

# Isomerização do 1-hexeno utilizando nanopartículas de paládio estabilizadas com surfactantes dipolares iônicos.

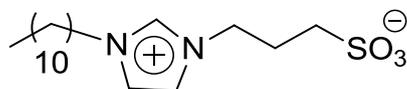
Elder C. Leopoldino (PG)\*, Elvis N. Nishida (IC), Bruno S. de Souza (PQ), Faruk Nome (PQ).  
\*elderleopoldino@hotmail.com

Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Química.

Palavras Chave: nanopartículas metálicas, isomerização, paládio, olefinas, surfactante.

## Introdução

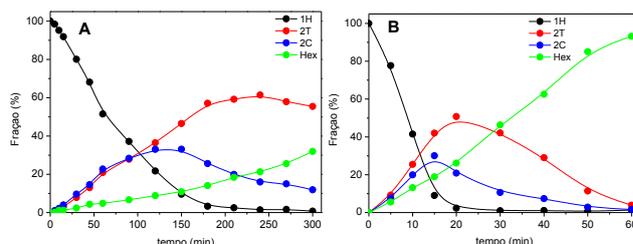
Olefinas possuem numerosas aplicações em síntese orgânica. Os processos industriais de produção dessas substâncias normalmente levam à obtenção de compostos contendo duplas terminais. Assim, diversas metodologias vem sendo empregadas para reposicionar uma ligação dupla pré-existente com controle da estereoquímica, permitindo, assim, a produção de diferentes alcenos úteis em síntese orgânica, além do aumento do índice de octana.<sup>1,2</sup> Este trabalho mostra a utilização de nanopartículas de paládio estabilizadas por um surfactante dipolar iônico derivado do imidazol propano sulfonato (**Figura 1**)<sup>3</sup> na conversão de 1-hexeno (**1H**) em seus isômeros *cis*- (**2C**) e *trans*-2-hexeno (**2T**) e compara os resultados obtidos com o catalisador comercial de Pd/C.



**Figura 1.** Estrutura do surfactante dipolar iônico 3-(1-dodecil-3-imidazólio)propanosulfonato (ImS3-12).

## Resultados e Discussão

Os testes catalíticos com **1H** foram realizados em um reator do tipo Fisher-Porter e a quantificação e identificação dos produtos por CG/MS com emprego de curvas padrão. Nas reações com as NPs de Pd/ImS3-12, empregaram-se 200  $\mu$ L da dispersão aquosa do catalisador<sup>3</sup> juntamente com 1800  $\mu$ L de água, enquanto que com Pd/C (5% Aldrich) foi utilizado apenas o catalisador. Em ambos os ensaios foram utilizados 12,2 mmol de **1H**, uma razão **1H**/Pd de 22000 e pré-ativações do catalisador por 1,0 h em atmosfera de H<sub>2</sub>. Os catalisadores Pd/ImS3-12 e Pd/C foram utilizados quatro vezes, com a remoção da fase orgânica entre as utilizações. As **Figuras 2A** e **2B** mostram os perfis cinéticos das reações de isomerização. A **Tabela 1** resume as porcentagens dos 4 usos de cada catalisador para o tempo onde a conversão no isômero **2T** é máxima.



**Figura 2.** Progresso da reação com (A) NPs de Pd/ImS3-12 e (B) Pd/C observando o consumo de 1H e formação de 2T, 2C e do produto de hidrogenação hexano (Hex).

**Tabela 1.** Isomerização/hidrogenação do 1H utilizando NPs Pd/ImS3-12 e Pd/C, mostrando os 4 usos dos catalisadores.

U s o	Pd/ImS3-12				Pd/C			
	Conversão (%) <sup>(a)</sup>				Conversão (%) <sup>(b)</sup>			
	1H	2T	2C	Hex	1H	2T	2C	Hex
1 <sup>o</sup>	1,4	61,4	15,9	21,2	2,3	50,8	20,8	26,1
2 <sup>o</sup>	1,6	55,0	18,8	24,6	2,4	49,3	18,1	30,2
3 <sup>o</sup>	8,4	43,3	15,7	32,6	2,1	46,5	23,6	27,8
4 <sup>o</sup>	13,4	35,6	14,6	36,3	17,9	34,1	26,9	21,1

(a) t=240 min; (b) t=20 min; P<sub>H<sub>2</sub></sub>=2bar, T=35 °C e 1500 rpm.

## Conclusões

Os resultados indicam que o catalisador Pd/ImS3-12 é capaz de realizar a conversão do **1H** em **2T** com 61% de seletividade no primeiro uso, enquanto o catalisador comercial promove seletividade de 51%. O reciclo promove decréscimo na seletividade para ambos catalisadores, porém o efeito é mais pronunciado no catalisador comercial.

## Agradecimentos

UFSC, CNPq & INCT-Catálise.

<sup>1</sup> Modhera, B.; Chakraborty M.; Parikh, P.A.; Bajaj, H.C.; *Catal. Lett.* **2009**, 132, 168.

<sup>2</sup> Gauthier, D.; Lindhardt, A.T.; Olsen, E.P.K.; Overgaard, J.; Skrydstrup, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 7998.

<sup>3</sup> Nanopartículas de Pd de 3,6 nm. Preparação descrita em Souza, B.S.; Leopoldino, E.C.; Tondo, D.W.; Dupont, J.; Nome, F.; *Langmuir.* **2012**, 28, 833.