

# Reação de transferência de hidrogênio catalisada por complexos de rutênio

**Angel Rubén Higuera-Padilla<sup>1</sup>**  
**Alzir Azevedo Batista<sup>2</sup>**  
**Luiz Alberto Colnago<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Bolsista de Pós-doutorado CNPq, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP; angelruben@hotmail.com

<sup>2</sup> Professor do Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.

<sup>3</sup> Pesquisador da Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

A catálise em condições brandas é de grande importância para o desenvolvimento de novos princípios ativos a partir de síntese orgânica ou da modificação de produtos naturais. Por isso, há uma grande necessidade de catalisadores novos e com melhor desempenho (ou seja, catalisadores com maior atividade, melhor seletividade, produtividade, estabilidade e tecnologias mais fáceis de programar). Assim, este estudo teve a finalidade de sintetizar, caracterizar e estudar a atividade catalítica de vários compostos de rutênio sobre a reação de transferência de hidrogênio que é definida como a redução de ligações múltiplas com ajuda de um composto doador de hidrogênio na presença de um catalisador. Foram sintetizados e caracterizados 4 catalisadores de Ru, *cis*-[RuCl<sub>2</sub>(dppb)(N-N)], [( $\eta^6$ -cimeno)Ru(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl]PF<sub>6</sub>, [( $\eta^6$ -cimeno)Ru(N-N)Cl]PF<sub>6</sub> e [( $\eta^6$ -cimeno)Ru(dppb)Cl]PF<sub>6</sub>, onde dppb = 1,4-bis(difenilfosfina)butano, N-N = 2,2'-bipiridina e PPh<sub>3</sub> = trifenilfosfina. Para estes complexos foram testadas suas atividades catalíticas sobre vários substratos (metil-etil-cetona, benzofenona e acetofenona), usando como fonte de hidrogênio o 2-propanol (isopropanol) e como base o hidróxido de potássio (reagentes muito baratos). As reações foram acompanhadas *in situ* por RMN de alto campo (600 MHz), em tubos de 5mm. As temperaturas operacionais foram 35, 50 e 60 °C e a relação substrato/base/catalisador foi 100/10/1. O objetivo principal deste estudo foi determinar o possível mecanismo da reação de transferência de hidrogênio. Há muitas consequências práticas de uma boa compreensão do mecanismo de uma reação. Uma vez que um mecanismo tem-se determinado, um químico pode escolher as condições de reação apropriadas ou modificar os reagentes, a fim aperfeiçoar a reação, o que vai levar a melhores processos químicos que sejam mais baratos, mais verdes, mais seletivos, etc. A reação de transferência de hidrogênio tem as vantagens de simplicidade operacional e respeito pelo ambiente. Não requer nenhuma pressão de hidrogênio, é nenhum resíduo perigoso é produzido. Devido ao 2-propanol ser utilizado como doador de hidrogênio, o único produto secundário formado é acetona, que é facilmente removida por destilação.

**Apoio financeiro:** Embrapa/CNPq (Processo-filho N° 163394/2015-6)

**Área:** Novo Materiais e Nanotecnologia

**Palavras-chave:** Catálise homogênea, transferência de hidrogênio, RMN