



| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2020 |
| Local | Virtual |
| Título | COMPLEXOS DE PALÁDIO(II) CONTENDO LIGANTES BIDENTADOS E ^N (E = S, Se) PARA OLIGOMERIZAÇÃO DO ETILENO |
| Autor | GABRIEL LUIZ RASCH |
| Orientador | RAFAEL STIELER |

COMPLEXOS DE PALÁDIO(II) CONTENDO LIGANTES BIDENTADOS E^N (E = S, Se) PARA OLIGOMERIZAÇÃO DO ETILENO

Processos de polimerização e oligomerização de olefinas representam uma das principais atividades da indústria química, movimentando bilhões de dólares por ano mundialmente. Portanto, este trabalho visa a síntese, caracterização e aplicação de novos catalisadores de Pd(II) contendo ligantes bidentados feniltionil-pirazol e fenilselenil-pirazol em reações de oligomerização de etileno. A síntese dos ligantes 3,5-dimetil-1-((feniltio)metil)-1H-pirazol (**L1**), 1-(((4-clorofenil)tio)metil)-3,5-dimetil-1H-pirazol (**L3**) e 1-(((4-metoxifenil)tio)metil)-3,5-dimetil-1H-pirazol (**L4**) foi realizada a partir da desprotonação do tiofenol de interesse, seguido da adição da espécie 1-(clorometil)-3,5-dimetil-1H-pirazol, obtendo-se os ligantes **L1**, **L3** e **L4** como óleos amarelo-claro com bons rendimentos (91%, 87% e 66% respectivamente). Todos os ligantes foram caracterizados por RMN ¹H e RMN ¹³C, e Análise Elementar para o **L1**. Os complexos foram obtidos através da reação de um equivalente do aduto de Pd(II), Li₂[PdCl₄] ou (COD)PdMeCl, com um equivalente do respectivo ligante em THF. **PdCl₂(L1)** e **PdMeCl(L1)** foram caracterizadas por RMN ¹H, ESI-HRMS e Análise Elementar. A síntese do ligante 3,5-dimetil-1-((fenilselenil)metil)-1H-pirazol (**L2**) foi realizada através da redução do disseleneto de difenila com NaBH₄ e posterior adição do 1-(clorometil)-3,5-dimetil-1H-pirazol. O ligante **L2** foi obtido como um óleo amarelo claro com ótimo rendimento (82%). **PdCl₂(L2)** e **PdMeCl(L2)** foram obtidos através da reação de um equivalente do aduto Li₂[PdCl₄] ou (COD)PdMeCl com um equivalente do ligante em THF. Tais complexos foram caracterizados por RMN ¹H e ESI-HRMS, e Análise Elementar para **PdMeCl(L2)**. Durante o desenvolvimento deste trabalho dois novos ligantes bidentados (**L3** e **L4**) e quatro novos complexos de Paládio(II) (**PdCl₂(L1)**, **PdMeCl(L1)**, **PdCl₂(L2)** e **PdMeCl(L2)**) foram sintetizados e caracterizados. As próximas etapas deste estudo incluem a utilização de outras técnicas analíticas para a total caracterização de todos os ligantes e complexos obtidos, a complexação dos ligantes **L3** e **L4** com os adutos de Paládio(II) e a avaliação da atividade destes sistemas catalíticos frente a reações de oligomerização do etileno, caracterizando os principais produtos obtidos nesta reação.