



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	Oligomerização de Propeno por Complexo Tridentado de Cobalto
Autor	ANNA PAULA RODRIGUES EHLERT
Orientador	MICHELE OBERSON DE SOUZA

OLIGOMERIZAÇÃO DE PROPENO POR COMPLEXO TRIDENTADO DE COBALTO

Autor: Anna Paula Rodrigues Ehlert

Orientadora: Prof. Michèle Oberson de Souza

Instituição: Instituto de Química - Universidade Federal Do Rio Grande Do Sul

As reações de oligomerização de olefinas leves são de interesse industrial, pois os oligômeros obtidos são intermediários empregados na síntese de aditivos para gasolina, polímeros, detergentes, entre outros. As α -olefinas lineares e em particular o hexeno-1 (trímero de eteno ou dímero de propeno), são de especial interesse devido à sua maior reatividade e por serem co-mônômeros em processos de produção de polímeros especiais. O propeno, sendo uma molécula assimétrica possibilita a formação de uma larga gama de isômeros. Assim, encontrar um sistema catalítico seletivo para a obtenção de α -olefinas lineares terminais, como o hexeno-1, a partir do propeno se torna um desafio maior.

Estudou-se a reação de oligomerização do propeno catalisada por complexos de cobalto tridentados tendo em vista os resultados promissores obtidos no caso da dimerização do eteno. Empregou-se dois complexos precursores catalíticos, os dicloretos de 2,6-bis[1-(fenilimina)etil]piridina (**C1**) e de 2,6-bis[1-(2-trifluormetil-4-fluorfenilimina)etil]piridina (**C2**) de cobalto. Esses foram sintetizados através da reação direta com CoCl_2 com os ligantes 2,6-bis[1-(fenilimina)etil]piridina e o 2,6-bis[1-(2-trifluormetil-4-fluorfenilimina)etil]piridina respectivamente utilizando THF como solvente sob agitação durante 24h. As estruturas cristalográficas dos complexos de cobalto foram obtidas a partir da obtenção dos cristais, sendo a do complexo **C2** inédita.

As reações catalíticas foram executadas em um reator PARR de aço inoxidável de 450 mL, utilizando MAO como co-catalisador, nas temperaturas 10 °C, 30 °C e 50 °C com relações $[\text{Al}]/[\text{Co}]=600$, $[\text{Al}]/[\text{Co}]=300$ e $[\text{Al}]/[\text{Co}]=100$. Os produtos de oligomerização foram caracterizados por cromatografia gasosa empregando o isoctano como padrão interno e aplicando o método de co-injeção.

Os melhores resultados com o precursor **C1** foram obtidos a 10°C e uma relação $[\text{Al}]/[\text{Co}]=100$. Nessas condições obteve-se uma atividade de 135 h^{-1} e uma seletividade de 100% em hexenos lineares sendo 18% em hexeno-1. Verificou-se que tanto o aumento da temperatura quanto o aumento da relação $[\text{Al}]/[\text{Co}]$ levou à desativação do sistema.

Com o precursor **C2**, a reação conduzida a 10°C com $[\text{Al}]/[\text{Co}]=100$, levou a formação de 100% de hexenos lineares cujos 69% foram hexenos-1 e com uma atividade 1.510 h^{-1} , mais de 10 vezes maior quando comparada à de **C1**. O aumento da relação $[\text{Al}]/[\text{Co}]$ para 300 aumentou mais ainda a atividade desse complexo (47.292 h^{-1}), mas ao detrimento da seletividade em hexeno-1 (59 %) para 100% de seletividade em hexenos lineares. O Complexo **C2** mostrou-se igualmente sensível ao aumento da temperatura que provocou a sua desativação.

Esses resultados mostram o grande potencial dos complexos de cobalto com ligantes tridentados para a oligomerização do propeno. A comparação dos resultados obtidos com **C1** e **C2** evidencia o efeito benéfico das funções fluoradas presentes nos ligantes para a obtenção de altas atividades catalíticas e a alta seletividade em hexeno-1.