



Avaliação da atividade catalítica do perclorato de cobre(II) hexahidratado na cloração do cicloexano usando o ácido tricloroisocianúrico como agente de cloração

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

O uso de metais de transição como catalisadores é um campo consagrado na área de catálise. As razões que contribuem para que essas espécies químicas apresentem a característica de bons catalisadores se deve a sua habilidade de se ligar seletivamente, a sua variabilidade nos estados de oxidação e no número de coordenações. Quando utilizados em fase homogênea, os mesmos atuam na forma de íons metálicos coordenados por ligantes na sua esfera de coordenação. A funcionalização catalisada de hidrocarbonetos é um grande desafio científico-tecnológico, pois dá origem a substâncias mais versáteis em termos de síntese orgânica, como é o caso das halogenações catalíticas e seletivas de alcanos. A monocloração catalisada pode contribuir para a obtenção do Nylon, que atualmente tem rota sintética passando pelo cicloexanol ou cicloexanona, ambos com obtenção industrial em baixos rendimentos e elevado custo energético. Este trabalho consistiu em investigar as proporções reacionais que forneçam as melhores conversões na reação de cloração do cicloexano com ácido tricloroisocianúrico catalisada pelo perclorato de cobre(II) em fase homogênea. Aqui, apresentamos a investigação da atividade catalítica do $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ em uma concentração de $7 \cdot 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$, na cloração do cicloexano, na presença do ácido tricloroisocianúrico (TCCA) como agente de cloração, nas seguintes condições reacionais: cicloexano e TCCA com proporções molares de 1000, 500 e 100, em relação ao $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ e na presença de CH_3CN como solvente, a 50°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 resultados obtidos para as diferentes proporções de cicloexano foram excelente, visto que se obteve um máximo de conversão de 60% na condição de 1:100:1000 ($\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$:cicloexano:TCCA). Ainda estão em andamento avaliações para as diferentes proporções de TCCA citadas, porém as condições reacionais utilizadas até o momento mostraram-se uma alternativa promissora para a obtenção do produto monoclorado.

Palavras-chave: Clorocicloexano, Hidrocarbonetos, Halogenação.

Instituição de fomento: IFFluminense, CNPq, FAPERJ, UENF