



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Oligomerização de Propeno Catalisada por Complexo Tridentado de Cobalto
Autor	ANNA PAULA RODRIGUES EHLERT
Orientador	MICHELE OBERSON DE SOUZA

OLIGOMERIZAÇÃO DE PROPENO CATALISADA POR COMPLEXO TRIDENTADO DE COBALTO

Autora: Anna Paula Rodrigues Ehlert

Orientadora: Prof. Michèle Oberson de Souza

Instituição: Instituto de Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

As α -olefinas lineares, em particular o 1-hexeno (trímero de eteno ou dímero do propeno), são de especial interesse por serem empregadas como co-monômeros em processos de produção de polímeros especiais. Oligômeros de propeno, esse último sendo uma molécula assimétrica, pode levar à formação de uma larga gama de isômeros. Assim, encontrar um sistema catalítico seletivo para a obtenção de α -olefinas lineares terminais, como o 1-hexeno, a partir do propeno se torna um grande desafio.

Estuda-se a oligomerização do propeno catalisada por dois sistemas catalíticos compostos de um complexo organometálico de tipo bis(imino)piridina de cobalto (II) e do co-catalisador MAO (metilaluminoxano) sendo que, um dos complexos possui no ligante diimina grupos F e CF₃. Os dois complexos catalíticos, o dicloreto de 2,6-bis[1-(fenilimina)etil]piridina de cobalto (**Co-H**) e o dicloreto de 2,6-bis[1-(2-trifluormetil-4-fluorfenilimina)etil]piridina de cobalto (**Co-F**) são sintetizados através da reação direta de CoCl₂ com os ligantes 2,6-bis[1-(fenilimina)etil]piridina e 2,6-bis[1-(2-trifluormetil-4-fluorfenilimina)etil]piridina respectivamente (solvente THF, agitação por 24h). Ambos são caracterizados por ¹H e ¹³C RMN e por espectroscopia no infravermelho. As estruturas cristalográficas dos complexos de cobalto são obtidas a partir da obtenção dos cristais, sendo a do complexo **Co-F** inédita.

Testes catalíticos são realizados em um reator PARR de aço inoxidável de 450 mL, com pressão de 5 bar de propeno, tempo de 30 minutos, nas temperaturas de 10 °C, 30 °C e 50 °C com relações [Al]/[Co] iguais a 600, 300 e 100, empregando tolueno como solvente. Os oligômeros são analisados por cromatografia gasosa empregando o isooctano como padrão interno e aplicando o método de co-injeção.

Os melhores resultados são obtidos para o complexo **Co-H** a 10 °C com [Al]/[Co]=100: atividade de 135 h⁻¹ e seletividade de 100% em hexenos lineares, sendo 18% em 1-hexeno, e para o complexo **Co-F** a 10 °C com [Al]/[Co]=300: atividade de 47293 h⁻¹ e 100% de seletividade em hexenos lineares, sendo 59% em 1-hexeno.

A comparação dos resultados obtidos com **Co-H** e **Co-F** evidencia o efeito benéfico das funções fluoradas presentes nos ligantes para a obtenção de altas atividades catalíticas e alta seletividade em 1-hexeno, resultado inédito para catalisadores de cobalto.

No intuito de separar mais facilmente os oligômeros do sistema reacional, estão sendo realizados testes catalíticos em meio bifásico utilizando o líquido iônico BMI.AlCl₄ (**LI**).

O **LI** foi sintetizado sob atmosfera inerte misturando lentamente e sob agitação, devido à exotermicidade da reação o BMI.Cl (cloreto de 1-butil-3-metilimidazólio) e AlCl₃ purificado (sublimado) com fração molar em BMI.Cl de 0,45 (mistura levemente ácida). O líquido iônico BMI.AlCl₄, assim formado a partir de dos dois sólidos, é viscoso e de coloração amarelada, e caracterizado por ¹H RMN.

Os testes catalíticos em meio bifásico são realizados em reator de vidro em condições de pressão e tempo reacional equivalentes às anteriormente mencionadas. É evidenciado o efeito da relação [Al]/[Co] na ocorrência da reação de alquilação do tolueno, reação essa competitiva àquela de oligomerização.