

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC
**UFRGS**
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2017 |
| Local | Campus do Vale |
| Título | Atividade Catalítica de ligantes pirazol-dba em Reações Heck |
| Autor | VITÓRIA SILVA GARCIA |
| Orientador | ADRIANO LISBOA MONTEIRO |

Atividade Catalítica de ligantes pirazol-dba em Reações Heck

Vitória Silva Garcia, Adriano Lisboa Monteiro

Instituto de Química – LAMOCA - UFRGS

Reações de acoplamento catalisadas por paládio compreendem um dos métodos mais eficazes para a construção de ligações carbono-carbono.¹ A capacidade impressionante do paládio para montar ligações C-C entre os substratos, apropriadamente funcionalizados, permitiu químicos orgânicos sintéticos executarem transformações que eram anteriormente abordagens impossíveis ou só possível através de várias etapas. Portanto, estas metodologias de acoplamento cruzado têm revolucionado a maneira de pensar sobre química orgânica sintética, tendo encontrado uso generalizado em síntese orgânica e ciência dos materiais, desempenhando um papel importante na indústria farmacêutica, agroquímica e indústrias na química fina.²

Os estudos das reações de acoplamento C-C têm tradicionalmente focado no desenho e otimização de ligantes que são adicionados *in situ* em vários precursores de Pd⁰ e Pd^{II}.³ As fosfinas são ligantes largamente utilizadas em reações de acoplamento com o intuito de auxiliar a atividade catalítica devido seu papel fundamental na estabilidade do paládio nas reações desempenhando uma atividade catalítica muito eficiente. Contudo, a utilização de fosfinas torna a síntese mais suja e problemática experimentalmente. Com isso, a tentativa de substituir o uso das fosfinas por outro ligante é um grande desafio para tornar a síntese mais branda, efetiva e simples experimentalmente.

Na tentativa de substituir as fosfinas, o uso de ligantes a base de nitrogênio vêm sido usado. Sabendo da interação da molécula de pirazol com o paládio⁴, e da interação do ligante dba com o paládio⁵, o objetivo do trabalho é utilizar novos ligantes pirazol-dba e avaliá-los em reações Heck. Dentro da filosofia de desenvolvimento de processos mais simples e limpos, espera-se obter catalisadores mais ativos, simples e que não necessitam o uso de fosfinas como ligantes auxiliares.

A metodologia utilizada para avaliação dos ligantes foi realizada um schlenck sob atmosfera inerte em que foram adicionados os reagentes Iodobenzeno (2mmol, 222 microlitros), Acrilato de butila (2.8 mmol, 400 microlitros) e diversos sistemas catalíticos de Pd⁰ e Pd^{II} e ligante (0.5 mol%). A reação manteve-se sob agitação constante por 15 min a 50°C. Após 15 min, retirou-se uma alíquota da mistura reacional e analisada. Os rendimentos variaram entre 17-40% que foram avaliados por GC e GC-MS. Foi utilizado difeniléter como padrão interno no GC para avaliar as conversões e rendimentos das reações.

¹ Miyaura, N.; Suzuki, A.; Chem. Rev. **1995**, *95*, 2457.

² Magano, J.; Dunetz, J. R.; Chem. Rev. **2011**, *111*, 2177.

³ A. F. Littke, G. C. Fu, Angew. Chem. **2002**, *114*, 4350 – 4386;

⁴ Trofimenko, S.; Chem. Rev., **1972**, *72*, 5

⁵ Kapdi, A.R.; Whitwood, A.C.; Williamson, D.C.; Lynam, J.M.; Burns, M.J.; Williams, T.J.; Reay, A.J.; Holmes, J.; Fairlamb, I.; J. Am. Chem. Soc., **2013**, *135*, 8388.