



UNICAMP

Aplicação de nanopartículas de ouro suportadas em nanotubos de carbono em reações de hidrogenação seletiva

Fábio Henrique Boreli; Eduardo Marques Meneghetti; Regina Buffon
Instituto de Química – UNICAMP
g081284@iqm.unicamp.br



INTRODUÇÃO

Embora haja a crença de que o ouro seja um material inerte, nanopartículas de ouro exibem atividade catalítica em diversas reações, por exemplo em reações de oxidação e hidrogenação¹.

Nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWNTs) e simples (SWNTs) tem sido utilizados como suportes para catalisadores devido às suas características.²

OBJETIVOS

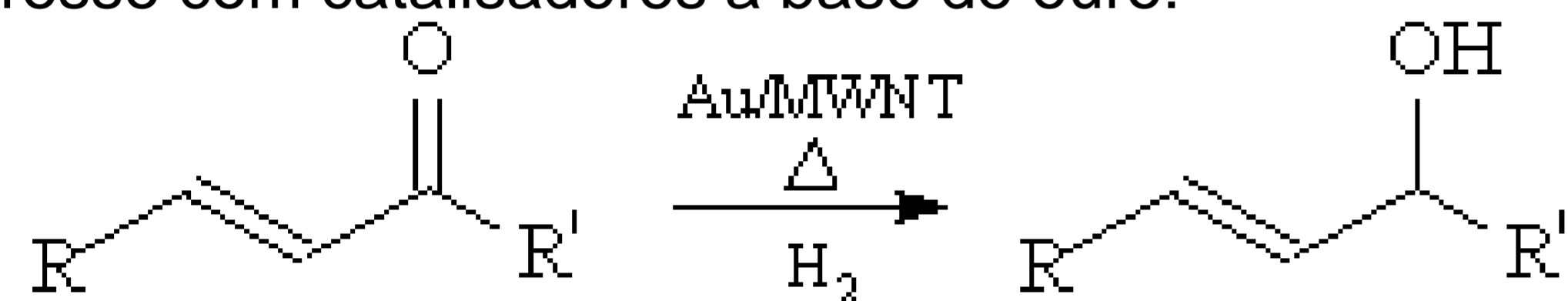
Avaliar o uso de nanopartículas de ouro suportadas em nanotubos de carbono em reações de hidrogenação seletiva de aldeídos e cetonas α,β -insaturados.

Avaliar a influência de mudanças de parâmetros reacionais na atividade e seletividade de catalisadores metálicos suportados em carvão ativo (Rh/C e Pt/C).

EXPERIMENTAL

Os testes catalíticos foram realizados em um reator Parr de 100mL, em temperaturas entre 30-110°C, pressões entre 5-100bar H₂, utilizando-se etanol como solvente.

Reação de interesse com catalisadores a base de ouro:



Os substratos utilizados (figura 1) foram trans-cinamaldeído (a) e benzalacetona (b):

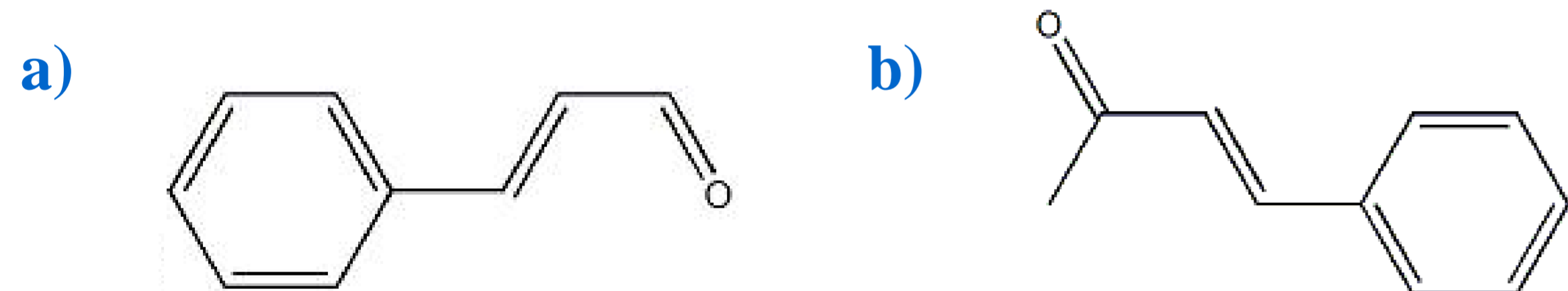


Figura 1: Substratos utilizados nos testes catalíticos

No estudo comparativo dos catalisadores metálicos suportados em carvão, utilizaram-se dois níveis para cada um dos parâmetros analisados, como apresentado na Tabela 1.

