

ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA À OXIDAÇÃO CATALÍTICA DE ÁLCOOL BENZÍLICO MEDIADA POR COMPLEXOS DE COBRE¹

Larissa Chimilouski², Fernando Xavier³, Ana Tillmann⁴, Edmar Martendal⁵

¹ Vinculado ao projeto “Desenvolvimento de catalisadores bioinspirados contendo metais de transição para a oxidação de substratos orgânicos”

² Acadêmica do Curso de Licenciatura em Química – CCT – Bolsista

³ Orientador, Departamento de Química – CCT – fernando.xavier@udesc.br

⁴ Mestranda no Programa de Pós-Graduação em Química Aplicada – CCT

⁵ Professor, Departamento de Química – CCT

RESUMO

As enzimas que contêm cobre como centro ativo podem atuar como catalisadores de reações de oxidação presentes em diversos processos biológicos. A oxidação de substratos orgânicos é um ramo de intensa pesquisa devido ao grande interesse industrial de seus produtos. O ácido benzóico (BzA) e benzaldeído (BA), usados em produtos alimentícios e óleos essenciais, promovido através da oxidação do álcool benzílico é um exemplo disto.

O presente trabalho se propõe a estudar a atividade catalítica de três complexos de cobre contendo ligantes nitrogenados, na oxidação do álcool benzílico com peróxido de hidrogênio, utilizando um planejamento multivariados Box-Behnken. Os complexos (Fig. 1) foram sintetizados e caracterizados segundo a metodologia já descrita por Tillmann (2022).

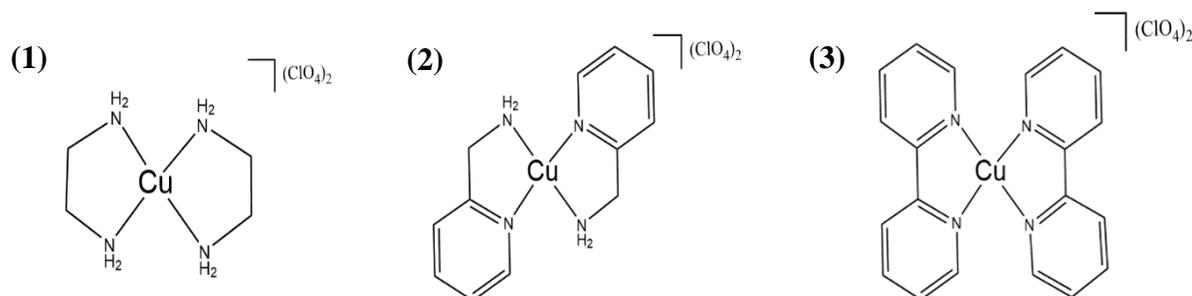


Figura 1. Complexos 1, 2 e 3

O modelo do planejamento empregado foi escolhido com base em literatura, com três fatores a serem avaliados, o tempo, quantidade de catalisador e a quantidade de peróxido de hidrogênio e sob condições brandas (20°C e pressão atmosférica). Sendo realizado um total de 12 experimentos e 3 replicatas no ponto central para cada planejamento. Foram feitos 3 experimentos para cada um dos complexos.

Com isso, é possível gerar as superfícies de resposta (Figura 2) que mostram a conversão do álcool benzílico em benzaldeído. Não foi possível gerar os gráficos para o ácido benzóico devido a falta de pontos suficientes nos planejamentos realizados.

[1] A. I. Tillmann. Dissertação de mestrado. UDESC (2022).

