



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Catalisadores de níquel(II) contendo ligantes calcogeno sulfonato com aplicação na oligomerização do etileno
Autor	MIRIA TERRA DA COSTA
Orientador	RAFAEL STIELER

Catalisadores de níquel(II) contendo ligantes calcogeno sulfonato com aplicação na oligomerização do etileno.

Autora: Miriã Terra

Orientador: Rafael Stieler

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Vários processos industriais visando à produção de α -olefinas, a partir do etileno, têm sido amplamente empregados, como objetivo de transformar olefinas de baixo valor comercial em olefinas de alto valor agregado. Estas α -olefinas são amplamente utilizadas como intermediários na obtenção de uma série de produtos como detergentes (α -C₁₂-C₂₀), lubrificantes e óleos sintéticos (α -C₈-C₁₀), plastificantes (α -C₆-C₁₀) e como comonômeros para a produção de polietileno linear de baixa densidade (PELBD) (α -C₄-C₈). Portanto, neste trabalho foi realizado a síntese e a caracterização de complexos de Ni(II) contendo ligantes bidentados calcogeno sulfonato (**32** e **34**) e aplicação destes em reações de oligomerização do etileno. Para a síntese dos pré-catalisadores de níquel(II), reagiu-se 1,0 equivalente dos pré-ligantes **22** e **31** com 1,0 equivalente de Ni(DME)Cl₂ em DCM a temperatura ambiente por 2 horas. Depois foi adicionado 1,0 equivalente de piridina deixando a mistura reacional sob agitação por 24 horas. Obteve-se, então, dois novos complexos (**32** e **34**) de fórmula geral [NiCl₂(Se[^]O ou S[^]O)], como sólidos esverdeados e rendimentos de 62-78%. Os mesmos foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho (IV), espectrometria de massas de alta resolução com ionização por eletrospray (ESI-HRMS), espectrometria de massas de alta resolução com ionização química a pressão atmosférica (APCI-HRMS) e análise elementar (**34**). Para corroborar com a estrutura proposta para esta classe de complexos, cálculos teóricos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foram realizados para um dos compostos (**32**). A variação do átomo de calcogênio na estrutura dos complexos demonstrou uma significativa influência sobre a atividade e seletividade dos sistemas estudados. Em condições otimizadas ([Al/Ni] = 600, T = 30 °C, tempo = 20 min, 20 bar de etileno), após ativação com metilaluminoxano, o pré-catalisador **34** apresentou alta Frequência de Rotação ($72,3 \times 10^3$ (mol etileno) (mol Ni)⁻¹ (h)⁻¹), produzindo praticamente butenos (96,8%) com boa seletividade para 1-buteno (84,3%).