

Alquilação do tolueno com 1-deceno catalisada por complexo cobalto-beta-diimina em meio bifásico

Bruna Pes Nicola, Prof. Dr. Katia Bernardo Gusmão

Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, Laboratório de Reatividade e Catálise, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

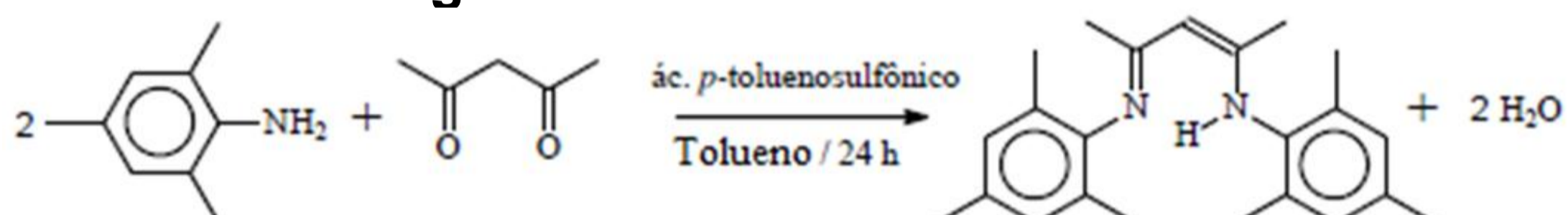
Introdução

As alquilações dos hidrocarbonetos aromáticos com 1-alcenos são aplicadas em larga escala na indústria química. A alquilação de tolueno com cadeias longas de 1-alcenos é uma técnica promissora para a produção dos alquiltoluenos lineares. Uma percentagem mais elevada de 2-fenilisômeros (monoalquilados) é desejada, pois apresentam melhores propriedades na obtenção dos componentes alquiltolueno sulfonados empregados em detergentes (biodegradabilidade e solubilidade). Para este processo, são usados catalisadores homogêneos, como AlCl_3 ou heterogêneos empregando zeólitas. O objetivo geral deste projeto é desenvolver um sistema catalítico bifásico ativo e seletivo para a alquilação do tolueno com 1-deceno, visando produtos de monoalquilação.



Metodologia

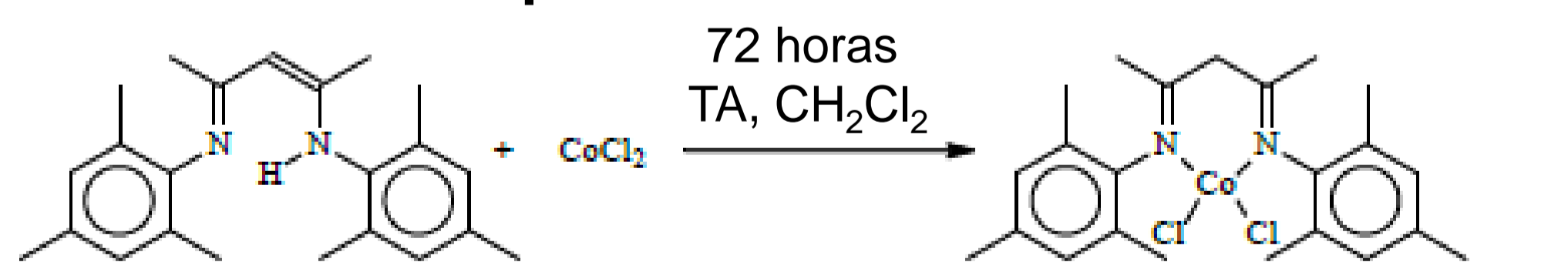
• Síntese do ligante



15,5 mL (110 mmol) 5,7 mL (55 mmol)

