

Desenvolvimento de uma nova metodologia sintética para o LI bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio



UFRGS
PROFESQ
CET - Ciências Exatas e da Terra

XXV SIC
Salão Iniciação Científica

1. Giovane Barbosa (IC), Engenharia Química, UFRGS
2. Prof. Dr. Jairton Dupont (PQ)
Laboratório de Catálise Molecular, Instituto de Química UFRGS

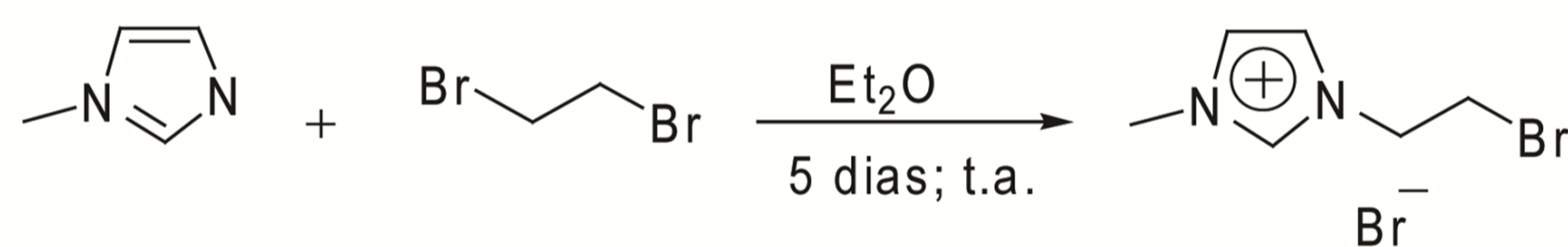
INTRODUÇÃO

- Líquidos iônicos (LIs) baseados nos cátions 1,3-dialquil-imidazólio são os mais investigados e utilizados por apresentarem propriedades físico-químicas singulares tais como: baixa pressão de vapor e excelente estabilidade térmica.
- Este trabalho visa o desenvolvimento de uma nova metodologia sintética do LI bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio e a análise da pureza obtida e do rendimento do processo e a produção de um catalisador de paládio utilizando esta molécula como ligante. Este catalisador será posteriormente testado frente a Reação de Heck.

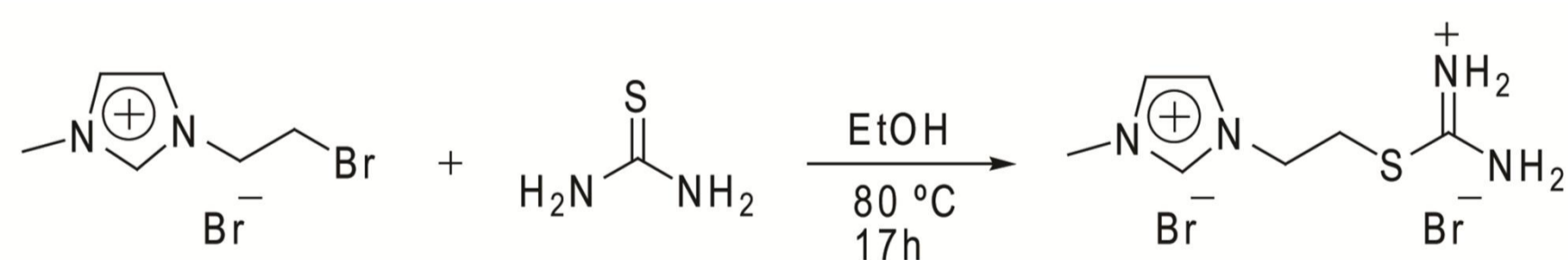
METODOLOGIA :

