



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Formação de 1,3-Diinos Catalisada por Ouro Suportado em Sílica Mesoporosa Modificada
Autor	MAURICIO BERNARDES CLOSS
Orientador	PAULO HENRIQUE SCHNEIDER

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

FORMAÇÃO DE 1,3-DIINOS CATALISADA POR OURO SUPORTADO EM SÍLICA MESOPOROSA MODIFICADA

Maurício Bernardes Closs
Orientador: Paulo Henrique Schneider

Diinos conjugados são de grande importância como blocos de construção de moléculas maiores na indústria química, farmacêutica e de materiais, devido a sua cadeia carbônica altamente insaturada, que confere diversas e fascinantes propriedades reacionais. Diinos conjugados são também considerados uma das estruturas orgânicas mais facilmente manejáveis, devido ao fato de possuírem uma estrutura com alta rigidez, tornando-os facilmente cristalizáveis e, por consequência, facilmente purificáveis; além de serem termicamente estáveis, podendo ser guardados por anos sem se decomporem. A síntese de 1,3-diinos é feita principalmente através de reações de acoplamento de alcinos terminais, iguais (homoacoplamento) ou não (acoplamento cruzado).

Desde muito cedo, alcinos vêm sendo reportados como excelentes substratos para catálise com ouro, em reações de homoacoplamento e acoplamento cruzado, na presença de oxidantes; e o ouro, por sua vez, vem emergindo nos últimos anos como um poderoso catalisador em síntese orgânica, devido ao alto potencial redox do par Au(I)/Au(III), que evita mudanças indesejadas do estado de oxidação do metal ao longo do ciclo catalítico.

O trabalho aqui reportado tem objetivo de testar um precursor catalítico de ouro suportado em sílica mesoporosa. O material, sintetizado por outro grupo de pesquisa em parceria com o nosso, foi modificado com silsesquioxano iônico. Este material foi testado em reações de homoacoplamento e acoplamento cruzado, visando otimizá-las, testar a reciclabilidade do material e sua reatividade em diferentes alcinos terminais.

O material de ouro foi identificado como XDbAuCl₄; de posse deste, primeiramente buscou-se otimizar suas condições reacionais na reação de homoacoplamento do fenilacetileno em fase heterogênea. As condições que se mostraram mais adequadas foram: 1 mol% do precursor catalítico; 0,4 equivalentes de 1,10-fenantrolina como ligante; 1,0 equivalente de diacetato de iodobenzeno como oxidante; diclorometano como solvente; e temperatura de 70 °C. Em seguida, testou-se a reciclabilidade do material, em cinco reações consecutivas de homoacoplamento do fenilacetileno, onde a cada ciclo, o material utilizado na reação anterior era recuperado e aplicado na seguinte. O rendimento nos três primeiros ciclos foi excelente, mas caiu bastante no quarto, chegando por fim a menos de 20% no quinto.

Então, partiu-se para os testes de homoacoplamento e acoplamento cruzado de diferentes alcinos, com substituintes alifáticos e aromáticos, utilizando as condições reacionais otimizadas anteriormente. Os alcinos com substituintes alifáticos e aromáticos sofreram homoacoplamento com rendimentos de bons a excelentes, sendo os maiores de fenilacetilenos com grupos doadores de elétrons. Os dois testes de acoplamento cruzado realizados obtiveram sucesso, mas em rendimentos mais baixos.

O trabalho tem como perspectivas prosseguir estudando o precursor catalítico de ouro XDbAuCl₄, em reações com os 1,3-diinos sintetizados; portanto, está buscando-se encontrar reações com 1,3-diinos como substrato, que envolvam sistemas catalíticos de ouro.