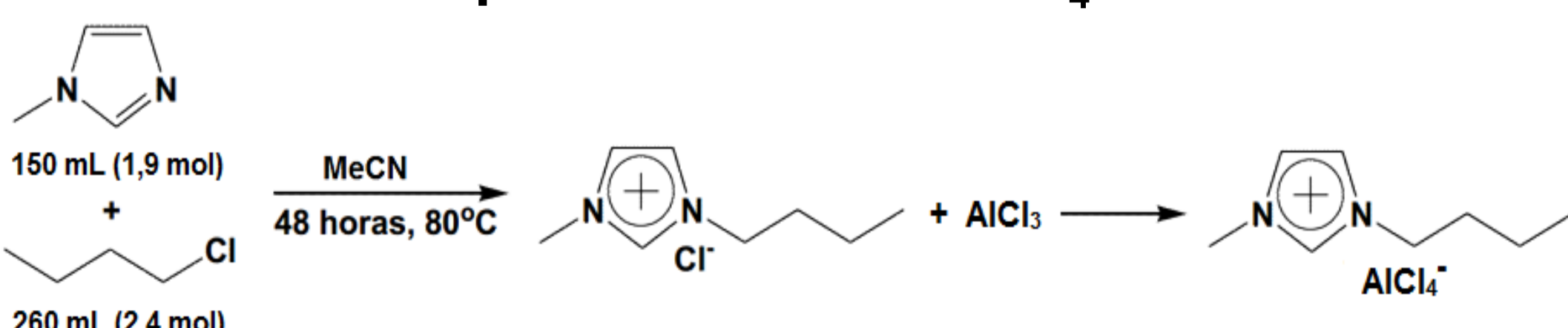
$m = 11,5859 \text{ g}$
 $n = 34,7 \text{ mmol}$
(massa molar = 334 g/mol)
Rendimento: 63%

• Síntese do complexo



0,6736 g (2 mmol) 0,2655 g (2 mmol) $m = 0,9014 \text{ g}$
 $n = 1,94 \text{ mmol}$
(massa molar = 463,83 g/mol)
Rendimento da Reação: 97%

• Síntese do líquido iônico BMI. AlCl_4



150 mL (1,9 mol) 260 mL (2,4 mol)

• Realização dos Testes Catalíticos

Os testes catalíticos de alquilação do tolueno com 1-deceno utilizando o complexo cobalto-beta-diimina foram realizados sob atmosfera de argônio. Foi utilizado reator de vidro com capacidade para 200 mL, controle de

Metodologia (continuação)

temperatura e agitação magnética. As condições reacionais escolhidas foram de 10, 25 e 50 μmol de catalisador, a 10°C, 30°C e 50°C, 10 mL de 1-deceno, 20 mL de tolueno, e cocatalisador EASC (sesquicloreto de etil alumínio) em reação de 30 minutos.

Resultados

• Caracterização do Ligante e do Complexo

Tabela 1: Dados de Infravermelho do ligante e do complexo

Ligante	Atribuições	Complexo
$\nu \text{ (cm}^{-1}\text{)}$		$\nu \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
2985	C-H de metilas	2970
2935		2929
2912	C-H aromáticos	2891
2846		2760
1618	C=C	1652
1546	C=N	1558
1473	N-H	-

• Caracterização dos produtos obtidos

Os produtos foram analisados quantitativamente por Cromatografia Gasosa, empregando um equipamento Varian 3400CX, com uma coluna Petrocol DH (polimetilsilicone) de 100 m, com temperatura do forno entre 36 e 250 °C, empregando isoctano como padrão interno e por espectrometria de massas.

• Resultados dos Testes Catalíticos

Tabela 2: Resultados das reações de alquilação

Rel. Al/Co (mol)	T (°C)	Conversão de 1-Deceno (%)	T.O.F. (h ⁻¹)	% Monoalquilação	% Dialquilação	% Trialquilação
2500	10	0,6	69	100	0	0
2500	30	6	885	58	31	11
2500	50	14	1591	61	30	9
1000	10	1	54,5	100	0	0
1000	30	46	2272	47	26	27
1000	50	99,6	5505	71	22	7
500	10	1	25,5	93	7	0
500	30	3	52	55	41	4
500	50	4,6	117	61	30	8
BRANCO	50	5,4	-	100	0	0

Conclusões

A partir da tabela 2, conclui-se que a relação Al/Co ótima para os testes catalíticos é igual a 1000, apresentando os maiores valores para conversão de alqueno e atividade do catalisador, iguais a 99,6% e 5505 h⁻¹, respectivamente. Além disso, os resultados apresentam melhoras a medida que a temperatura de reação é aumentada, de forma que os melhores resultados foram obtidos a 50°C para todas as razões Al/Co.

Agradecimentos