1. Síntese do bis-trifluorometilsulfonil imidato de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio:

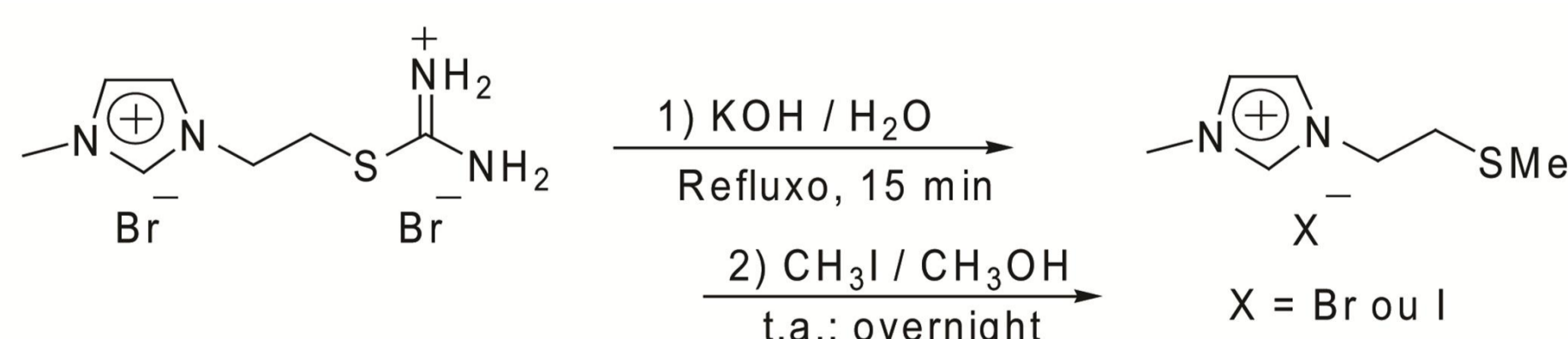
- O procedimento experimental inicia com a reação entre o 1-metilimidazol com excesso de dibromoetano para obtermos como produto o sólido branco brometo de 3-(2-bromoetil)-1-metilimidazólio que é separado por decantação.



- Em seguida é feita a reação de substituição nucleofílica com a tiourea em etanol a 80°C para formar o sal de isotiourônio. O produto (Figura 1) foi obtido em bom rendimento e separado por filtração em funil de Büchner.



- O produto obtido na segunda reação é então reagido com KOH em água a 80°C sob refluxo por 15min.
- Esta mistura é então resfriada e são adicionados 1,05eq de CH₃I e MeOH *in situ* a temperatura ambiente para obtermos o haleto de 1-metil-3-(2-metiltio-etil) imidazólio.



- É então realizada a evaporação do metanol em bomba de vácuo e posterior reação de simples troca do ânion haleto utilizando como reagente o bis(trifluorometanosulfonil imidato de lítio) sob agitação à temperatura ambiente (Figura 2).