Tabela 1: Níveis utilizados para pressão, temperatura e razão molar metal/substrato

Nível	Pressão (bar)	Temperatura (°C)	Razão Molar Metal/Substrato	
			Rh/C	Pt/C
1	5	30	1/345	1/658
2	100	110	1/78	1/148

Realizaram-se 8 experimentos com cada um dos catalisadores, por meio da variação dos níveis de cada parâmetro. O substrato utilizado em todas as reações foi o trans-cinamaldeído.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. G. J. Hutchings, *Catal. Today* 122 (2007) 196;
2. J.-M. Moon, K. H. An, Y. H. Lee, Y. S. Park, D. J. Bae, G.-S. Park, *J. Phys. Chem. B* 105 (2001) 5677;
3. Y. Shi, R. Yang, P. K. Yuet, *Carbon*, 47 (2009) 1146;
4. L. Delannoy, N. El Hassan, A. Musi, N. Le To, JM. Krafft, C. Louis, *J. Phys. Chem. B*, 110 (2006) 22471;
5. Eiras, S. P., Coscione, A. R., Custódio, R, Andrade, J. C.; Métodos de Otimização em Química, Chemkeys, 2000, disponível em : www.chemkeys.com/br;
6. M. Guisnet, J. Barrault, C. Bouchoule, D. Duprez, C. Montassier, G. Perót, *Heterogeneous Catalysis and Fine Chemicals*, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1988, p. 171-178.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Duas amostras de catalisadores sintetizados por métodos diferentes foram analisadas por Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM). As imagens são mostradas abaixo:



