



## 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>	Síntese de novos ligantes bidentados N,N-imina e N,N-xanteno-pirazol com aplicação na reação de acoplamento Suzuki catalisada por paládio
<b>Autor</b>	RENIEIDY FLAVIA CLEMENTE DIAS
<b>Orientador</b>	ADRIANO LISBOA MONTEIRO

## RESUMO

**Título: Síntese de novos ligantes bidentados N,N-imina e N,N-xanteno-pirazol com aplicação na reação de acoplamento Suzuki catalisada por paládio**

Autor: R. Flávia Clemente Dias

Orientador: Dr. Adriano Lisboa Monteiro

O emprego do paládio como catalisador tornou possível a formação seletiva de ligações C-C e C-heteroátomo em reações de acoplamentos cruzados, tornando tais acoplamentos uma ferramenta química poderosa e demonstrando ser este um processo catalítico de alto potencial científico e tecnológico. Uma das razões para o destaque alcançado por essas reações ao longo das últimas décadas foi a sua grande capacidade de aplicação em processos industriais, com destaque aqui para a indústria farmacêutica.

Na maioria dos casos, ligantes auxiliares, especialmente fosfinas, são utilizados para estabilizar o catalisador e modular a seletividade. A proposta do projeto compreende, inicialmente, a síntese de 4 ligantes nitrogenados, que não estão descritos na literatura. Os ligantes foram caracterizados por ressonância magnética nuclear (RMN  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ) e infravermelho (IV) e cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS). A estrutura cristalina para um deles foi obtida por difração de raios X de monocristal (DRX). Após sintetizar e caracterizar esses compostos, a sequência do trabalho foi avaliar o efeito desses compostos como ligantes em conjunto com complexos de paládio na reação de acoplamento cruzado Suzuki.

O sistema catalítico à base destes ligantes na presença de paládio, foi capaz de promover a formação de bifenilas à temperatura de 50°C e tempo reacional 1h, empregando KOH como base. Este sistema mostrou mais eficiência com o ligante **2** (1,1'-(2,7-di-tert-butil-9,9-dimetil-9H-xanteno-4,5-diil)bis(1H-pirazol), que apresentou conversão média de 90%, e rendimento médio 74%. Nas mesmas condições, mas sem ligante auxiliar, paládio metálico é formado e a reação não se mostrou reprodutível, quando a conversão é alta, o produto de redução é o produto principal, evidenciando o papel de estabilização do complexo para o ligante **2**.

Palavras chaves: ligante imina; ligante xanteno-pirazol; acoplamento Suzuki.

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL**

**Porto Alegre, 2016.**