apresenta um risco médio, pois é possível encontrar relatos na literatura científica de tecnologias empregando catálise heterogênea para este fim. O maior desafio estará na seleção do material catalisador que permitirá realizar esta transformação com cinética adequada para posterior aplicação industrial. Além disso, por se tratar de processo dinâmico (reversível) deveremos, através da escolha adequada dos parâmetros reacionais, deslocar o equilíbrio para formação do éster desejado.

Importância: Essa etapa é de extrema importância, pois levará à formação do produto final esperado. Será necessário que a reação forneça rendimentos elevados, evitando a necessidade de remoção de materiais de partida ou de subprodutos provenientes deste processo.

Objetivo 2.2 – Reação de Transesterificação

Hipótese e justificativa de trabalho: As reações de transesterificação são metodologias empregadas para a síntese de ésteres e apresentam um mecanismo similar ao das reações de esterificação catalisadas por ácido. Desta forma, podemos definir as reações de transesterificação como uma transformação envolvendo um tri-éster (triglicerídeo) com um álcool e formando um novo éster como produto final. As transesterificações podem ser realizadas tanto em meio ácido quanto em meio básico, porém, a reação ocorre mais rapidamente quando utilizado um catalisador alcalino. Os catalisadores mais eficientes para essas transformações são o hidróxido de potássio e o hidróxido de sódio. Ainda, catalisadores de titânio são também empregados em reações de transesterificação, em especial em tecnologias em escala industrial.

No entanto, como no caso das reações de esterificação, a literatura relata, em sua ampla maioria, o emprego de catalisadores homogêneos em reações de transesterificação. Com a intenção de desenvolver sistemas sustentáveis para essa transformação, em um primeiro momento será realizado um *screening* de diferentes materiais, cuja função será ativar as carbonilas dos ésteres, facilitando, assim, o ataque do álcool e formando o produto transesterificado, com a consequente eliminação de glicerol. (Esquema 8).



Esquema 8

Metodologia: A reação de transesterificação será realizada pela alcoólise direta do triglicerídeo contendo a cadeia carbônica desejada com etanol, e levará à formação de três moléculas do derivado éster e de glicerol. O material catalisador será o responsável por ativar as carbonilas do tri-éster. Serão testados diferentes materiais catalisadores, como materiais com propriedades básicas e enzimas suportadas, e solventes em diferentes condições de contorno (temperatura, pressão, regime de fluxo contínuo).

Risco: Esta etapa do projeto apresenta um alto risco, pois apesar de terem sido encontrados relatos na literatura científica, poucas tecnologias foram relatadas para este fim. Nosso maior desafio estará na seleção do material catalisador, que permitirá realizar esta transformação com cinética adequada para posterior aplicação industrial. Ainda, através desses protocolos deve ser possível a separação do produto desejado dos compostos colaterais, além da purificação adequada dos mesmos.

Importância: Essa abordagem é de extrema importância, pois levará à formação do produto final esperado empregando triglicerídeos, previamente purificados ou residuais. Como já relatado, será necessário que a reação forneça rendimentos elevados e que a remoção dos subprodutos seja realizada com baixo custo energético.

4. Cronograma

(Explicitar neste item as relações de dependência entre as atividades e a ordem de realização delas. É importante destacar quais atividades dependem da conclusão de outra para serem iniciadas).

(Abaixo exemplo que pode ser usado de modelo):

Subprojeto 1	Atividades	Prazo (em meses)
Relacionado aos Objetivos 1.1 e 1.2	Síntese e caracterização dos catalisadores	1 ^o até 12 ^o mês (12 meses)
Relacionado ao Objetivo 1.1	Avaliação da viabilidade das reações de aminação redutiva	2 ^o até 8 ^o mês (6 meses)
Relacionado ao Objetivo 1.1	Purificação e caracterização dos compostos produzidos	2 ^o até 8 ^o mês (6 meses)
Relacionado ao Objetivo 1.2	Avaliação dos catalisadores e condições reacionais em reações de amidação	4 ^o até 8 ^o mês (4 meses)
Relacionado ao Objetivo 1.2	Síntese, purificação e caracterização dos compostos	4 ^o até 8 ^o mês (4 meses)

	produzidos – síntese de dois possível surfactantes e tensoativos	
Relacionado ao Objetivo 1.2	Síntese, purificação e caracterização dos compostos produzidos – síntese de dois possível surfactantes e tensoativos	9 ^o até 12 ^o mês (4 meses)
Relacionado ao Objetivo 1.2	Síntese, purificação e caracterização dos compostos produzidos – síntese de um possível surfactante e tensoativo	12 ^o até 18 ^o mês (6 meses)
Relacionado aos Objetivos 1.1 e 1.2	Reuniões mensais com o corpo técnico da empresa e apresentação de relatórios parciais convergindo com o período dos macros entregáveis	1 ^o até 18 ^o mês (18 meses)

