



Avaliação da atividade catalítica de sais de metais de transição na cloração do cicloexano usando o ácido tricloroisocianúrico como agente de cloração

Eduardo da Silva Neves, Adolfo Horn Junior, Christiane Fernandes Horn, Leonardo Munaldi Lube

Metais de transição são diferenciados dos demais, por apresentarem grande capacidade catalisadora em processos químicos, pois apresentam grandes variações de número de oxidação. Quando usados em sistemas catalíticos homogêneos, esses metais podem atuar na forma de íons metálicos coordenados por ligantes na sua esfera de coordenação. Um grande desafio da química catalítica é a funcionalização controlada de alcanos visando a maior versatilidade sintética dessa classe de compostos químicos, visto que se apresentam em abundância e baixo custo, além de participarem de diversos processos industriais. O cicloexano é um composto que se enquadra nessa situação, pois é ponto de partida na obtenção do Nylon. Nesse trabalho, apresentamos a investigação da atividade catalítica de metais de transição, na forma de íons V^{3+} , Cr^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} e Zn^{2+} provenientes dos seus sais de Cl^- , ClO_4^- , NO_3^- e SO_4^{2-} , etc. na cloração do cicloexano, na presença do ácido tricloroisocianúrico (TCCA), como agente de cloração. A avaliação dessa atividade consistiu em reagir cicloexano, em uma concentração de $0,7 \text{ mol L}^{-1}$ em presença de TCCA, na concentração de $0,23 \text{ mol L}^{-1}$ e do sal de metal de transição avaliado na concentração catalítica de $7 \cdot 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$. As reações foram executadas em CH_3CN como solvente, a $25^\circ C$, durante 24 horas. O clorocicloexano, produto dessa reação, foi quantificado por análise cromatográfica em um GC-FID por padronização interna e curva analítica. Os sais de Cu^{2+} apresentaram melhor atividade catalítica, promovendo até 16% de conversão quando na forma de perclorato. Sais de cobre com outros íons levaram à conversão máxima de 6% e a maiores valores quando sofreram adição de $LiClO_4$, evidenciando que o íon ClO_4^- é essencial para auxiliar a atividade catalítica do íon Cu^{2+} . O $V_2(SO_4)_3$ também levou à conversões de 6% do cicloexano em clorocicloexano. Novas reações em temperaturas mais elevada e o acompanhamento cinético ainda serão realizadas, mas essa reação catalisada pelo perclorato de cobre(II) se mostra promissora por apresentar elevada seletividade ao produto monoclorado.

Palavras-chave: Cloração do cicloexano, Atividade catalítica, Ácido tricloroisocianúrico

Instituição de fomento: PIBIC/IFF