



UNIVERSIDADE
E COMUNIDADE
EM CONEXÃO



XIII FINOVA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: FEIRA DE INOVAÇÃO TECNOLÓGICA DA UFRGS - FINOVA
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Catalisadores de ferro(II) contendo ligantes bis(pirazolil)fenantrolina aplicados à redução fotocatalítica do CO ₂ para produção de CO
Autor	GABRIELA DE LIMA UEZ
Orientador	OSVALDO DE LAZARO CASAGRANDE JUNIOR

RESUMO

TÍTULO DO PROJETO: CATALISADORES DE FERRO(II) CONTENDO LIGANTES BIS(PIRAZOLIL)FENANTROLINA APLICADOS À REDUÇÃO FOTOCATALÍTICA DO CO₂ PARA PRODUÇÃO DE CO.

Aluno: Gabriela de Lima Uez

Orientador: Osvaldo de Lazaro Casagrande Junior

RESUMO DAS ATIVIDADES DESENVOLVIDAS PELO BOLSISTA

Durante o período da bolsa de IT, foram sintetizados e caracterizados três novos complexos de ferro(II) contendo ligantes bis(pirazolil)fenantrolina os quais serão utilizados na redução fotocatalítica do CO₂ e transformá-lo em produtos de valor agregado. Os ligantes bis(pirazolil)fenantrolina (^{R¹R²}P₂Phen) (**L1-L3**) (**L1**: R¹= R² =H, **L2**: R¹= R² =Me, **L3**: R¹= Ph, R² =H) foram sintetizados por substituição nucleofílica aromática (S_NAr), onde os grupos pirazol substituíram os átomos de bromo na fenantrolina, empregando dioxano como solvente. Os ligantes foram caracterizados por análise elementar (CHN), espectroscopia na região do infravermelho (IV) e ressonância magnética nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C. A reação de **L1-L3** com um equivalente de Fe(ClO₄)₂·6H₂O em acetonitrila por 24h à 25°C resultou na formação dos complexos [FeL(H₂O)₂](ClO₄)₂ (**Fe1-Fe3**) como sólidos laranja e em bons rendimentos (67-70%) A identidade destes complexos foi estabelecida por análise elementar (CHN), espectroscopia na região do infravermelho (IV) e espectroscopia UV-vis. Os resultados de análise elementar corroboraram a fórmula proposta [FeL(H₂O)₂](ClO₄)₂, destacando a coordenação de duas moléculas de água ao centro metálico. Os espectros IV mostraram bandas características dos ligantes, indicando a coordenação destes ao centro metálico. A espectroscopia ultravioleta-visível propiciou a determinação dos comprimentos de onda apropriados de dois dos complexos para as reações fotocatalíticas de redução do CO₂, eles exibiram bandas de absorção na faixa de 315nm a 345nm. Particularmente, a exposição do complexo **Fe1** ao ar promoveu a formação de espécies oxo-diméricas de Fe(III) [(Fe)₂(μ-O)(ClO₄)₄] (**Fe1A**) cuja a estrutura molecular mostrou o átomo de ferro em um ambiente bipiramidal pseudo-pentagonal com um átomo de oxigênio em ponte. A próxima etapa do projeto visa a utilização destes complexos em reações de redução fotocatalíticas do CO₂ visando a produção de CO.