

## Caracterização estrutural e eletroquímica de um protótipo de catalisador a ser utilizado na polimerização do CO<sub>2</sub>

Luísa Lima Mendes<sup>1</sup> (PG)<sup>\*</sup>, Adolfo Horn Jr<sup>1</sup> (PQ), Christiane Fernandes<sup>1</sup> (PQ), Sheng-Shuan Wei<sup>2</sup> (PQ), Donald J. Darensbourg<sup>2</sup> (PQ)

luisalmendes@yahoo.com.br

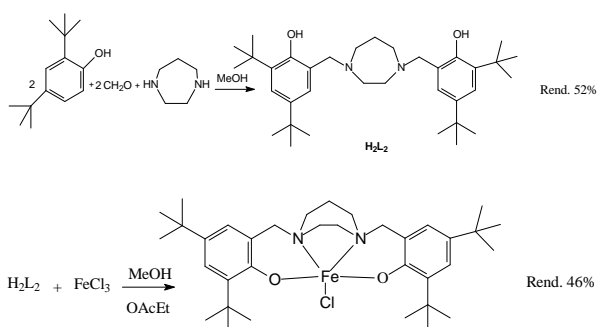
<sup>1</sup>LCQUI – UENF – Campos/RJ, <sup>2</sup> Texas A&M University – TX-USA

Palavras Chave: compostos de coordenação, dióxido de carbono, policarbonato.

### Introdução

O aumento significativo da concentração de CO<sub>2</sub> atmosférico após a revolução industrial (de 280 para 365 ppm)<sup>1</sup> tem sido tema de muito debate social, político e científico. Do ponto de vista químico o CO<sub>2</sub> é uma molécula altamente oxidada e pouco reativa. Entretanto, tem-se mostrado que certos catalisadores podem converter a molécula de CO<sub>2</sub> em produtos economicamente viáveis como por exemplo, policarbonatos.<sup>2</sup> Compostos de coordenação contendo como ligantes diaminas e diiminas tem sido empregados em estudo de polimerização do CO<sub>2</sub>.<sup>2</sup> Neste trabalho relatamos a estrutura de raios X e as propriedades eletroquímicas de um composto de ferro contendo uma diamina cíclica e grupos fenólicos como unidades coordenantes. Embora este complexo já tenha sido relatado na literatura<sup>3</sup> os dados que aqui apresentamos são inéditos. Este complexo será futuramente avaliado na reação de polimerização do CO<sub>2</sub>.

### Resultados e Discussão



Esquema 1. Síntese do ligante e do complexo.

O ligante H<sub>2</sub>L<sub>2</sub> 1,4-bis(2-hidroxi-3,5-diterc-butilbenzil)-diazocicloheptano e o complexo FeL<sub>2</sub> foram sintetizados de acordo com o Esquema 1. O complexo de ferro foi caracterizado por IV, CHN, condutivimetria, espectroscopia de UV/Vis, eletroquímica e difração de raios X de monocristal. Este último mostra a obtenção de um complexo mononuclear de ferro pentacoordenado com uma

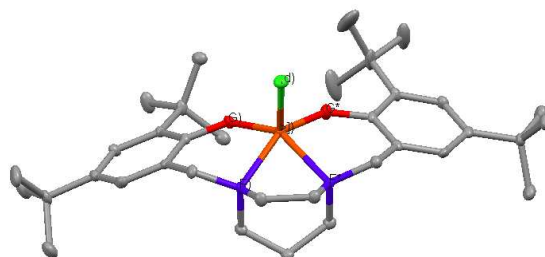


Figura 1. Estrutura molecular obtida por difração de raios X do complexo FeL<sub>2</sub>. Ângulo (°)/comprimentos de ligação Å: N1-Fe-O1= 85,81; N2- Fe-O2= 87,8; O1-Fe-O2= 97,99; N1-Fe-N2= 72,6; N1-Fe-O2= 148,8; N2-Fe-O1=145/ Fe-Cl= 2,251; N1-Fe= 2,177; N2- Fe= 2,186; O1-Fe= 1,868; O2-Fe= 1,865.R= 3,7%.

geometria de pirâmide de base quadrada distorcida (Figura 1). O composto exibiu três processos redox *quasi-reversíveis* em acetonitrila. com valores de E<sub>1/2</sub> = -0,90 V, +0,75 V e +1,01 V vs. Fc/Fc<sup>+</sup> à 200 mV/s. O processo com potencial negativo é atribuído ao par redox Fe<sup>III</sup>/Fe<sup>II</sup>. Já os processos com potenciais positivos representam as reações redox do ligante centrados nos grupos bis-terc-butilfenóis.<sup>4</sup>

### Conclusões

As técnicas empregadas confirmaram a obtenção de um novo complexo pentacoordenado de ferro, sendo que a sexta posição de coordenação livre torna este composto de interesse para ser estudado em reações de polimerização do CO<sub>2</sub>.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERJ

<sup>1</sup>IPCC, 2001

<sup>2</sup> Darensbourg, D. *Chemical Reviews*, 2007, 107 (6), 2388-2410.

<sup>3</sup>Mayilmurugan, R.; Stoeckli-Evans, H.; Suresh, E.; Palaniandavar, M. *Dalton Transactions*, 2009, 26, 5101-2114.

<sup>4</sup>Strautmann, J.B.H.; George, S.B.; Bothe, E.; Bill, E.; Weyhermüller, T.; Stammler, A.; Bögge, H.; Glaser, T. *Inorganic Chemistry*, 2008, 47, 6804-6824.