Subprojeto 2	Atividades	Prazo (em meses)
Relacionado aos Objetivos 2.1 e 2.2	Síntese e caracterização dos catalisadores	1 ^o até 12 ^o mês (12 meses)
Relacionado ao Objetivo 2.1 e 2.2	Avaliação da viabilidade das reações de esterificação e transesterificação	2 ^o até 8 ^o mês (6 meses)
Relacionado ao Objetivo 2.1 e 2.2	Purificação e caracterização dos compostos produzidos	2 ^o até 8 ^o mês (6 meses)
Relacionado ao Objetivo 2.1 e 2.2	Síntese, purificação e caracterização de 2 umectantes análogos	4 ^o até 8 ^o mês (4 meses)
Relacionado ao Objetivo 2.1 e 2.2	Síntese, purificação e caracterização de 2 umectantes análogos	9 ^o até 12 ^o mês (4 meses)

Relacionado ao Objetivo 2.1 e 2.2	Síntese, purificação e caracterização de 1 umectantes análogos	12 ^o até 18 ^o mês (6 meses)
Relacionado aos Objetivos 2.1 e 2.2	Reuniões mensais com o corpo técnico da empresa e apresentação de relatórios parciais convergindo com o período dos macros entregáveis	1 ^o até 18 ^o mês (18 meses)

5. Síntese das liberações de verba:

MacroEntrega 1:

Primeiro Aporte Embrapii: R\$ 77.191,99

Contrapartida UFSCar: R\$ 26.480,35

Primeiro Aporte Flora: R\$ 117.940,41

Data de liberação: Início do projeto.

MacroEntrega 2:

Segundo Aporte Embrapii: R\$ 54.186,50

Contrapartida UFSCar: R\$ 26.480,35

Segundo Aporte Flora: R\$ 82.790,70

Data da liberação: 4 meses após o início do projeto.

Condição: Mediante a todos os entregáveis previstos na Macro Entrega 1.

MacroEntrega 3:

Terceiro Aporte Embrapii: R\$ 54.186,50

Contrapartida UFSCar: R\$ 26.480,35

Terceiro Aporte Flora: R\$ 47.484,80

Data da liberação: 8 meses do início do projeto

Condição: Mediante a todos os entregáveis previstos na Macro Entrega 2.

Quarto Aporte Flora: R\$ 9.020,85

Data da liberação: 9 meses do início do projeto

Quinto Aporte Flora: R\$ 17.264,19

Data da liberação: 10 meses do início do projeto

Sexto Aporte Flora: R\$ 9.020,85
Data da liberação: 11 meses do início do projeto

MacroEntrega 4:

Quarto Aporte Embrapii: R\$ 51.610,67
Contrapartida UFSCar: R\$ 39.720,52

Sétimo Aporte Flora: R\$ 17.264,19
Data da liberação: 12 meses do início do projeto
Condição: Mediante a todos os entregáveis previstos na Macro Entrega 3.

Oitavo Aporte Flora: R\$ 9.020,85
Data da liberação: 13 meses do início do projeto

Nono Aporte Flora: R\$ 17.264,19
Data da liberação: 14 meses do início do projeto

Décimo Aporte Flora: R\$ 9.020,85
Data da liberação: 15 meses do início do projeto

Décimo Primeiro Aporte Flora: R\$ 17.264,19
Data da liberação: 16 meses do início do projeto

Décimo Segundo Aporte Flora: R\$ 9.020,86
Data da liberação: 17 meses do início do projeto

Marcio Weber Paixao
Coordenação Técnica

Ernesto Chaves Pereira de Souza
Coordenação Geral

Documento**14243_FLORA_UFSCar_FAI_Aditivo_Marcio Weber Paixao-EMBRAPII****Arquivo:**

Volume_000003\0a02831ec18c4ba1b79c8410b559d5de.pdf

Data de envio para o processo de assinatura digital:

17/10/2022 11:36:23 (BRT/UTC-3)

Código de verificação:

