



Avaliação da dependência cinética reacional na monocloração do cicloexano pelo ácido tricloroisocianúrico catalisada pelo perclorato de cobre(II) hexahidratado

Eduardo da Silva Neves, Jéssica da Silva Maciel, Adolfo Horn Junior, Christiane Fernandes Horn, Leonardo Munaldi Lube

A catálise homogênea desempenha papel fundamental no desenvolvimento de processos catalisados. A ação catalítica de metais de transição, seus íons e complexos vêm sendo empregados como catalisadores de vários processos industriais, dentre esses, a conversão de hidrocarbonetos derivados do petróleo em produtos de maior versatilidade química. Contudo, essa linha de pesquisa ainda é um dos maiores desafios científico-tecnológicos. Frente a isso, a cloração seletiva de hidrocarbonetos em condições brandas com uso de fontes de cloro estabilizado pode ser uma das respostas para agregar valor e conferir uso mais nobre para essa matéria-prima. Portanto, este trabalho objetivou estudar a dependência cinética reacional das condições de diferentes razões de concentração de cicloexano (C_6H_{12}) e ácido tricloroisocianúrico (TCCA) na cloração deste hidrocarboneto, catalisada pelo perclorato de cobre(II) hexahidratado na concentração fixa de $7 \cdot 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$. A avaliação da dependência cinética se deu nas condições de 100, 500 e 1000 equivalentes molares (em relação ao catalisador) de TCCA e cicloexano na temperatura de $50 \text{ }^\circ\text{C}$, ao longo da primeira hora de reação. O produto formado, clorocicloexano, foi quantificado por cromatografia gasosa com detector por ionização de chama (GC-FID) por meio de curva analítica de padronização interna. Sobre o estudo cinético observou-se uma dependência da velocidade em função da variação na concentração inicial de cicloexano e de TCCA. Uma análise preliminar sugere ordem $3/2$ para cada reagente, indicando um mecanismo complexo. Além disso, foi observado que a conversão do cicloexano em clorocicloexano atinge cerca de 40% já na primeira hora e chega a cerca de 60% após 24 horas na reação com razão 100:1000:1 (cicloexano:TCCA:catalisador). Em contrapartida, para a razão de 1000:100:1 não observa-se valores tão elevados, chegando-se a apenas 27% de conversão em 24 horas de reação. Logo, isso é indicativo que pode estar ocorrendo reação paralela com o TCCA, como sua decomposição em produtos com menor ação de cloração frente ao hidrocarboneto.

Palavras-chave: Catálise homogênea, Cloração, Cinética.

Instituição de fomento: CNPq, FAPERJ, UENF