



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Oligomerização de Propeno Catalisada por Complexo Tridentado de Cobalto
<b>Autor</b>	ANNA PAULA RODRIGUES EHLERT
<b>Orientador</b>	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  $\alpha$ -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  $\alpha$ -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 CF<sub>3</sub>. 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 CoCl<sub>2</sub> 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 <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C 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<sup>-1</sup> 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<sup>-1</sup> 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.AlCl<sub>4</sub> (**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 AlCl<sub>3</sub> purificado (sublimado) com fração molar em BMI.Cl de 0,45 (mistura levemente ácida). O líquido iônico BMI.AlCl<sub>4</sub>, assim formado a partir de dos dois sólidos, é viscoso e de coloração amarelada, e caracterizado por <sup>1</sup>H 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.