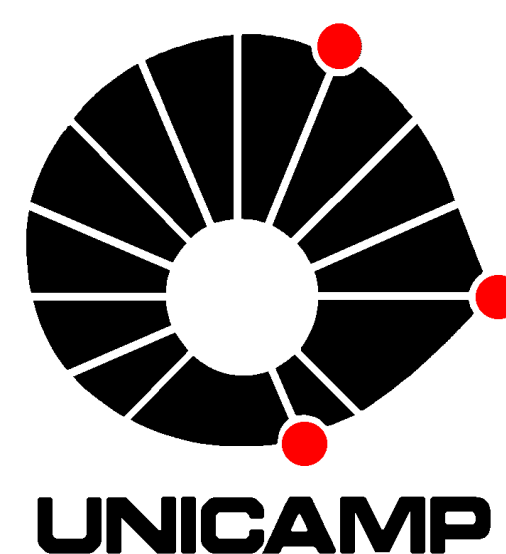


# Reações de acoplamento C-C utilizando complexos de paládio em fase homogênea e heterogênea

Ítalo R. de Jesus (CNPq), Sabrina G. dos Santos, Cíntia A. Sato, Vanderlei I. De Paula e Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Regina Buffon\* (Orientadora)  
Instituto de Química - Universidade Estadual de Campinas - Projeto financiado pelo CNPq

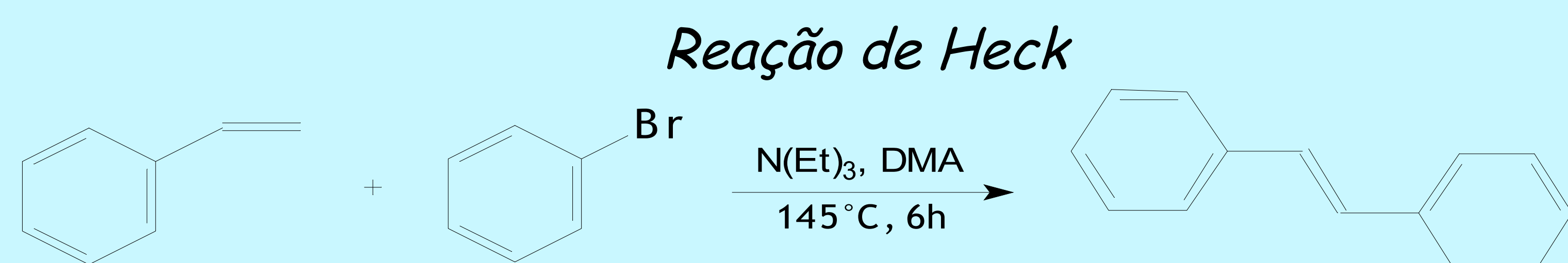
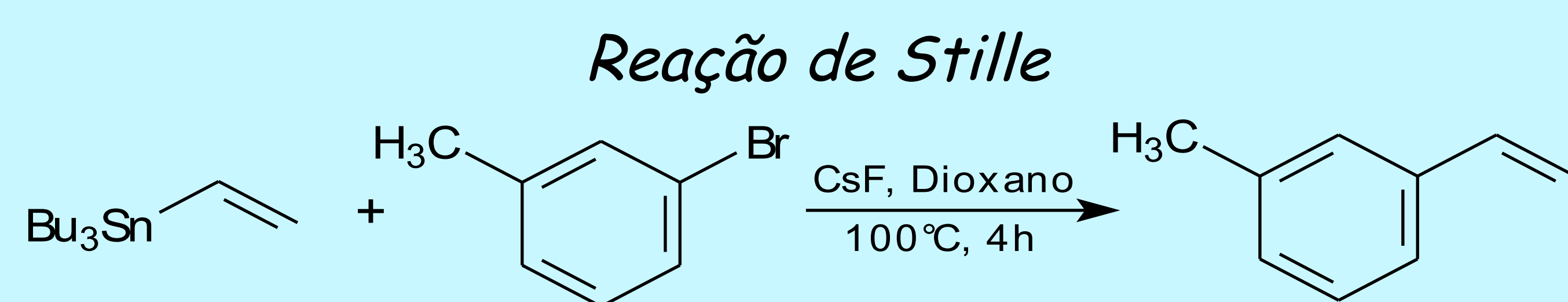
Palavras-Chave: Catálise - Acoplamento C-C - Paládio

rbuffon@iqm.unicamp.br



- Formação de ligações C-C a partir de reações simples
- Catalisadores em fase homogênea muito caros → Catálise em fase heterogênea para reciclagem do catalisador
- Heterogeneização por processo sol-gel e imobilização em matriz de sílica

## Reações de acoplamento C-C testadas no laboratório



## Reação de Sonogashira

| Fase          | Catalisador                          | Relação Substrato: Pd | TON   |
|---------------|--------------------------------------|-----------------------|-------|
| Homogênea [1] | #                                    | 10000                 | 8200  |
| Homogênea     | PdAc <sub>2</sub> / PPh <sub>3</sub> | 772                   | 656,2 |
| Homogênea     | PdCF                                 | 816                   | 514   |
| Homogênea     | PdCF                                 | 814                   | 454   |
| Heterogênea   | CAT1                                 | 500                   | 330   |

