

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	CATALISADORES DE NÍQUEL (II) CONTENDO LIGANTES DO TIPO IMINA/FENOLATO SELETIVOS PARA A PRODUÇÃO DE α -OLEFINAS LINEARES
Autor	NORTON FAITÃO FARIAS
Orientador	OSVALDO DE LAZARO CASAGRANDE JUNIOR

CATALISADORES DE NÍQUEL (II) CONTENDO LIGANTES DO TIPO IMINA/FENOLATO SELETIVOS PARA A PRODUÇÃO DE α -OLEFINAS LINEARES

Autor: Norton Faitão Farias

Orientador: Osvaldo de Lázaro Casagrande Jr.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A oligomerização do etileno, visando a produção seletiva de α -olefinas lineares (AOLs), tais como buteno-1 (α -C₄), hexeno-1 (α -C₆) e octeno-1 (α -C₈), representa uma das mais importantes aplicações industriais da catálise homogênea em todo o mundo. As AOL são matérias primas de alto valor agregado para a indústria química e com grande demanda mundial. Neste contexto, este trabalho visou a síntese e caracterização de novos complexos de Ni^{II} contendo ligantes bidentados imina-fenolato e aplicação destes em processos de oligomerização do etileno. Os ligantes imina-fenolato (**L1-L4**) foram sintetizados através da reação de condensação entre um aldeído de interesse com diferentes aminas em refluxo de etanol por 2 horas. Após isolamento e purificação, **L1-L4** foram obtidos como sólidos amarelos e marrons, os quais foram caracterizados por RMN ¹H, ¹³C, espectroscopia na região do infravermelho (IV) e espectrometria de massas de alta resolução com ionização por *electrospray* (ESI-HRMS). A reação de **L1-L4** com 1.0 equiv. de NiBr₂(DME), em THF por 24 horas à temperatura ambiente, resultou na formação de quatro novos complexos de Ni(II) (**Ni1-Ni4**), os quais foram isolados como sólidos amarelos e alaranjados com rendimento variando entre 52% e 92%. Estes complexos foram caracterizados por IV e ESI-HRMS. As análises de RMN ¹H não foram possíveis devido à natureza paramagnética destes complexos. Em condições reacionais padrões (tolueno, [Ni] = 10,0 ± 0,5 μ mol, P_{etileno} = 20 bar, t = 20 min, T = 30 °C, e MAO como cocatalisador [Al]/[Ni] = 300) **Ni1-Ni4** foram ativos na oligomerização do etileno com atividades variando de 9,9 até 18,9x 10³ (mol de etileno)/(mol Ni)·h com boa seletividade para produção de buteno-1(87,1-89,1 % em massa). Considerando os resultados preliminares, **Ni03** foi escolhido para a otimização das condições reacionais (variação da razão molar [Al]/[Ni], temperatura e tempo).O sistema catalítico **Ni3**/MAO apresentou aumento na atividade com o aumento na razão molar até [Al]/[Ni]= 500, chegando a um máximo de atividade de 28.2x 10³ (mol de etileno)/(mol Ni)·h. Estudo relacionado à variação do tempo reacional mostrou que este sistema catalítico necessita de um tempo de indução (t > 5 min) para o início da produção de oligômeros e que este sistema continua ativo após 40 min de reação. O aumento da temperatura de 30°C para 50°C, mostrou uma diminuição da atividade catalítica a qual esta relacionada a desativação gradual do catalisador. Sob condições reacionais otimizadas ([Ni] = 10 mol, tolueno, 30°C, tempo = 40 min, 20 bar de etileno, [Al/Ni] = 500) o sistema catalítico **Ni3**/MAO apresentou FR = 28,2 x 10³ (mol de etileno)/(mol Ni)·h com produção de C₄ (97,6%) e seletividade para 1-C₄ de 92,7%.