

## ESTUDO DA OXIDAÇÃO CATALÍTICA DO CICLOHEXENO MEDIADA POR UM COMPLEXO BIOINSPIRADO DE COBRE VIA ANÁLISE MULTIVARIADA<sup>1</sup>

Daniella Will<sup>2</sup>, Fernando Roberto Xavier<sup>3</sup>, Larissa Chimilouski<sup>4</sup>

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

<sup>2</sup> Acadêmico (a) do Curso de Licenciatura em Química – CCT – Voluntário

<sup>3</sup> Orientador, Departamento de Química – CCT – Fernando.xavier@udesc.br

<sup>4</sup> Mestranda no Programa de Pós-Graduação em Química Aplicada – CCT

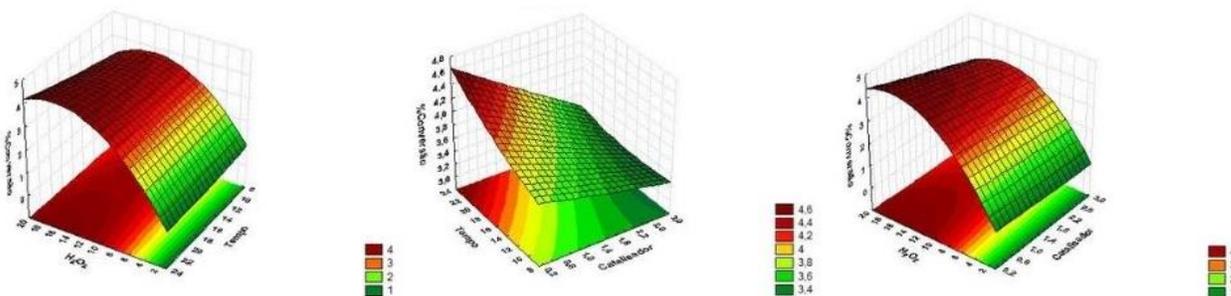
Atualmente, indústrias estão investindo e buscando por procedimentos e métodos eficientes que trabalhem com uma Química Verde, desde a obtenção de matéria prima e reagentes, até o descarte de resíduos. Isto inclui a produção do ácido adípico, um monômero utilizado para produção do nylon-6,6. A fim de obter esses ácidos, utilizam-se três componentes: 1,2-Epoxiciclohexano, 2-Ciclohexen-1-ona e 2-Ciclohexen-1-ol. Estes podem ser adquiridos a partir da oxidação do Ciclohexeno.

O presente trabalho demonstra a eficiência do catalisador de cobre(II) com ligante 2,2'-bipiridina (*bpy*) para obtenção dos compostos a partir da oxidação do ciclohexeno, com a utilização de peróxido de hidrogênio como oxidante, acetonitrila como solvente, em temperaturas de 20° C e 50° C a pressão atmosférica.

O estudo ainda fez uso de um planejamento multivariado determinado Box-Behnken, o qual proporcionou 13 diferentes amostras, sendo que uma delas fez-se em triplicatas devido a reprodutibilidade dos resultados obtidos, gerando um total de 15 amostras. Para isso, alterou-se três variáveis em três níveis, estas sendo a quantidade de catalisador, a quantidade de peróxido utilizado e o intervalo de tempo.

A partir de análises cromatográficas, percebeu-se que não havia uma conversão considerável dos produtos a 20°C, portanto partiu-se para análises em 50°C, estas gerando resultados quantificáveis, que corroboraram com a Figura 1, a qual representa apenas as superfícies de resposta para o 2-Ciclohexen-1-ol, mas foi obter para todos os produtos.

**Figura 1.** Superfícies de Resposta obtidas pelo planejamento Box-Behnken para conversão do Ciclohexeno ao 2-Ciclohexen-1-ol em função da concentração do catalisador, concentração do peróxido de hidrogênio e do intervalo de tempo da reação.



Estas superfícies possibilitaram compreender o comportamento da reação, pois a partir delas obteve-se pontos teóricos de máxima conversão para cada um dos produtos, os quais variam em quantidade de catalisador e peróxido, e o intervalo de tempo utilizado. Com isso, realizou-se uma série de análises sobre estes pontos a fim de confirmar se o catalisador era de fato eficiente ou não para obtenção destes produtos, comparando com o sal de cobre (perclorato de cobre (II)), e sem nenhum catalisador. As porcentagens de conversões obtidas estão na tabela 1, logo abaixo:

**Tabela 1.** Porcentagens de conversões dos produtos alterando o catalisador nas condições ótimas que maximizem a conversão dos produtos.

Entrada	Catalisador (mol%)	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (n/n <sub>Ciclohexeno</sub> )	Tempo (h)	% de Conversão		
				I	II	III
<sup>a</sup> 1	2,5	16	16	<b>8,70</b> <b>(11,8)</b>	45,5	-
<sup>b</sup> 2	0,2	18	12	4,96	<b>57,6</b> <b>(65,2)</b>	4,51
<sup>c</sup> 3	0,2	12	14	2,90	32,70	<b>3,52</b> <b>(4,70)</b>
<sup>a</sup> 1.1	2,5*	16	16	-	22,7	6,45
<sup>b</sup> 2.1	0,2*	18	12	3,39	<b>44,8</b>	3,55
<sup>c</sup> 3.1	0,2*	12	14	-	3,75	<b>0,73</b>
<sup>a</sup> 1.2	-	16	16	-	0,38	-
<sup>b</sup> 2.2	-	18	12	1,14	<b>13,3</b>	1,80
<sup>c</sup> 3.2	-	12	14	-	0,310	-

I – 1,2-epoxiciclohexano; II- 2-ciclohexen-1-ona; III – 2-ciclohexen-1-ol.

<sup>a</sup>: Condição Ótima para maximização de conversão do 1,2-epoxiciclohexano

<sup>b</sup>: Condição Ótima para maximização de conversão do 2-Ciclohexen-1-ona

<sup>c</sup>: Condição Ótima para maximização de conversão do 2-Ciclohexen-1-ol

\*: Perclorato de Cobre como catalisador.

Valores entre parênteses (Teóricos).

Com estes valores obtidos, percebe-se a influência do catalisador para produção dos compostos, especialmente o 2-ciclohexen-1-ona, o qual atingiu cerca de 57% do valor de conversão. Todos os resultados seguiram os esperados pelas superfícies de resposta, e foi possível analisar como a ausência deste catalisador afeta consideravelmente a obtenção destes produtos, em alguns casos resultando em valores de conversão próximos de 0%. Ainda, pode-se notar a importância do oxidante para formação de ambos os compostos, pois em todos os casos era necessária uma grande quantidade de peróxido de hidrogênio.

**Palavras-chave:** Análise Multivariada; Ciclohexeno; Complexo de Cobre (II)