Figura 2: Catalisador sintetizado pelo método do citrato³

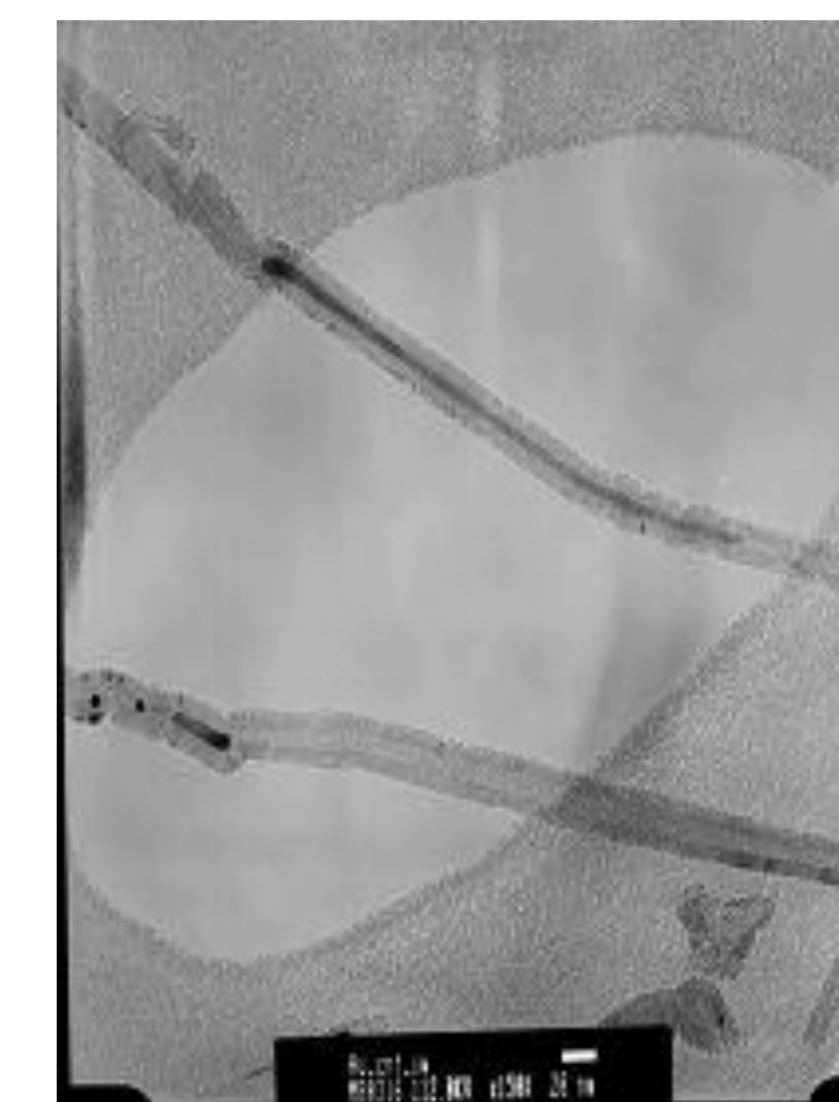


Figura 3: Catalisador sintetizado pelo método de impregnação incipiente⁴

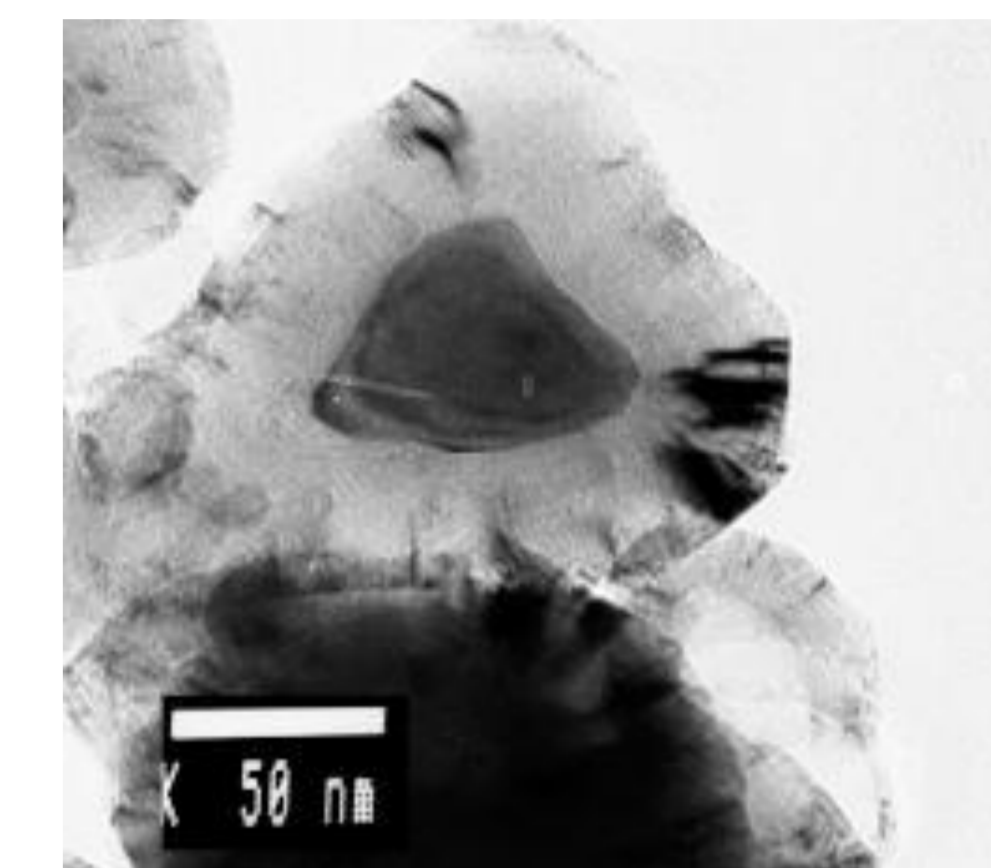


Figura 4: Ouro depositado no interior e nas paredes do nanotubo. Síntese pelo método de impregnação incipiente

Embora os catalisadores possuíssem partículas de ouro depositadas nos nanotubos de carbono, nenhum deles apresentou atividade catalítica em reações de hidrogenação. No entanto, o catalisador sintetizado pelo método de impregnação incipiente promoveu 63% de conversão do trans-cinamaldeído a éter etoxi-cinâmico (figura 5), com 100% de seletividade. O mesmo comportamento é observado quando realiza-se catálise homogênea com íons Au³⁺.