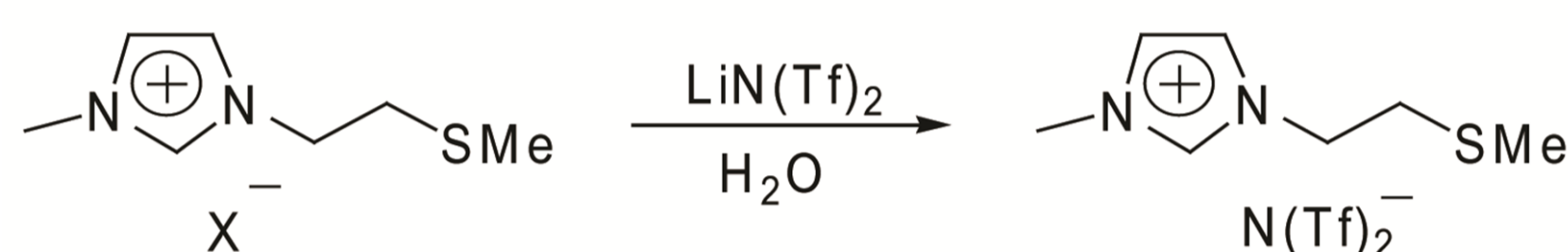


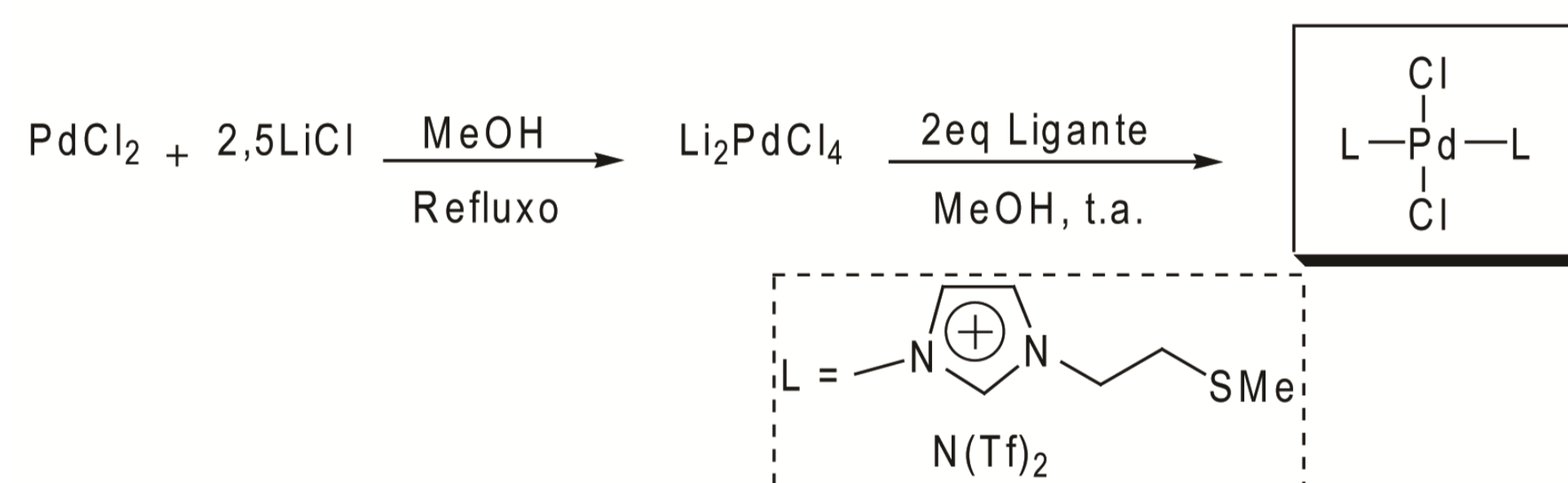
Figura 1.



Figura 2.

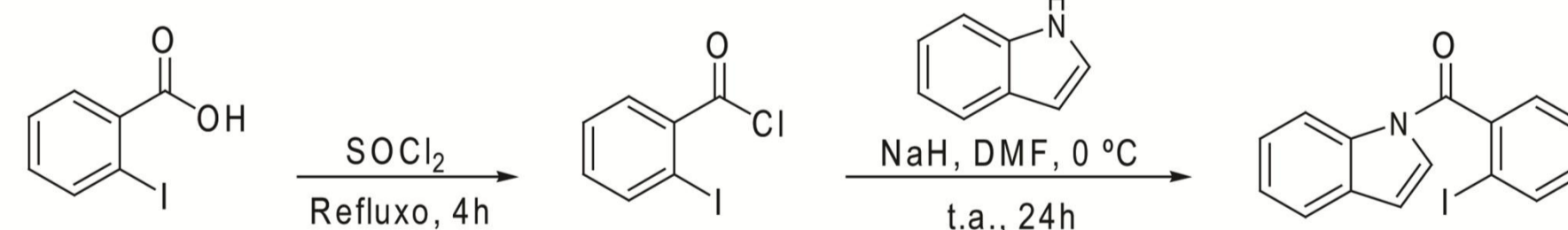
2. Síntese do complexo de paládio

- Na síntese do catalisador de paládio foram 2,5eq de cloreto de lítio e 2eq de Líquido Iônico para cada equivalente de cloreto de paládio. O produto obtido é um sólido marrom-avermelhado.



PERSPECTIVAS

Síntese do substrato para a Reação de Heck



- O catalisador de paládio será utilizado na Reação de Heck com o substrato obtido pela sequencia das etapas reacionais acima.

REFERÊNCIAS

1. L. D. Field; B. A. Messerle; K. Q. Vuong; Peter Turner *Organometallics* **2005**, *24*, 4241.
2. C. C. Cassol; G. Ebeling; B. Ferrera; J. Dupont *Adv. Synth. Catal.* **2006**, *348*, 243.