

Síntese de catalisadores de ferro ancorados em sílica e suas aplicações na oxidação do cicloexano.

Marcione D. E. Tiradentes¹ (PG)*, Fernanda Hentzy¹ (IC), Christiane Fernandes¹ (PQ), Adolfo Horn Jr¹ (PQ) *marcionetiradentes@yahoo.com.br

¹Laboratório de Ciências Químicas, Universidade Estadual do Norte Fluminense, Campos dos Goytacazes – RJ
Palavras Chave: sílica organofuncionalizada, catalisadores de ferro, oxidação.

Introdução

Os hidrocarbonetos são os principais constituintes do petróleo e gás natural, entretanto são pouco utilizados como matéria prima, pois apresentam baixa reatividade química¹. Por isso, existe uma constante busca pelo desenvolvimento de processos químicos que possam realizar facilmente a transformação de hidrocarbonetos em compostos de maior valor agregado, como alcoóis, epóxidos, aldeídos, ácidos e peróxidos².

Dessa forma, tem-se intensificado a busca por catalisadores que possam promover a oxidação do cicloexano, gerando cicloexanol e cicloexanona, que são precursores do ácido adípico e da caprolactama, sendo estes largamente utilizados na produção de intermediários farmacêuticos, inseticidas, bactericidas e principalmente na produção de poliamidas como o Nylon-6 e Nylon-66³. Neste trabalho apresentamos os primeiros resultados da preparação de catalisadores heterogêneos de ferro e suas aplicações na oxidação do cicloexano.

Resultados e Discussão

As sílicas organofuncionalizadas **S1** e **S2** foram obtidas de acordo com o esquema de síntese apresentado na Figura 1.

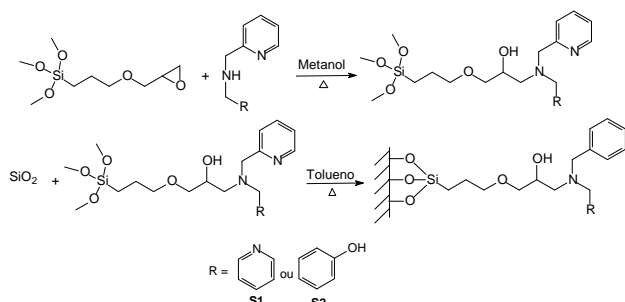


Figura 1. Esquema síntese das sílicas organofuncionalizadas.

As sílicas organofuncionalizadas foram reagidas com cloreto de ferro ($\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) obtendo-se os catalisadores **C1** e **C2**. As sílicas e os catalisadores foram caracterizados por análise termogravimétrica, espectroscopia de infravermelho e análise elementar de C, H e N que indicaram a obtenção dos mesmos. O grau de imobilização dos silanos/complexos incorporados nas sílicas foi determinado através da

análise elementar de C, H e N, sendo encontrado 0,20 mmol/g (catalisador/sílica) para o **C1** e 0,25 mmol/g (catalisador/sílica) para o **C2**.

A reação da oxidação do cicloexano catalisada pelos compostos **C1** e **C2** foi realizada em acetonitrila, utilizando-se H_2O_2 como oxidante a uma temperatura de 25 °C, durante 24 h. Foram realizados três testes para cada catalisador na razão catalisador: H_2O_2 :cicloexano; I – 1:1000:1000; II – 5:1000:1000 e III – 10:1000:1000.

Após a realização do estudo foram observados os produtos de oxidação apresentados na Figura 2.

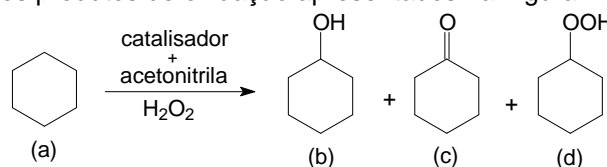


Figura 2. Produtos de oxidação do cicloexano.

Os produtos da oxidação do cicloexano foram quantificados por espectrometria de massas e os resultados obtidos são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Resultado das porcentagens de conversão dos produtos da oxidação do cicloexano.

Teste	C1			C2		
	(b)	(c)	(d)	(b)	(c)	(d)
I	0,3	0,2	1,7	0,2	0,2	2,2
II	3,0	1,4	4,1	1,3	0,7	2,9
III	3,0	1,6	2,9	1,7	0,7	2,8

Conclusões

Os resultados obtidos indicam que as sílicas **S1** e **S2** foram hábeis em formar catalisadores heterogêneos de ferro. Pode-se observar ainda, que os catalisadores desenvolvidos foram capazes de promover a oxidação do cicloexano, sendo que o catalisador **C1** na condição do teste II foi o que apresentou a maior conversão (8,5%)

Agradecimentos

CNPq, UENF, FAPERJ.

¹ Ayala, M.; Torres, E. *Applied Catalysis A: General*, **2004**, 272, 1.

² Shilov, A. E.; Shul'pin, G. B. *Chemical Reviews*, **1997**, 97, 2879.

³ Schuchardt, U.; Cardosos, D.; Sercheli, R.; Pereira, R.; Cruz, R. S.; Guerreiro, M. C.; Madelli, D.; Spinacé, E. V.; Pires, E. *Applied Catalysis A: General*, **2001**, 211, 1.