

## Efeito do cátion de compensação em Zeólita Y sobre a troca de halogenetos de alquila

Marcelo Franco<sup>1,2</sup> (PG), Nilton Rosenbach Jr.(PG)<sup>2</sup>, Alex P. A dos Santos(IC)<sup>2</sup>, Keila dos Santos Alves (IC)<sup>2</sup>, Thacyla Campos do Carmo<sup>2</sup> (IC), Claudio Jose de Araujo Mota<sup>2</sup> (PQ), Waner Bruce Kover<sup>2</sup> (PQ).

1 – Universidade Estadual do Sudoeste de Bahia-UESB/DEBI

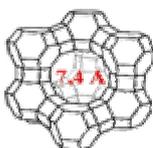
2 – Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ/Instituto de Química-IQ

Palavras Chave: Zeólita, Halogenetos, carbocátions

### Introdução

Zeólitas são materiais cristalinos que apresentam uma estrutura tridimensional formada pela associação de tetraedros de silício (SiO<sub>4</sub>) e alumínio (AlO<sub>4</sub>), tem capacidade de adsorção seletiva, devido a existência de poros e canais internos. Em razão da tetracoordenação os átomos de alumínio apresentam uma carga negativa que é compensada por uma cátion ou contra-íon.

A figura ao lado mostra a estrutura de uma zeólita Y

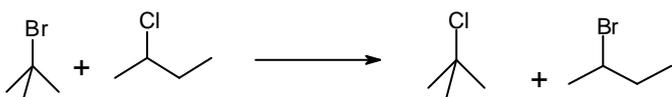


Esses materiais são utilizados principalmente em catálise e têm a possibilidade de gerar ambientes polares.

Zeólitas trocadas com íons metálicos podem interagir com halogenetos de alquila para dar reações de carbocátions.

Neste trabalho evidencia-se o intercâmbio entre átomos de cloro e bromo em halogenetos de butila em diferentes contra-íons.

Abaixo apresenta-se o esquema de troca envolvendo halogenetos de butila em MY:



### Resultados e Discussão

As reações foram realizadas em zeólitas com teor de 50% dos íons Cu, Zn, Ni, Co, Mn, e Fe. Os reagentes foram adicionados em uma concentração equimolar, sendo a reação realizada a temperatura ambiente e sob fluxo (40ml/min) de nitrogênio.

Os produtos foram recolhidos em um recipiente imerso em banho de acetona e nitrogênio líquido.

Os produtos foram analisados por meio de cromatografia em fase gasosa acoplada a espectrometro de massas. Utilizando curva de calibração, para quantificar os produtos.

A tabela a seguir, mostra as concentrações dos produtos resultantes da troca nos halogenetos de butila :

Tabela 1: Efeito da modificação do contra-íon da Zeólita Y sobre a concentração de troca de halogênios

Zeólitas trocadas	Csec-bromo (g/L)	Cterc-cloro (g/L)
CuY	5,32	0,46
ZnY	6,22	0,45
NiY	6,62	0,43
CoY	7,67	0,45
MnY	14,03	0,50
FeY	24,87	0,51

Possivelmente a zeólita está funcionando como um solvente sólido, devido suas características ionizantes dentro de da cavidade.

Neste trabalho observamos “switch” entre os átomos de halogênios. Na tabela acima a concentração do isômero terciário formado não varia significativamente com a natureza do metal, em contra partida o isômero secundário apresentou uma variação considerável na sua concentração.

Esta reação é inédita e mostra a grande capacidade ionizante do ambiente zeolítico.

### Conclusões

De acordo com os resultados apresentados neste estudo, zeólitas trocadas com íons metálicos são capazes de promover reações que envolvem o intercâmbio entre os átomos de cloro e bromo presentes em halogenetos de butila. Esses resultados corroboram com a hipótese segundo a qual halogenetos de alquila interagem com zeólitas para dar reações carbocatiônicas, podendo ser consideradas solventes sólidos.

### Agradecimentos

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

Os autores agradecem ao CNPq e CAPES pelo apoio.

---

*Correa, R. J.; Mota, C. J. A.; Phys. 2002, 4, 4268*