Síntese do Complexo de Paládio com Ligantes LI bistrifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio.





CET- Ciências Exatas e da Terra

- Giovane Barbosa (IC), Engenharia Química, UFRGS
 Prof. Dr. Jairton Dupont (PQ)
- Laboratório de Catálise Molecular, Instituto de Química UFRGS

INTRODUÇÃO

- Líquidos iônicos (LIs) baseados nos cátions 1,3-dialquil-imidazólio são os mais investigados e utilizados por apresentarem propriedades físico-químicas singulares tais como: baixa pressão de vapor e excelente estabilidade térmica.
- Este trabalho visa o desenvolvimento de uma nova metodologia sintética do Complexo de Paládio com Ligantes LI bistrifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio e a análise da pureza obtida e do rendimento do processo. E em um segundo momento a produção de um substrato que será futuramente usado na análise deste catalisador frente a Reação de Heck intramolecular..

METODOLOGIA:

- 1. Síntese do bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio:
- O procedimento experimental inicia com a reação entre o 1metilimidazol com excesso de dibromoetano para obtermos como produto o sólido branco brometo de 3-(2-bromoetil)-1-metilimidazólio.

$$N > N + Br \longrightarrow Br \longrightarrow Br \longrightarrow Br \longrightarrow Br$$

5 dias; t.a.

 $N + Br \longrightarrow Br$

• Em seguida é feita a reação de substituição nucleofílica com a tiourea em etanol a 80°C para formar o sal de isotiourônio. O produto (Figura 1) foi obtido em bom rendimento e separado por filtração em funil de Büchner.

- O produto obtido na segunda reação é então reagido com KOH em água a 80°C sob refluxo por 15min.
- Esta mistura é então resfriada e são adicionados 1,05eq de CH₃I e MeOH *in situ* a temperatura ambiente para obtermos o haleto de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio.

• É então realizada a evaporação do metanol e posterior reação de simples troca do ânion haleto utilizando como reagente o bis(trifluorometanosulfonil imidato de lítio) (Figura 2).

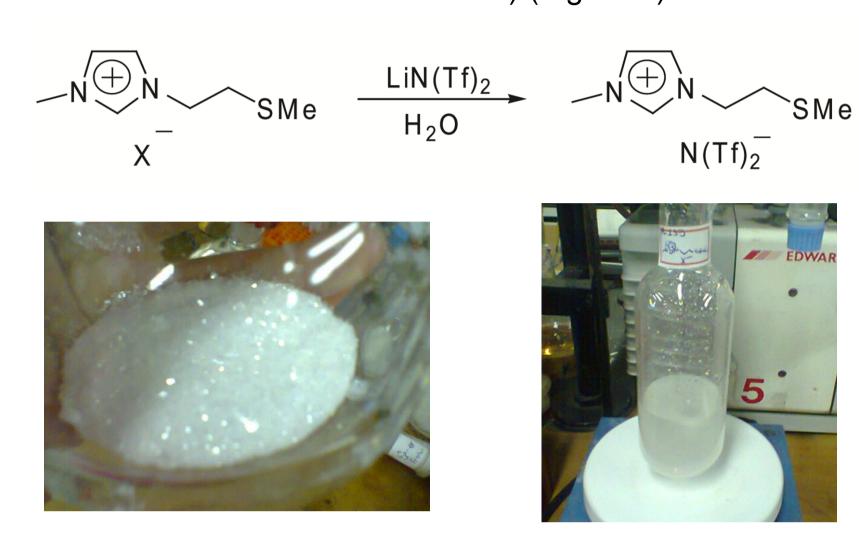


Figura 1. Figura 2.

- 2. Síntese do complexo de paládio
- Na síntese do catalisador de paládio foram usados 2,5eq de cloreto de lítio e 2eq de Líquido Iônico para cada equivalente de cloreto de paládio.

3. Síntese do substrato para a reação de Heck

 O catalisador de paládio será utilizado na Reação de Heck com o substrato obtido pela sequencia das etapas reacionais acima.

PERSPECTIVAS

 Futuramente serão realizados testes com este catalisador frente a reação de Heck intramolecular com o substrato sintetizado para avaliar sua influência na cinética da reação.

REFERÊNCIAS

- 1. L. D. Field; B. A. Messerle; K. Q. Vuong; Peter Turner Organometallics 2005, 24, 4241.
- 2. C. C. Cassol; G. Ebeling; B. Ferrera; J. Dupont Adv. Synth. Catal. 2006, 348, 243.