

**UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN**  
**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**  
**PROGRAMA DE GRADUADOS EN QUÍMICA**



***EPOXIDACIÓN DE CICLOHEXENO CATALIZADA POR COMPLEJOS  
METÁLICOS SOPORTADOS EN RESINAS POLIMÉRICAS***

***Tesis para optar el grado de Doctor en Ciencias con mención en Química***

***Gloria Borda Guerra***  
***2003***

## **RESUMEN**

En esta tesis se presenta estudios catalíticos de la epoxidación de ciclohexeno sobre oxocomplejos de molibdeno inmovilizados en resinas poliméricas.

Se prepararon diversas resinas para su utilización como soportes de los complejos estudiados, analizando en mayor detalle resinas entrecruzadas poli(4-vinilpiridina-co-estireno). Los sólidos estudiados se sometieron a diferentes técnicas de caracterización que incluyen análisis químico, termogravimetría, FTIR, SEM, determinación de superficie específica y XPS.

En un estudio preliminar se estudiaron cuatro oxocomplejos de molibdeno,  $\text{MoO}_2(\text{acac})_2$ ,  $\text{Mo}(\text{CO})_6$ ,  $\text{MoO}_2(\text{oxi})_2$  y  $\text{Na}_4(\text{Mo}_2\text{O}_6\text{EDTA})_8\text{H}_2\text{O}$  y debido al mejor comportamiento exhibido por el primero de estos complejos, la mayor parte de la tesis se centró en el  $\text{MoO}_2(\text{acac})_2$ .

La reacción de epoxidación de ciclohexeno se estudió en el rango de temperatura 40 – 60 °C usando ter-butyl hidroperóxido (TBHP) como agente oxidante.

Se analizó una serie de catalizadores con similar contenido de complejo soportados en resinas poli(4-vinilpiridina-co-estireno) con distinto grado de entrecruzamiento, y series de catalizadores con contenido variable de complejo en cada una de las resinas. Se encontraron diferencias sustanciales en la actividad catalítica en cada una de los catalizadores investigados, pero todos ellos, fueron muy selectivos hacia el correspondiente epóxido, y con escasa lixiviación de fase activa. Las diferencias observadas son explicadas en términos de las propiedades superficiales de ellas, caracterizadas por las técnicas mencionadas. Los resultados catalíticos son comparados con los estudios en esta tesis para la misma reacción en fase homogénea.

Sobre uno de los catalizadores  $\text{MoO}_2(\text{acac})_2$  soportado en una matriz polimérica se realizó también un estudio cinético, encontrándose que la reacción presentaba un orden global 2, 1 con respecto al ciclohexeno y 1 con respecto al TBHP. Se propone un mecanismo compatible con estos resultados.