



Universidade: presente!



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Desenvolvimento de catalisadores heterogêneos para aplicações industriais

JOÃO EDUARDO ARANALDE LAVARDA^{1*}

¹Laboratório de Reatividade e Catálise – Instituto de Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Campus do Vale – Porto Alegre – CEP: 91501 - 970

*jelavarda@hotmail.com

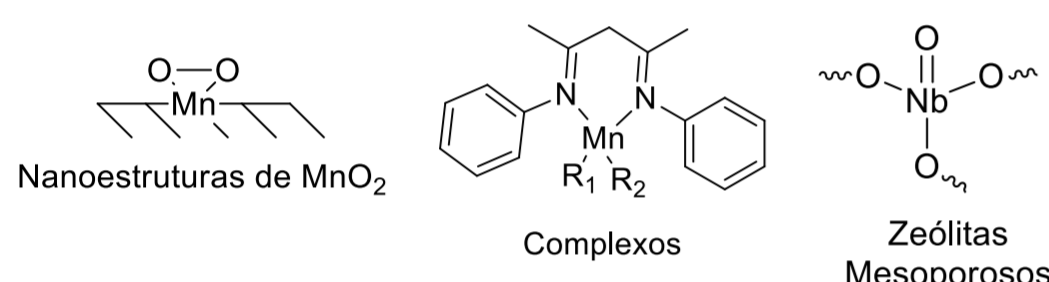
Introdução

Qual a importância de epóxidos?

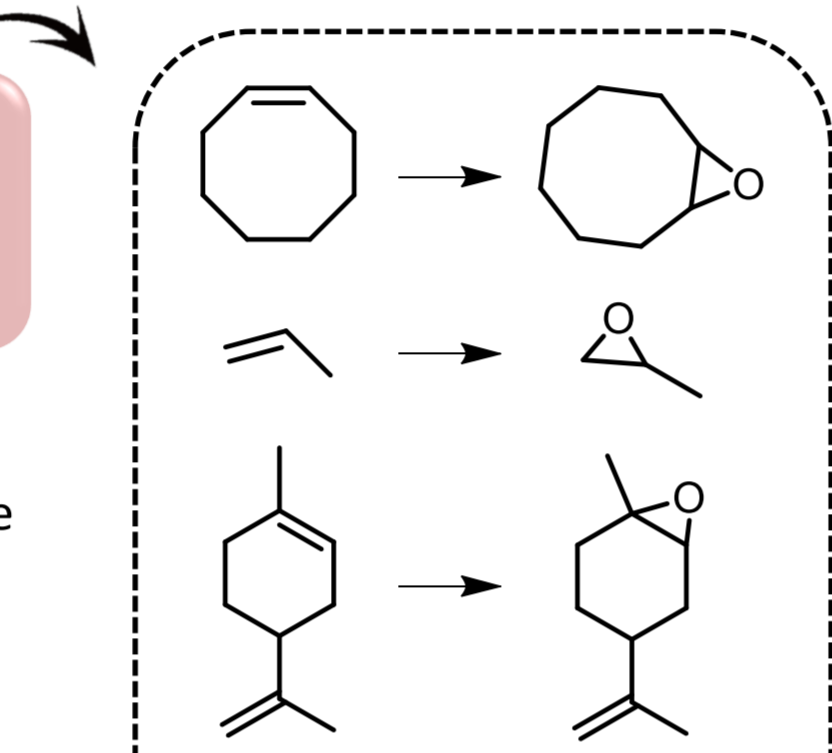
Moléculas intermediárias na produção de diferentes compostos de interesse industrial: produção de fármacos, agentes anticorrosivos, surfactantes, óleos lubrificantes, entre outros.

Desenho de catalisadores heterogêneos:

↑ Atividade ↑ Seletividade ✓ Reusabilidade



Catalisadores baseados em metais com conhecida atividade para reações de oxidação!!!

