



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	Síntese de catalisadores de cromo(III) contendo ligantes tridentados aplicados à produção de alfa-olefinas
Autor	FABIO QUINTO MARSIAJ
Orientador	ADRIANA CURI AIUB CASAGRANDE

Síntese de catalisadores de cromo(III) contendo ligantes tridentados aplicados à produção de alfa-olefinas

Autor: Fábio Quinto Marsiaj; Orientador: Adriana Curi Aiub Casagrande; Instituição: UFRGS

As alfa-olefinas lineares (LAOS) são fabricadas através da reação de oligomerização. O crescimento da demanda e rentabilidade da fração leve de LAOS (1-buteno, 1-hexeno e 1-octeno) contra as frações mais pesadas tem estimulado significativamente as pesquisas acadêmicas e industriais para o desenvolvimento de catalisadores voltados para a tri/tetramerização seletiva do etileno. Entre os elementos que demonstram comportamento catalítico para a oligomerização do etileno/polimerização, o cromo tem uma posição única, uma vez que proporciona a formação de sistemas catalíticos para tri- e tetramerização seletiva do etileno comercialmente viáveis. Recentemente vários complexos de cromo baseados em ligantes não-Cp, como catalisadores homogêneos têm sido relatados na literatura. Entre estes, complexos neutros de cromo (III) do tipo $LCrCl_3$, os quais contêm ligantes nitrogenados tridentados (L) tendo diferentes combinações de átomos doadores, tais como: N,N,N; N,S,N; N,O,N; N,N,O e C,N,C com diferentes arranjos geométricos tem atraído atenção particular. Demonstrou-se que a estrutura e configuração do ligante exerce grande controle sobre a atividade do catalisador e seletividade.

Levando em consideração os aspectos abordados acima, o objetivo deste trabalho é a produção de alfa-olefinas leves (principalmente alfa-olefinas na faixa de C_6 a C_{10}) através do uso de catalisadores de cromo contendo ligantes nitrogenados tridentados. Para a obtenção destes catalisadores, inicialmente é feita a síntese do ligante tridentado e posteriormente a reação do ligante com o aduto $Cr(THF)_3Cl_3$. Os ligantes foram preparados a partir da reação (3,5-dimetilpirazol)methanol com diferentes aminas. A reação do (3,5-dimetilpirazol)methanol ($7,92 \times 10^{-3}$ mol) com a (2-aminometil)piridina ($3,96 \times 10^{-3}$ mol) foi realizada utilizando acetonitrila como solvente, temperatura de $30^\circ C$ e agitação durante 5 dias. Posteriormente, o solvente foi removido sob vácuo. O óleo resultante foi solubilizado em éter e depois foram feitas extrações com água (3×15 mL). A fase orgânica foi separada, o solvente foi removido, e obteve-se o ligante **L1** como um óleo amarelo claro. O mesmo procedimento foi adotado para a reação do (3,5-dimetilpirazol)methanol com a dimetiletilenodiamina para a obtenção do ligante **L2**. Os ligantes obtidos foram caracterizados por RMN^1H . Posteriormente foram feitas as reações do $Cr(THF)_3Cl_3$ utilizando os ligantes **L1** e **L2**, respectivamente. As mesmas foram realizadas utilizando tetrahidrofurano (THF) como solvente, à temperatura ambiente e agitação durante 24h. Após este período, o solvente foi removido sob vácuo, e o sólido obtido foi lavado com éter (3×10 mL), resultando nos complexos $[CrCl_3L1]$ e $[CrCl_3L2]$.

A próxima etapa do trabalho será testar os catalisadores $[CrCl_3L1]$ e $[CrCl_3L2]$ nas reações de oligomerização com etileno. As mesmas serão realizadas em um reator Parr 4843 de 100 mL utilizando 10 μ mol de catalisador, tolueno como solvente, temperatura de $80^\circ C$, MAO como cocatalisador (razão Al/Cr = 300), 20 bar e 15 min de reação. Os produtos serão analisados quantitativamente por cromatografia gasosa (CG), utilizando cicloexano como padrão interno. Posteriormente serão sintetizados outros ligantes, para a obtenção de diferentes catalisadores para a produção de alfa-olefinas.