

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 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 (NaAlO_2) com hidróxido de sódio (NaOH) e silicato de sódio (Na_2SiO_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 (NaOH) em água destilada. O íon 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 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°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 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 ^1H 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 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.