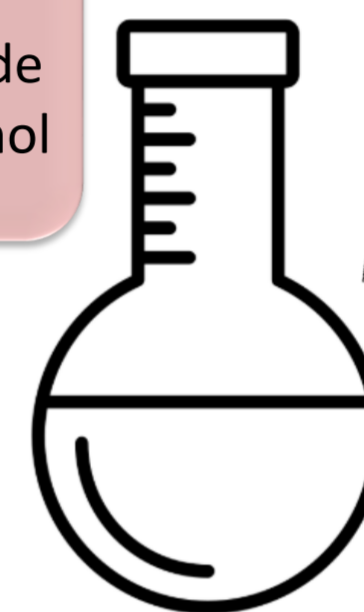
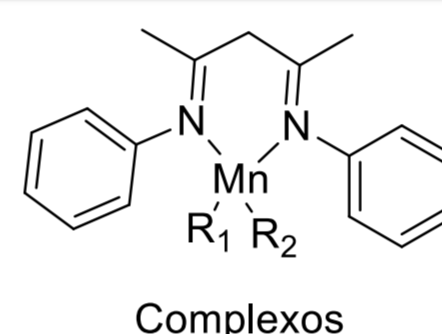


Reação de epoxidação ocorre na presença de um **catalisador** e um oxidante.

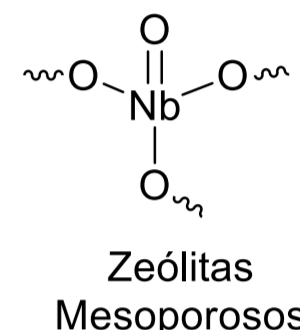
Materiais e métodos

Síntese dos catalisadores

- Ligante 2,4 diimina solubilizado em etanol.
- Relação 5:1 mols de acetato de manganês tetra hidratado por mol de ligante

