



Atividade da oxidação do cicloexano e cicloexeno por catalisador de ferro ancorado em zeólita NaY

Larissa Teixeira Reis, Sarah da Silva Ferreira, Christiane Fernandes, Adolfo Horn Júnior

A oxidação seletiva de hidrocarbonetos é um desafio devido à semelhança na eletronegatividade entre os átomos de carbono e hidrogênio. O desenvolvimento de catalisadores que podem operar a baixa temperatura e pressão, para a transformação de substratos baratos e disponíveis em produtos de maior valor agregado atrai a atenção tanto da academia como da indústria. Neste contexto, o objetivo deste trabalho foi o ancoramento de um ligante tridentado na superfície da zeólita NaY, sua complexação com ferro e o estudo inicial da sua aplicação como catalisador na oxidação do cicloexano e cicloexeno.

As caracterizações da zeólita organofuncionalizada (**Z1**) e do catalisador (**C1**) foram realizadas pelas técnicas de infravermelho e do ultravioleta/visível. A análise termogravimétrica também confirmou a presença de grupos orgânicos incorporados à zeólita. A análise elementar de CHN permitiu inferir na quantidade de catalisador ancorado na zeólita, obtendo-se o valor de 0,499 mmol/g. Além disso, **Z1** foi analisado por RMN de ^{13}C e ^{29}Si no estado sólido, onde se observou a presença de grupos característicos das moléculas sintetizadas. No RMN de ^{29}Si , observam-se sinais em -44,65 ppm característico de $[\text{C-Si}(\text{OSi})_2\text{OH}]$, -66,83 ppm de $[\text{C-Si}(\text{OSi})_3]$, -94,11 ppm $[\text{Si}(2\text{Al})]$, -100,66 ppm $[\text{Si}(1\text{Al})]$, -105,02 ppm $[\text{Si}(0\text{Al})]$ e -89 ppm $[\text{Si}(3\text{Al})]$. Os dados confirmam a formação de ligações covalentes entre o agente sililante e a superfície da zeólita. Os dados obtidos do RMN de ^{13}C indicam a presença dos carbonos (C) do anel piridínico em 159,66, 149,81, 138,79, 127,77 e 125,14 ppm. Os (C) alifáticos são observados em 8,73, 22,75, 52,23, 59,24 e 73,47 ppm. Em 183,38 ppm observa-se o sinal do (C) característico do grupo carboxilato. Os testes de avaliação catalítica de **C1** na oxidação dos substratos foram realizadas utilizando H_2O_2 como agente oxidante, seguindo a proporção de 1:100:1000 (catalisador: oxidante: substrato), reagindo por 24h a 25°C . Foram analisados os resultados por GC-FID e observou-se que **C1** é eficiente na oxidação do cicloexano e cicloexeno, com uma conversão total de 12% e 41,9%.

Portanto, o ligante (**L1**) e **Z1**, foram sintetizados e caracterizados satisfatoriamente. Assim como **C1**, que promoveu a oxidação dos substratos, inspirando a sua aplicação na oxidação de outros hidrocarbonetos.

Palavras-chave: Catálise heterogênea, Oxidação de hidrocarbonetos, Biomiméticos.

Instituição de fomento: CNPq e UENF.