



| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2014 |
| Local | Porto Alegre |
| Título | Síntese do Complexo de Paládio com Ligantes LI bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio |
| Autor | GIOVANE LANFERMANN BARBOSA |
| Orientador | JAIRTON DUPONT |

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. Eles também são estudados como agentes estabilizantes na síntese de nanopartículas e como ligantes de organometálicos usados para catálise. Este trabalho visa primeiramente um estudo investigativo para o desenvolvimento de uma nova metodologia sintética do LI bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio além da análise da pureza obtida e do rendimento do processo. Além disso este líquido iônico será estudado como ligante em um complexo de paládio cuja eficácia será estudado frente a uma reação de Heck.

O procedimento experimental para a síntese deste composto inicia com a reação entre o 1-metilimidazol com excesso de dibromoetano. O solvente usado é éter etílico e a reação foi conduzida à temperatura ambiente por cinco dias. O produto desta reação é o brometo de 3-(2-bromoetil)-1-metilimidazólio que é um sólido branco e foi obtido com um bom rendimento e alta pureza. Este sal de imidazólio é usado na etapa seguinte na qual reage através de uma reação de substituição nucleofílica com a tiourea em etanol a 80°C para formar o sal de isotiourônio que também foi obtido em bom rendimento.

O produto obtido na segunda reação é então reagido com hidróxido de potássio em água a 80°C sob refluxo por 15min. Esta mistura é então resfriada e são adicionados 1,05eq de iodometano e metanol *in situ* e a temperatura ambiente para obtermos então o haleto de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio. É então realizada a evaporação do metanol em bomba de vácuo e posterior reação de simples troca do ânion haleto utilizando como reagente o bis(trifluorometanosulfonil imidato de lítio) sob agitação à temperatura ambiente.

A pureza de todas as etapas de síntese dos compostos obtidos foram determinadas por ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ¹H) com um instrumento Varian 400 MHz utilizado rotineiramente em nossa pesquisa.

Na síntese do catalisador de paládio primeiramente foram usados 2,5 equivalentes de cloreto de lítio para cada equivalente de cloreto de paládio em refluxo em metanol para formação do complexo Li₂PdCl₄. Posteriormente a este complexo são adicionados dois equivalentes do Líquido Iônico a temperatura ambiente. O produto obtido é o complexo de paládio, um sólido marrom-avermelhado de fórmula PdL₂Cl₂(L=bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil)).

Este catalisador será estudado frente a uma reação de Heck intramolecular com um substrato insaturado para que seja verificada a cinética da reação através de espectroscopia UV.