



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Avaliação da atividade catalítica de nanopartículas de paládio (NPPd) suportados em silsesquioxanos
Autor	JOANA DE CONTO ZANCHETTI
Orientador	HENRI STEPHAN SCHREKKER

Título do trabalho: Avaliação da atividade catalítica de nanopartículas de paládio (NPPd) suportados em silsesquioxanos

Autora: Joana de Conto Zanchetti

Orientador: Prof. Dr. Henri S. Schrekker

Introdução: O uso de nanopartículas na catálise é interessante e vantajoso, pelo fato de serem de fácil separação do produto, mesmo estando na mesma fase que o sistema e ainda assim terem uma grande reatividade por causa da sua grande área específica. Neste trabalho, foram usadas nanopartículas de paládio estabilizadas por silsesquioxanos iônicos, materiais híbridos a base de sílica que permitem suportar nanopartículas metálicas. O objetivo é a determinação da atividade catalítica desses sistemas e estudar a possibilidade de reuso.

Métodos: A reação Suzuki foi realizada com 4-bromotolueno (1 mmol), ácido fenilborônico (1 mmol), brometo de tetrabutilamônio (1 mmol), base (trietilamina/carbonato de potássio, 1 mmol), catalisador (4×10^{-4} mmol de Pd) e 6 mL de solvente (água/solventes orgânicos). A reação foi posta em banho de óleo a 110 °C por 4 h, com um condensador conectado ao balão. O produto final foi extraído com acetato de etila quente. A reação Heck foi realizada com iodobenzeno (1 mmol), 3-buten-2-ona (1,5 mmol), trietilamina (2 mmol), catalisador (4×10^{-4} mmol Pd) e 6 mL de solvente (dimetilformamida, DMF). A reação foi posta em banho de óleo a 130 °C por 4 h, com um condensador conectado ao balão. O produto foi extraído com acetato de etila quente/éter dietílico. A reação de hidrogenação foi realizada com trans-cinamaldeído (2,5 mmol), catalisador ($2,5 \times 10^{-4}$ mmol de Pd) e 1 mL de tetrahidrofurano. A reação foi realizada em um reator a 40 bar de pressão de H₂ e sob agitação em um banho de óleo a 60 °C por 24 h.

Resultados: Nas reações realizadas, foram utilizados dois catalisadores: o catalisador 1, no qual a concentração de nanopartículas de Pd(0) foi de 8×10^{-3} mmol.g⁻¹, enquanto no catalisador 2 a concentração foi de 0,016 mmol.g⁻¹. As análises dos produtos das reações catalíticas foram feitas em cromatografia gasosa. Os experimentos mostraram conversões da reação de acoplamento C-C de Suzuki em água de até 99%, e que o catalisador é o responsável pela formação do produto, pois sem ele não há conversão. O sistema catalítico, NPPd/silsesquioxano/fase aquosa, foi reusado até três vezes. No último ciclo a atividade catalítica diminuiu drasticamente com conversões de 11 e 4 % para os catalisadores 1 e 2 respectivamente; sendo que o catalisador 2 foi o menos ativo em todos os ciclos. Pela sua alta solubilidade em água, o silsesquioxano torna o catalisador irrecuperável em água, e por isso, as reações foram testadas em DMF, usando a trietilamina como base. Com isso, o catalisador pode ser recuperado a partir de centrifugação, mas não foi ativo. Nas reações de acoplamento C-C de Heck feitas em água, não foi possível determinar a conversão, pois o produto fica retido na fase aquosa. A reação feita em DMF resultou em uma conversão de 80%, o catalisador foi reusado (50% foi recuperado), e a atividade catalítica foi mantida. Os catalisadores também foram ativos nas reações de hidrogenação, sendo possível o reuso do catalisador.