# [Pd(η<sup>3</sup>-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)Cl]<sub>2</sub> / *cis, cis, cis*-1,2,3,4-tetrakis-(difenilfosfinometil)ciclopentano

\* Substrato: fenilacetileno, haleto: bromobenzeno, CuI: 0,05 eq, tempo: 20h, temperatura: 140°C, solvente: DMF, base : Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>

## Reação de Stille

| Fase            | Catalisador  | Haleto         | Tempo | Relação Substrato: Pd | TON               |
|-----------------|--|----------------|-------|-----------------------|-------------------|
| Homogênea * [2] | Pd(PPh <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>                       | bromobenzeno   | 18h   | 20                    | 7,8 (Z) / 1,8 (E) |
| Homogênea [3]   | Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub> /P(t-Bu) <sub>3</sub> | 4-clorotolueno | 8h    | 33,6                  | 19,7              |
| Homogênea       | Pd <sub>2</sub> (dba) <sub>3</sub> /PPh <sub>3</sub>     | 2-bromotolueno | 4h    | 4000                  | 3800              |
| Homogênea       | PdCF   | 2-bromotolueno | 4h    | 6000                  | 4340              |
| Heterogênea     | CAT2   | bromotolueno   | 4h    | 6000                  | 1400              |

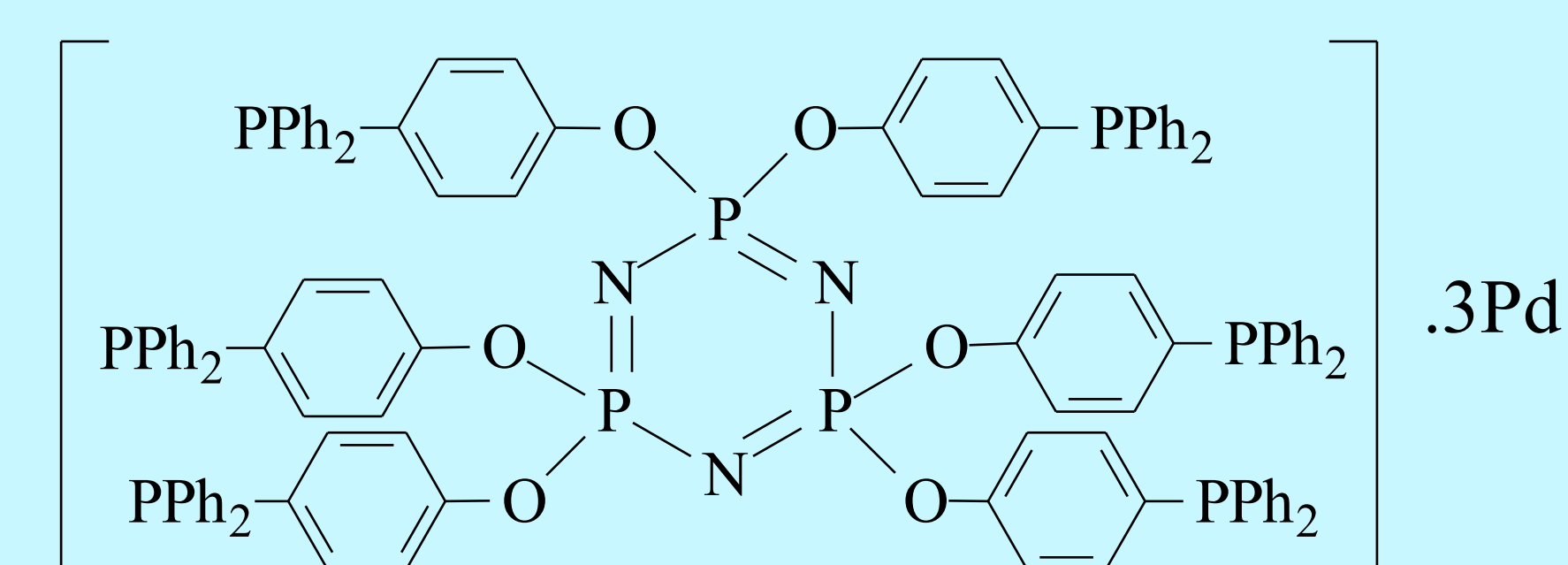
\* Substrato: Bu<sub>3</sub>Sn-(CH<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>Et), solvente: tolueno em refluxo, sem adição de base

\*\* Substrato: tributilviniléstanho, temperatura: 100°C, solvente: dioxano, base : CsF