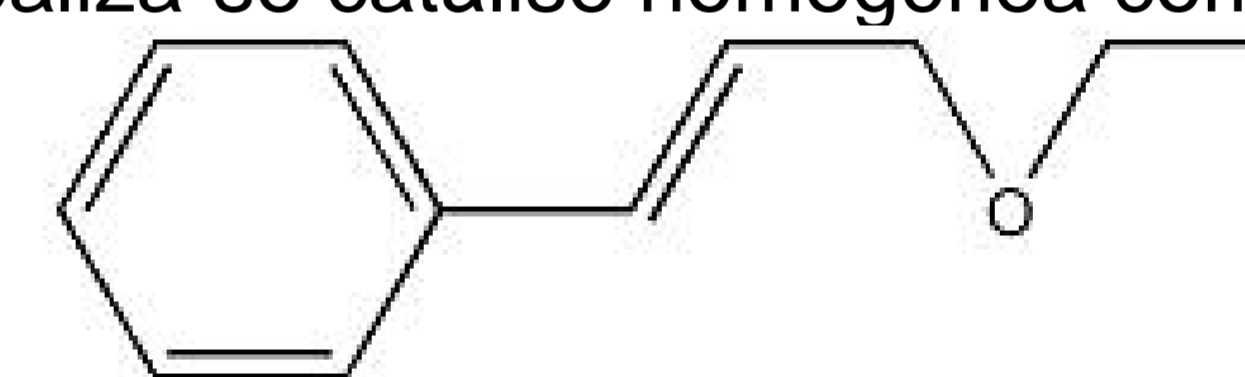


Figura 5: Éter etoxi-cinâmico

Os resultados do tratamento de dados⁵ das reações com Rh/C e Pt/C são apresentados na tabela 2. O fator de influência representa o quanto a variação de determinado parâmetro influencia na conversão do reagente.

Tabela 2: Fatores de influência para os parâmetros analisados

Parâmetro	Fatores de Influência	
	Catalisador	
	Rh/C	Pt/C
Pressão	1,62	4,41
Temperatura	3,62	1,00
Quantidade de catalisador	2,34	1,54

Nas reações com Rh/C o único produto formado foi o 3-fenilpropanal, enquanto que nos testes com Pt/C, que é mais ativo que Rh/C em reações de hidrogenação⁶, formou-se também, em determinadas reações, o 3-fenilpropanol, produto totalmente hidrogenado. Esses produtos são mostrados na figura 6.

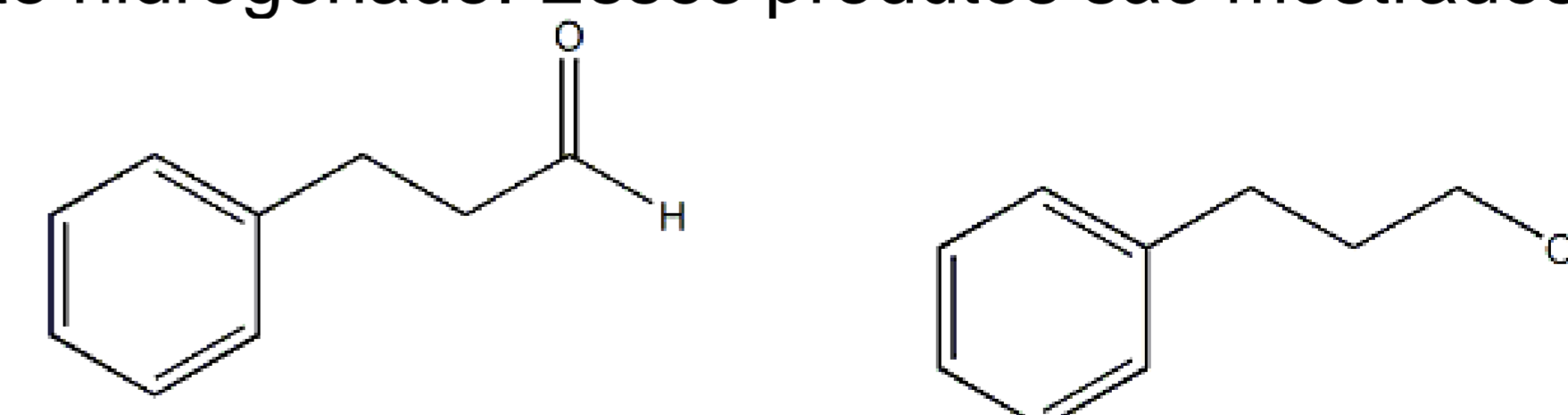


Figura 6: 3-fenilpropanal (esquerda) e 3-fenilpropanol (direita)

CONCLUSÃO

Os catalisadores de nanopartículas de ouro suportadas em nanotubos de carbono não apresentaram atividade catalítica para a reação desejada; no entanto, o catalisador sintetizado pelo método de impregnação incipiente teve atividade catalítica semelhante à de íons Au³⁺ na reação estudada, promovendo a conversão do trans-cinamaldeído a éter etoxi-cinâmico.

O parâmetro com maior fator de influência para Pt/C foi a pressão, e para Rh/C, a temperatura. Isso implica que o aumento desses parâmetros contribuem mais para uma maior conversão do reagente quando comparado ao aumento das outras variáveis.