



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	CATALISADORES DE CROMO(III) CONTENDO LIGANTES TRIDENTADOS BIS(ARILSELENIL)AMINA SELETIVOS PARA A POLIMERIZAÇÃO DO ETILENO
Autor	GABRIEL LUIZ RASCH
Orientador	RAFAEL STIELER

CATALISADORES DE CROMO(III) CONTENDO LIGANTES TRIDENTADOS *BIS*(ARILSELENIL)AMINA SELETIVOS PARA A POLIMERIZAÇÃO DO ETILENO

Autor: Gabriel Luiz Rasch

Orientador: Rafael Stieler

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Processos de polimerização e oligomerização de olefinas representam uma das principais atividades da indústria química, movimentando bilhões de dólares em todo o mundo. Além disto, a área de polímeros é o ramo da indústria química que mais ascende no mundo atualmente. Neste sentido, esses processos têm crescido ao longo dos últimos anos, buscando o preparo de novos sistemas catalíticos para a síntese controlada de diversos materiais poliolefinicos. Portanto, este trabalho visa a síntese, caracterização e aplicação de novos catalisadores de Cr(III) contendo ligantes *bis*(arilselenil)amina e feniltionil-pirazol em reações de oligo- e/ou polimerização de etileno. A síntese dos ligantes *bis*(2-mesitilseleniletil)amina (**L1**) e *bis*(2-fenilseleniletil)amina (**L2**) foi realizada a partir da redução do disseleneto de diarila com NaBH₄, seguido da adição da espécie *bis*(2-cloroetil)amina. Após os procedimentos de extração e purificação em coluna cromatográfica de sílica gel, obteve-se os ligantes **L1** e **L2** como óleos amarelo-claro com ótimos rendimentos (76,5% e 82,3%, respectivamente). Ambos ligantes foram caracterizados por RMN-¹H, RMN-¹³C e análise elementar. Os complexos foram obtidos através da reação de um equivalente do aduto CrCl₃(THF)₃ com um equivalente do respectivo ligante em THF. Tais complexos foram caracterizadas por IV e análise elementar, não podendo ser analisados por RMN-¹H e RMN-¹³C devido às suas naturezas paramagnéticas. Um estudo inicial relacionado ao comportamento catalítico destes complexos de Cr(III) em reações de oligo- e/ou polimerização do etileno foi investigado em tolueno a 80 °C, MAO como cocatalisador e utilizando 10 µmol do complexo. Os sistemas catalíticos **Cr1** e **Cr2** se demonstraram seletivos para a produção de polietilenos, com atividades de 30,7 e 26,1 (Kg)·(mol Cr)⁻¹·(h)⁻¹, respectivamente. As propriedades térmicas do produto obtido pelo sistema **Cr1**/MAO foram avaliadas através de calorimetria diferencial de varredura (DSC), obtendo-se uma temperatura de fusão de 131,3 °C. Esta temperatura de fusão evidencia a formação de um polímero de alta densidade. O ligante feniltionil-pirazol (**L3**) foi obtido através da reação do clorometil-pirazol com tiofenol em THF. Após extração e purificação em coluna cromatográfica de sílica gel, o ligante **L3** foi obtido como óleo incolor em ótimo rendimento (82%), caracterizado por RMN-¹H e RMN-¹³C e análise elementar. O respectivo complexo de cromo (**Cr3**) foi obtido através da reação de um equivalente do aduto CrCl₃(THF)₃ com um equivalente do ligante em THF e analisado por IV, não podendo ser analisado por RMN-¹H e RMN-¹³C devido à sua natureza paramagnética. Um estudo do comportamento catalítico deste complexo em reações de oligo- e/ou polimerização do etileno foi investigado em tolueno a 80 °C, MAO como cocatalisador e utilizando 10 µmol de complexo. O sistema catalítico **Cr3**/MAO mostrou-se ativo para reações de oligomerização do etileno, com atividade de 11,8 (Kg)·(mol Cr)⁻¹·(h)⁻¹ e traços de oligômeros. As duas classes de catalisadores apresentadas neste trabalho mostraram-se ativas em reações de polimerização de etileno. Embora tenham apresentado baixas atividades nas condições estudadas, estudos adicionais serão efetuados com o objetivo de aumentar a atividade destes sistemas catalíticos.