

198

ESTUDO COMPARATIVO DO DESEMPENHO CATALÍTICO DE COMPLEXOS DE TITÂNIO (IV), ZIRCÔNIO (IV) E NIÓBIO (V) NA POLIMERIZAÇÃO DE 1,3-BUTADIENO. *Leandro Vieira da Silva, Daniela Dal Piva Ely, Yeda Pinheiro Dick.* Departamento de Físico-Química. Instituto de Química. UFRGS.

Complexos de Ti (IV), Zr (IV) e Nb (V), de fórmulas mínimas, respectivamente: $[\text{Ti}_3(\text{C}_{16}\text{H}_{11}\text{O}_6)_2(\text{HCOO})_{10}]$, $[\text{Zr}_2(\text{OH})_5(\text{C}_{16}\text{H}_9\text{O}_6)(\text{H}_2\text{O})_3]$ e $[\text{NbO}(\text{C}_{16}\text{H}_{11}\text{O}_6)(\text{C}_2\text{O}_4)]$ possuem excelente atividade catalítica na polimerização homogênea estereoespecífica de butadieno, empregando como catalisador AlEt_2Cl e tolueno como solvente. Um estudo comparativo de sua atividade catalítica ("turn over number"), rendimento, estereosseletividade, massa molar média (M_w) e polidispersão (M_w/M_n) foi desenvolvido em função de algumas variáveis de reação. Os catalisadores foram preparados conforme processos desenvolvidos no laboratório. Os testes de polimerização foram realizados em autoclave de aço inox revestido internamente de vidro pirex, dispondo de agitação magnética, sob atmosfera inerte. Após a reação, separaram-se oligômeros de polímeros por solubilidade diferenciada em etanol ou metanol. A influência das variáveis reacionais (temperatura, tempo de reação, razão metal/Al) sobre a natureza dos produtos obtidos foi examinada. O material produzido foi caracterizado por espectroscopias de IV e RMN de ^1H e de ^{13}C , GPC, DSC e VPO. De maneira geral, o catalisador de Nb (V) produz somente polímeros enquanto que o de Zr (IV) produz sempre maior quantidade de oligômeros do que de polímeros. Por outro lado, Ti (IV) pode produzir uns e outros ou somente polímeros, conforme a acidez de Lewis do meio. Todos os três sistemas catalíticos permitem obter polibutadieno com estereorregularidade maior do que 95% em isômero cis-1,4. (CNPq-PIBIC/UFRGS. FAPERGS).