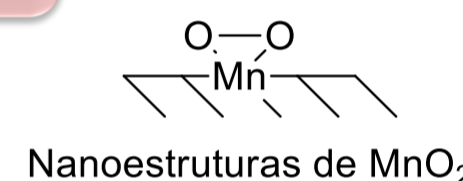


- CTMABr
- TMAOH
- TEOS
- Oxalato amoniacal de nióbio



Filtração a vácuo e calcinação

- KMnO₄
- MnSO₄·H₂O

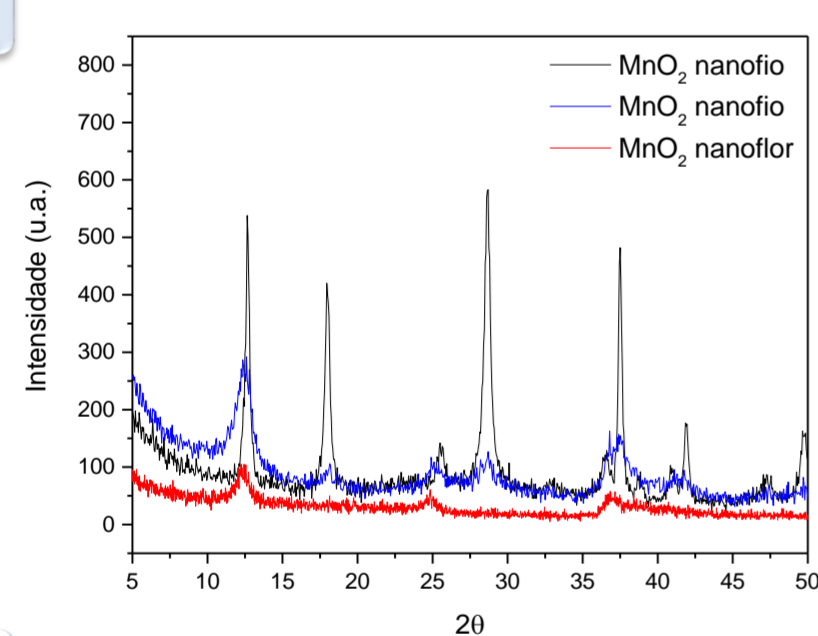


- ✓ Temperatura ambiente (exceto o complexo, T = 60°C)
- ✓ One-pot

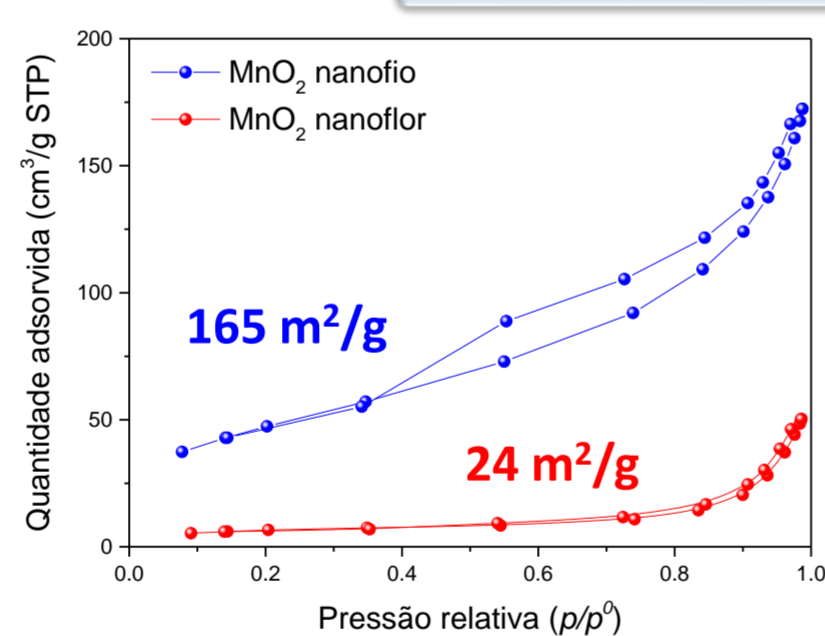
Resultados

Nanoestruturas de MnO₂ (nanofios e nanoflores)

