

A Ciência e os caminhos do desenvolvimento

**Avaliação da reação de cloração do cicloexano com ácido tricloroisocianúrico catalisada por cobre(II) suportado em diferentes zeólitas**

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

A funcionalização catalisada de hidrocarbonetos, como a halogenação seletiva de alcanos, é um grande desafio científico-tecnológico, pois dá origem a substâncias mais versáteis em termos de síntese orgânica. Os metais de transição catalisam diversas reações e essa habilidade decorre da variabilidade de NOX e de modos de coordenação seletiva. A monocloração controlada do cicloexano catalisada por metais de transição, como sais simples e complexos em fase homogênea e em fase heterogênea vêm sendo proposta como alternativa para a obtenção do Nylon, o qual é industrialmente obtido em baixos rendimentos e elevado custo energético. Aqui apresentamos a investigação da atividade catalítica de  $\text{Cu}^{2+}$  como fase ativa suportada em diferentes tipos de zeólitas dos tipos NaX e NaY. A zeólita NaX foi preparada a partir da mistura do aluminato de sódio ( $\text{NaAlO}_2$ ) com hidróxido de sódio ( $\text{NaOH}$ ) e silicato de sódio ( $\text{Na}_2\text{SiO}_3$ ) em água destilada, já a NaY foi preparada através de silicatos hidratados de alumínio (Caulim,  $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) com hidróxido de sódio ( $\text{NaOH}$ ) em água destilada. O íon  $\text{Cu}^{2+}$  foi incorporado a partir de solução aquosa de  $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . A quantidade de  $\text{Cu}^{2+}$  incorporada foi quantificada por espectroscopia de absorção atômica, revelando um teor de 0,23% e 0,31% (m/m), respectivamente, na NaX e NaY. As reações de cloração do cicloexano foram realizadas em frascos de vidro selados em agitação magnética e controle de temperatura ( $50^\circ\text{C}$ ) por 24h, tendo o ácido tricloroisocianúrico (TCCA) como agente de cloração. O volume final de solução foi de 2,0 mL, com concentração de  $\text{Cu}^{2+}$  de  $7 \cdot 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$  e cicloexano e TCCA mil vezes maior. A quantificação de clorocicloexano se deu por meio da integração dos sinais da análise de  $^1\text{H}$  RMN de uma alíquota do meio reacional, tendo como padrão interno a dimetilformamida na mesma concentração molar do cicloexano inicialmente reagido. As porcentagens de conversão encontradas foram de 20,6% e 19,1%, respectivamente, para os meios reacionais catalisados por NaX e NaY com  $\text{Cu}^{2+}$  incorporado. Em comparação com os testes realizados em meio homogêneo (até 44,7% de conversão), a conversão foi inferior. Contudo, a catálise heterogênea apresenta inúmeras vantagens frente à catálise homogênea, indicando que os resultados obtidos são promissores.

Palavras-chave: Funcionalização de Hidrocarbonetos, Halogenação, Catálise Heterogênea

Instituição de fomento: CNPq, FAPERJ, IFFluminense, UENF.