

Guilherme Aydos, Crestina S. Consorti e Jairton Dupont  
 IQ-UFRGS, CEP 91501-970, Porto Alegre - RS – Brasil  
 e-mail: guilherme.aydos@bol.com.br

## Introdução

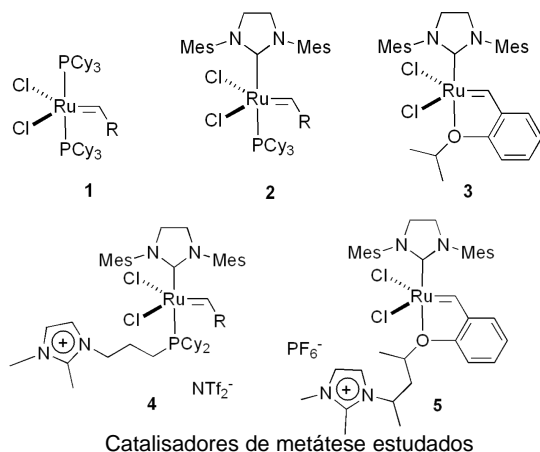
Estudos recentes mostram que reações concomitantes são uma importante alternativa para o aumento da eficiência de rotas de síntese.<sup>1-5</sup> Esses processos permitem a conversão de múltiplos substratos com benefícios econômicos e ambientais, devido significativas reduções nas etapas de separação e purificação dos produtos. A otimização destes sistemas está principalmente relacionada à criação de condições reacionais que minimizem a interferência entre os complexos catalíticos presentes. Uma possibilidade é a utilização de sistemas multifásicos em que cada catalisador reage preferencialmente em uma das fases distintas, como por exemplo, sistemas solvente orgânico/água, solvente perfluorado ou líquido iônico (LI).

## Objetivo

Desenvolver sistemas catalíticos homogêneos bifásicos utilizando líquidos iônicos para reações de isomerização/metátese de olefinas internas de cadeia curta a alcenos de maior massa molecular.

## Metodologia

A reação *tandem* de isomerização/metátese de *trans*-3-hexeno em meio bifásico tolueno/BM.PF<sub>6</sub> a 45 °C foi escolhida como ponto de partida para o trabalho. A performance do sistema foi estudada utilizando-se diferentes líquidos iônicos e complexos catalíticos.



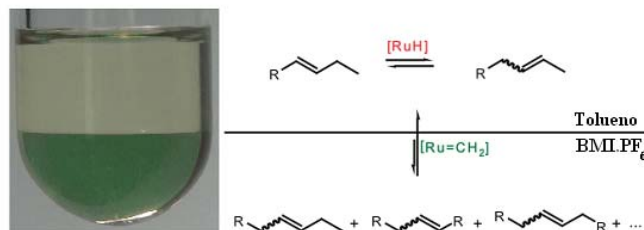
## Resultados e Discussão

Tabela 1. Otimização da isomerização<sup>a</sup>

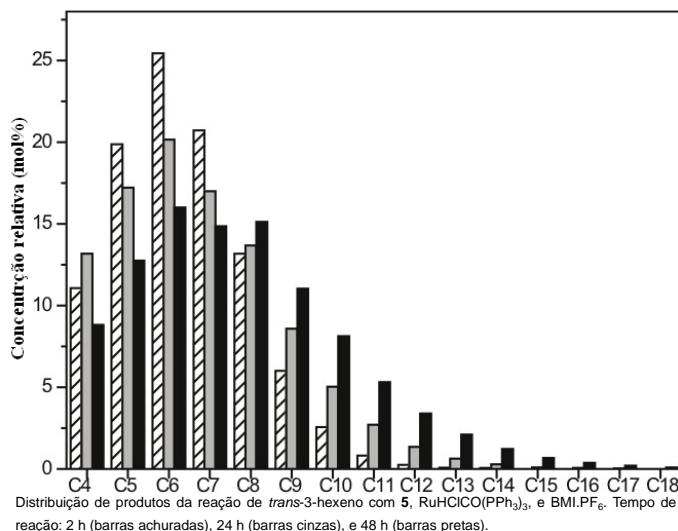
Complexo	Tempo (min)	Conversão <sup>b</sup>
RuHClCO(PPh) <sub>3</sub>	30	98%
RuHClCO(PCy <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	60	87%
PdCl <sub>2</sub> (NPh) <sub>2</sub>	60	90%
Ru <sub>3</sub> (CO) <sub>12</sub>	60	15%

a) condições reacionais: 1-hexeno (4,03 mmol), catalisador (0,02 mmol), 45 °C. b) CG

Evidências sobre o controle cinético exercido pela utilização de líquidos iônicos foram obtidas quando foi utilizado um líquido iônico que apresenta caráter mais apolar (DMI.PF<sub>6</sub>). Nesse caso, foi observado um percentual menor de olefinas de cadeias longas nos produtos.<sup>6</sup>



O sistema bifásico utilizando 5/RuHClCO(PPh)<sub>3</sub> mostrou-se ser o mais eficiente, com 80% do substrato convertido em uma mistura de olefinas C4-C17 e 49% olefinas superiores a C6.



## Conclusões e Perspectivas

O presente estudo prova a viabilidade dos sistemas catalíticos bifásicos para reações *tandem* de isomerização/metátese de olefinas. Foi demonstrado que as taxas das reações concomitantes podem ser moduladas se utilizarmos um catalisador de metátese que tenha alta afinidade pela fase iônica e um complexo isomerizador solúvel na fase orgânica. Outros estudos estão sendo realizados para aumentar a seletividade do sistema, desenvolver processos que permitam a remoção das olefinas de cadeia curta de maneira contínua e para utilizar frações de refinado II ou 2-butenos como substrato.

## Referências

- [1] L. F. Tietze, Chem. Rev., 1996, 96, 115-136.
- [2] J. Gavenonis, R. V. Arroyo and M. L. Snapper, Chem. Commun., 2010, 46, 5692-5694.
- [3] S. I. Lee, Y. Fukumoto and N. Chatani, Chem. Commun., 2010, 46, 3345-3347.
- [4] S. Q. Ye, X. D. Yang and J. E. Wu, Chem. Commun., 2010, 46, 2950-2952.
- [5] W. X. Zhao and J. L. Zhang, Chem. Commun., 2010, 46, 4384-4386.
- [6] Consorti C. S., Aydos G. L. P.; Dupont J., Chem. Commun., 2010, 46, 9058-9060

## Agradecimentos