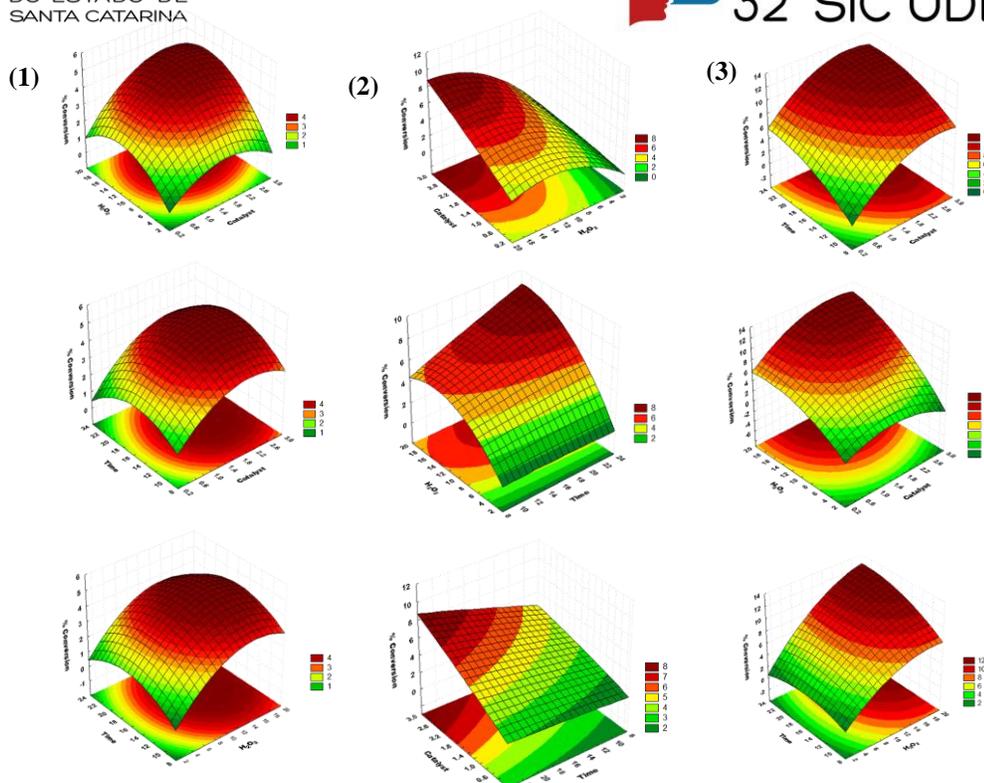


Figura 2. Superfícies de resposta normalizadas obtidas para a formação de BA, considerando 1, 2 e 3 como catalisador. Cada superfície foi gerada com a variável ausente em seu valor ideal

Pode-se observar que para as superfícies dos complexos 2 e 3 não apresentam uma curvatura muito evidente, se assemelhando com planos. Por sua vez, a superfície do complexo 1 apresentou uma curvatura, resultando em condições ótimas globais, ao contrário das demais superfícies que apresentam um ponto em condições locais dentro do domínio experimental. Dentro das condições ótimas determinadas nas superfícies (Tabela 2), realizou-se experimentos para avaliar a conversão no ponto ótimo de cada complexo e a sua resposta naquela condição.

Tabela 2. Condições ótimas para a oxidação do BnOH, à 20°C

Complexo	Catalisador (mol%)	H ₂ O ₂ (n/n _{BnOH})	Tempo (h)	Conversão teórica	Conversão experimental
1	2,19	14,52	16,32	4,76	5,18
2	3,00	20	24	8,68	7,38
3	2,5	20	24	12,55	10,43

Desta forma, foi possível verificar que: 1. Os complexos de cobre estudados foram ativos na oxidação catalítica do álcool benzílico, gerando seletivamente apenas benzaldeído e, apenas traços de ácido benzóico; 2. Considerando o ponto ótimo para as variáveis estudadas, os dados experimentais de conversão de álcool benzílico em benzaldeído são compatíveis com os resultados obtidos pelo modelo teórico matemática gerado (superfícies) e 3. As variáveis estudadas (tempo de reação, quantidade de catalisador e excesso de H₂O₂) são dependentes entre si e, por consequência, afetam a quantidade de produtos formados.

Palavras-chave: Análise multivariada, complexos de cobre, álcool benzílico.