132D-1B7F-0805

Validação e status atual do documento:<https://assina.fai.ufscar.br/app/Documento/Protocolo/132D-1B7F-0805>**Status**Processo de assinatura do documento finalizado em **25/10/2022 10:02:40 (BRT/UTC-3)**Sincronizado com a Horal Legal Brasileira - Projeto NTP.br
Observatório Nacional e NIC.brEste processo de assinatura de documento
está em consonância com a MP 2.200-2, de
24 de agosto de 2001, garantindo sua
validade jurídica em todo território brasileiro.**Assinaturas**[360.063.238-85] Luan Ariel de Oliveira
luan.oliveira@fai.ufscar.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 17/10/2022 15:20:37 (BRT/UTC-3)[214.458.668-38] Ana Beatriz de oliveira
biaoliveira@ufscar.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 17/10/2022 15:24:45 (BRT/UTC-3)[283.359.018-05] Marcio Weber Paixão
mwpaixao@ufscar.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 17/10/2022 17:04:37 (BRT/UTC-3)[108.900.218-13] Ernesto Chaves Pereira de Souza
ernesto@ufscar.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 19/10/2022 09:21:09 (BRT/UTC-3)[391.070.978-83] Hamilton Vinícius Duque de Sousa
hamilton.sousa@ufscar.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 19/10/2022 15:34:00 (BRT/UTC-3)[295.393.018-31] Juliana Rivelles Lemes de Araujo
juliana.lemes@flora.com.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 20/10/2022 17:38:00 (BRT/UTC-3)[224.223.008-55] Sergio Roberto Caldas Jr.
sergio.caldas@flora.com.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 20/10/2022 19:08:42 (BRT/UTC-3)[020.111.718-57] Targino de Araújo Filho
targino@dep.ufscar.br**Assinou (Eletrônico AC AssinaWeb)** em: 25/10/2022 10:02:40 (BRT/UTC-3)

Eventos

17/10/2022 11:36:23 [360.063.238-85] Luan Ariel de Oliveira **publicou**.

[345.899.398-35] Mariana Barboza Gonçalves **não visualizou**.

[396.686.918-73] Tharine Pereira **não visualizou**.

[375.779.688-89] Juliana Nayara Aguiar dos Santos **não visualizou**.

[] MARIA ANGELA COELHO DE MELLO **não visualizou**.

17/10/2022 13:47:45 [309.842.818-00] Daniel Roza de Moraes (IP: 200.136.199.96) **autorizou** o processo de assinatura. Visualizou em 17/10/2022 13:47:33.

17/10/2022 15:18:16 [218.555.388-73] Marcelo Ferro Garzon (IP: 179.241.18.32) **autorizou** o processo de assinatura. Visualizou em 17/10/2022 15:18:13.

17/10/2022 15:20:37 [360.063.238-85] Luan Ariel de Oliveira (IP: 200.136.209.185) **assinou**. Visualizou em 27/10/2022 11:09:19.

17/10/2022 15:24:45 [214.458.668-38] Ana Beatriz de oliveira (IP: 200.133.233.170) **assinou**. Visualizou em 17/10/2022 15:24:39.

17/10/2022 17:04:37 [283.359.018-05] Marcio Weber Paixão (IP: 200.136.194.123) **assinou**. Visualizou em 17/10/2022 17:04:32.

18/10/2022 09:02:52 [252.088.578-55] CLALBER ROGERIO FERREIRA **visualizou**.

19/10/2022 09:21:09 [108.900.218-13] Ernesto Chaves Pereira de Souza (IP: 187.26.223.20) **assinou**. Visualizou em 19/10/2022 09:21:02.

19/10/2022 15:34:00 [391.070.978-83] Hamilton Vinícius Duque de Sousa (IP: 201.33.202.232) **assinou**. Visualizou em 19/10/2022 15:25:05.

20/10/2022 17:38:00 [295.393.018-31] Juliana Rivelles Lemes de Araujo (IP: 191.5.61.190) **assinou**. Visualizou em 20/10/2022 17:33:16.

20/10/2022 19:08:42 [224.223.008-55] Sergio Roberto Caldas Jr. (IP: 177.26.236.176) **assinou**. Visualizou em 20/10/2022 19:08:20.

25/10/2022 10:02:40 [020.111.718-57] Targino de Araújo Filho (IP: 177.34.169.55) **assinou**. Visualizou em 25/10/2022 10:02:33.