

Síntese, Caracterização e Atividade Catalítica em Reações de Transferência de Hidrogênio dos Complexos *trans/cis*-[RuCl₂(P-P)(N-N)]

Rebecca D. Nascimento¹ (IC), Tarcisio S. Vieira² (PG),
Luciano M. Lião² (PQ), Victor M. Deflon³ (PQ), André L. Bogado¹ (PQ), Luís R. Dinelli*¹ (PQ)

¹Universidade Federal de Uberlândia – Faculdade de Ciências Integradas do Pontal (FACIP - UFU)

²Universidade Federal de Goiás – Instituto de Química (IQ/UFG) Campus Samambaia,

³Universidade de São Paulo – Instituto de Química de São Carlos (IQSC/USP)

rebeccadiaz@qui.pontal.ufu.br

Palavras Chave: complexos fosfínicos; rutênio; catálise homogênea

Introdução

A aplicação de complexos fosfínicos de rutênio (II) em ensaios catalíticos deve-se principalmente à reprodutibilidade das condições sintéticas, alta seletividade e estereoespecificidade desses complexos.¹ Este trabalho tem como objetivo sintetizar, caracterizar e aplicar os complexos com fórmula geral *trans*- ou *cis*-[RuCl₂(dppb)(N-N)] onde dppb = 1,4-bis(difenilfosfina)butano; N-N = 1,2-diaminocicloexano (cydn) ou 1,2-diaminobenzeno (opda) em reações de transferência de hidrogênio (RTH).

Resultados e Discussão

Os complexos *cis*-[RuCl₂(dppb)(cydn)] (**1**), *trans*-[RuCl₂(dppb)(cydn)] (**2**) e *trans*-[RuCl₂(dppb)(opda)] (**3**) foram obtidos a partir do precursor [Ru₂Cl₄(μ-dppb)₂] na presença dos ligantes nitrogenados (cydn) e (opda), em tolueno como solvente. A Figura 1 apresenta o esquema reacional para a obtenção dos complexos (**1**), (**2**) e (**3**).

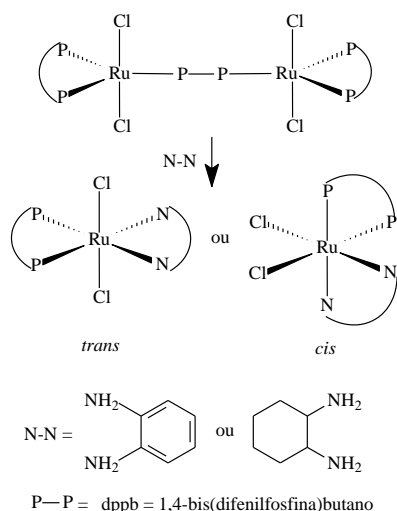


Figura 1. Esquema reacional para a obtenção dos complexos (**1**), (**2**) e (**3**).

Os complexos foram caracterizados por diversas técnicas, tais como: voltametria cíclica (VC), ressonância magnética nuclear (RMN, ¹H, ¹³C e ³¹P{¹H}), espectroscopias UV-Vis e FTIR e análise elemental (CHN). Para o complexo (**1**), por difração de raios X de monocristal. A tabela 1 sumariza a atividade catalítica dos complexos de (**1**) – (**3**) na RTH da acetofenona.

Tabela 1: Atividade catalítica dos complexos (**1**) – (**3**) na RTH da acetofenona.

Complexo	Feniletanol ^a % (DPR) ^c	TOF ^b (h ⁻¹)
<i>cis</i> -[RuCl ₂ (dppb)(cydn)] (1)	87 ± 16	1128 ± 11
<i>trans</i> -[RuCl ₂ (dppb)(cydn)] (2)	76 ± 10	1036 ± 29
<i>trans</i> -[RuCl ₂ (dppb)(opda)] (3)	4 ± 2	70 ± 46

a) As reações foram realizadas em isopropanol (10 ml), na presença de KOH (1mL; 0,2 mol L⁻¹), complexo (10μmol), e acetofenona (10mmol) sob condições de refluxo. Relação molar Ru/Substrato/KOH = 1/1000/20. **b)** DPR = desvio padrão relativo. **c)** TOF = turnover frequency = mol de produto/mol catalisador/h. As reações foram acompanhadas por cromatografia gasosa (CG) utilizando *n*-hexadecano como padrão interno.

Conclusões

Os complexos de (**1**), (**2**) e (**3**) foram sintetizados e caracterizados por VC, RMN, UV/vis, FTIR, CHN e difração de raios X, confirmando a estrutura octaédrica com fórmula geral *trans*- e *cis*-[RuCl₂(dppb)(N-N)]. O complexo (**1**) apresentou a melhor atividade catalítica para a reação de transferência de hidrogênio (RTH), utilizando a acetofenona como substrato. Este resultado confere com o mecanismo proposto por Noyori para uma RTH onde os cloretos em posição *cis* no centro metálico do precursor catalítico propiciam a melhor estereoquímica para a formação do catalisador efetivo da reação.

Agradecimentos

FAPEMIG

CNPq

FINEP

IN-CNPq

¹ Cavarzan, D.A.; Fagundes, F.D.; Fuganti, O.; da Silva, C.W.P.; Pinheiro, C.B.; Back, D.F.; Barison, A.; Bogado, A.L.; Araujo, M.P. *Polyhedron*, **2013**, *62*, 75.