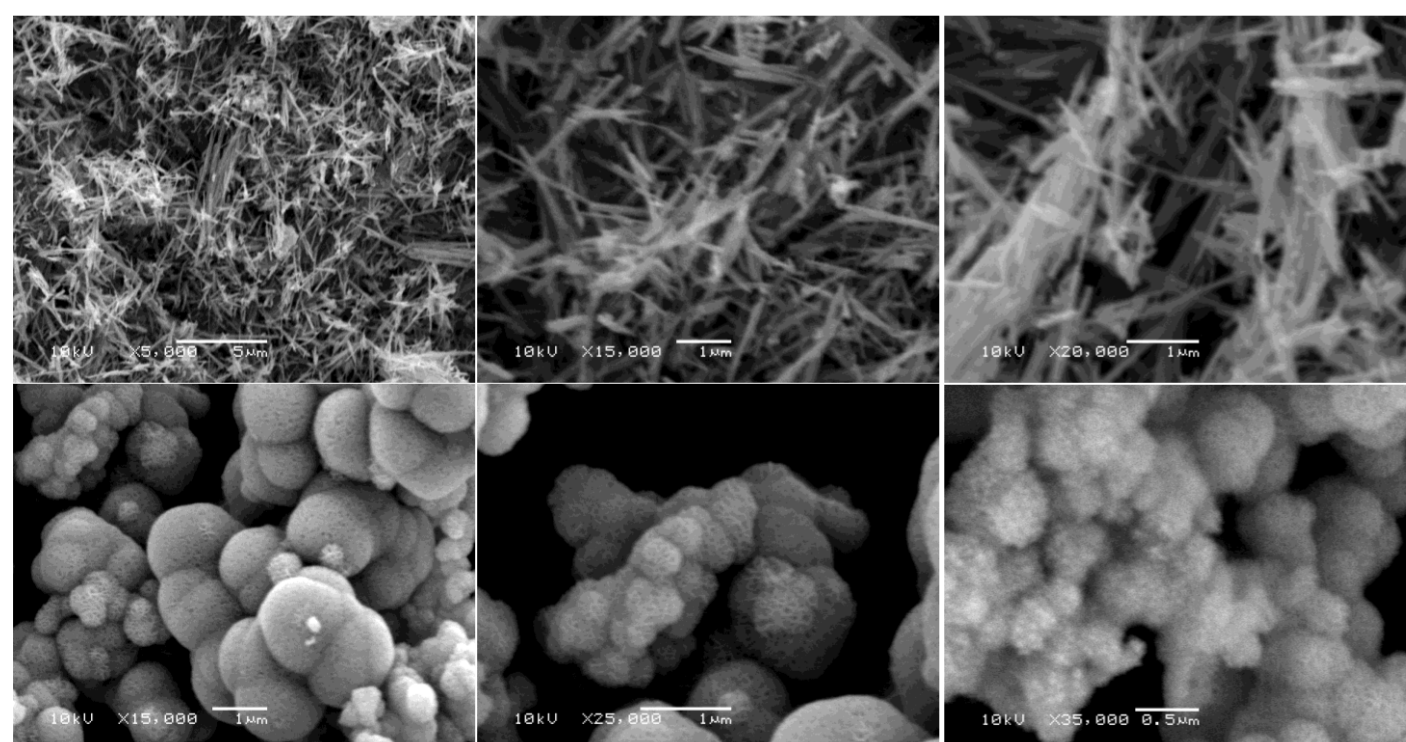
XRD



Fisissorção de N₂

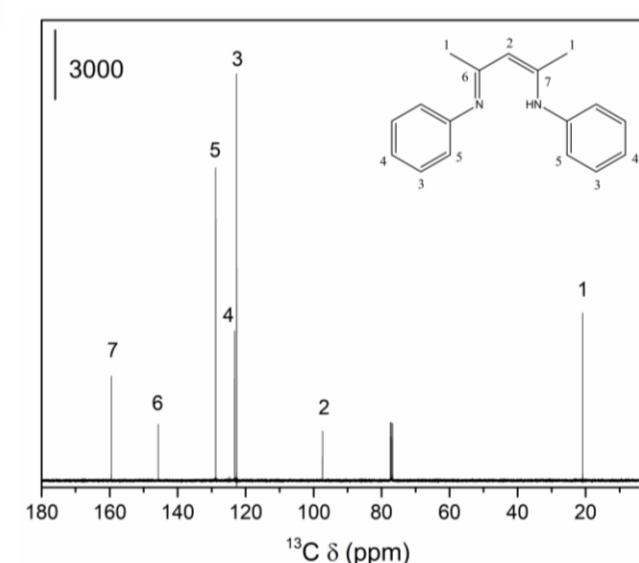


MEV

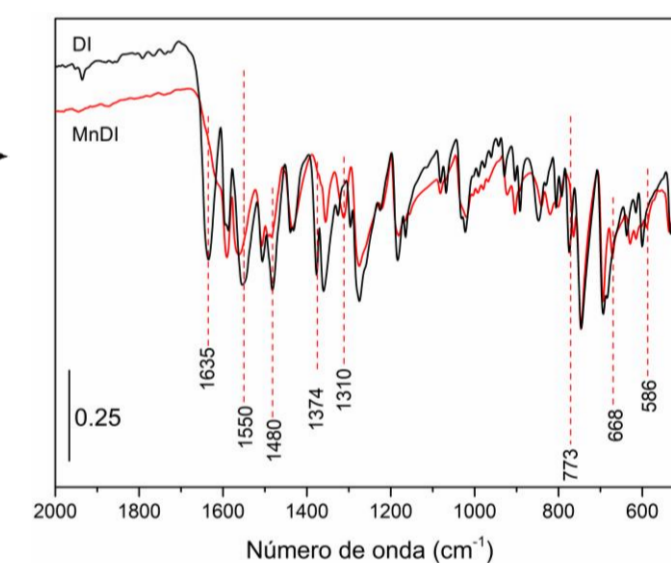


Ligante e complexo de Mn β-diimina

¹³C NMR



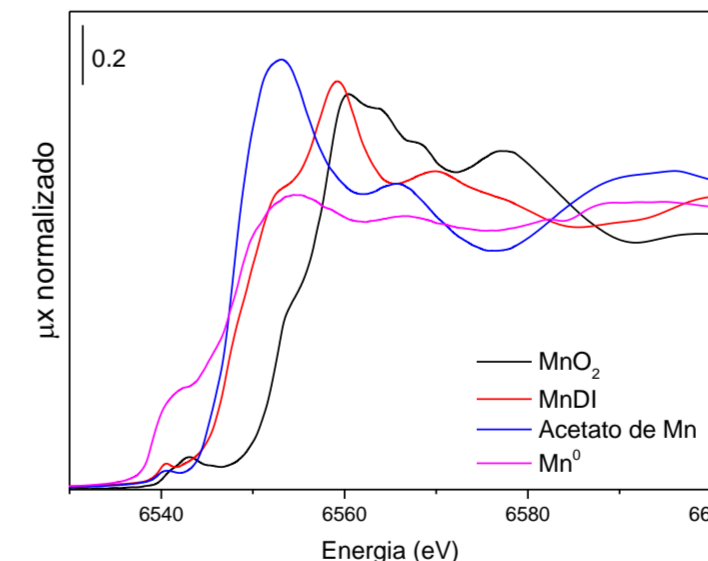
FTIR



XAS



XANES



EXAFS

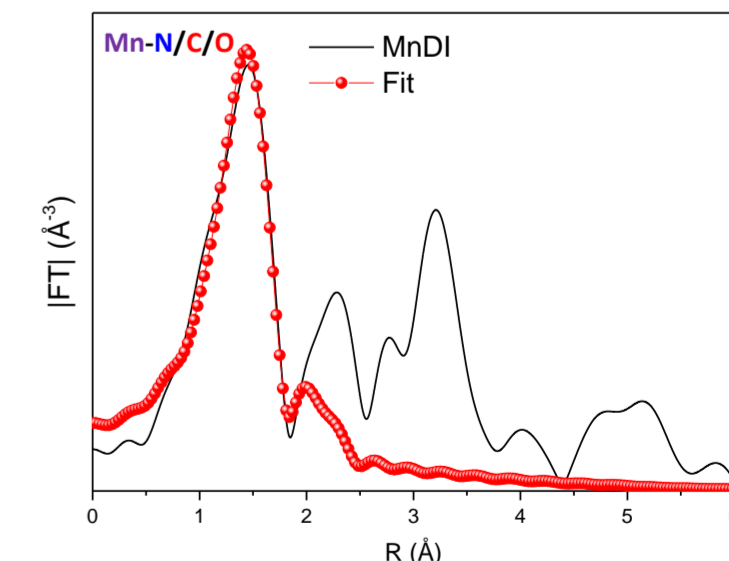


Tabela 1. Parâmetros obtidos pelo ajuste dos dados de EXAFS do espectro da amostra MnDI^a e dados de análise elemental do ligante.

Amostra	N _{Mn-O}	R _{Mn-O} (Å)	σ ² (Å ²)	ΔE ₀ (eV)	r-factor	C/N ratio
MnDI	5,8 ± 0,4	1,944 ± 0,010	0,0782 ± 0,0016	-2,2 ± 1,2	0,0067	9,2

^aO ajuste foi realizado sobre a primeira esfera de coordenação do Mn (ΔR = 2,0-3,0 Å) em um intervalo de Δk = 2,3-11,8 Å⁻¹, resultando em um número de parâmetros independentes igual a 2ΔRΔk/π = 6,0. S₀² = 0,6.

Conclusões

Catalisadores de diferentes naturezas foram sintetizados e sua obtenção foi confirmada através dos resultados das técnicas de caracterização. Até o presente momento, o desempenho dos catalisadores está em processo de verificação através da reação modelo de epoxidação do *cis-cicloocteno*. Ademais, o único composto que necessita de ancoragem prévia em suporte catalítico para atuar heterogeneamente é o complexo de manganês. Uma vez as reações modelo otimizadas, o uso desses catalisadores poderá ser estendido para a conversão de outras olefinas de interesse.

Referências

- [1] Aveiro, L.R. et al.; Chemosphere 208 (2018) 131-138.
- [2] Da Silva, A.G.M. et al.; Appl. Catal. B 184 (2016) 35-43.
- [3] Rossetto, E. et al.; J.Catal. 323 (2015) 45-54.

Agradecimentos

- Ao INOMAT pela bolsa de IC.
- À Dra. Débora Meira e ao Argonne National Laboratory pelas análises de XAS.