## Catalisadores utilizados:

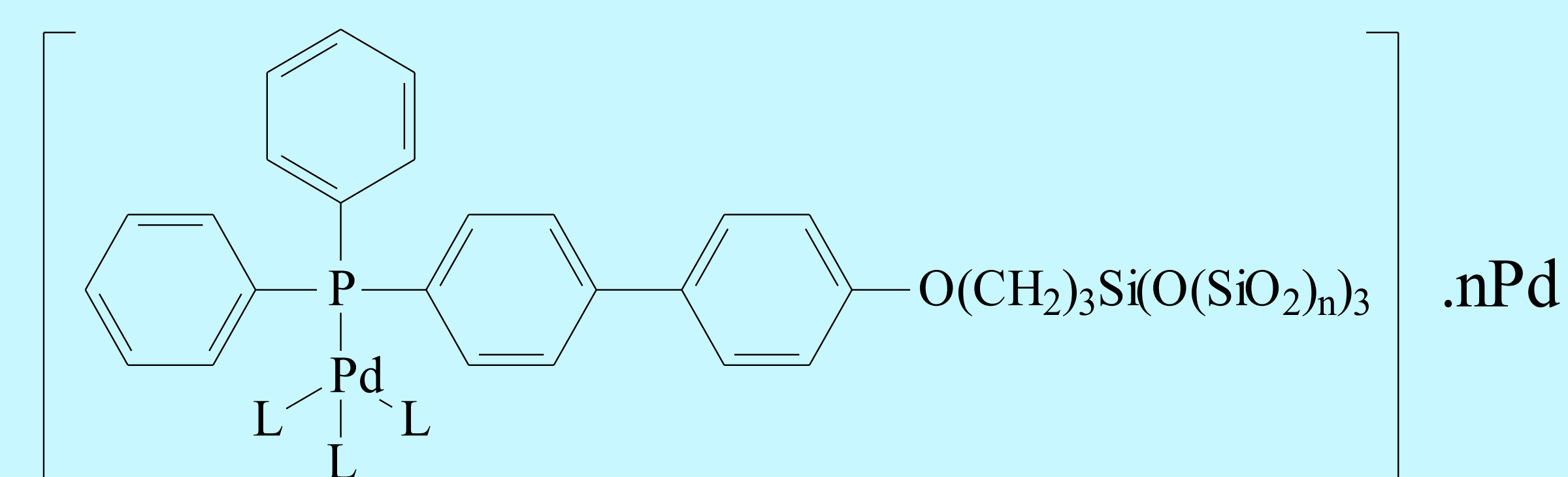
Em fase homogênea:

PdCF

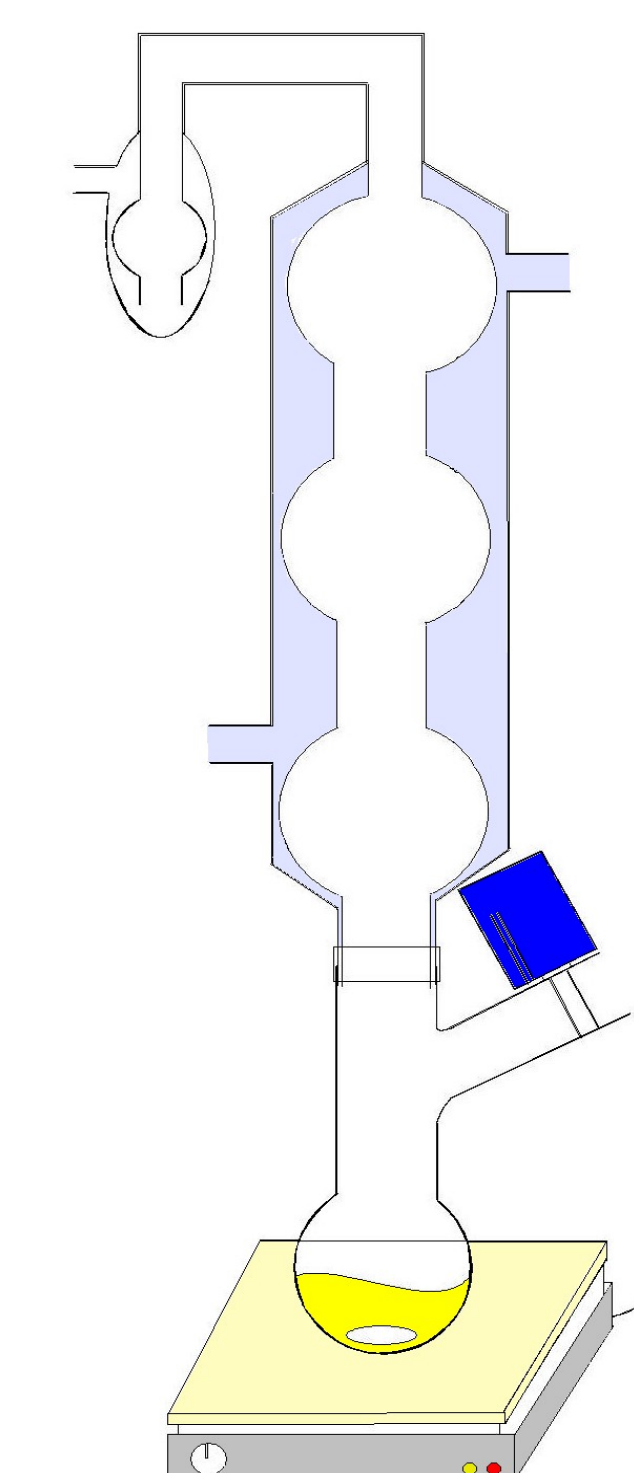
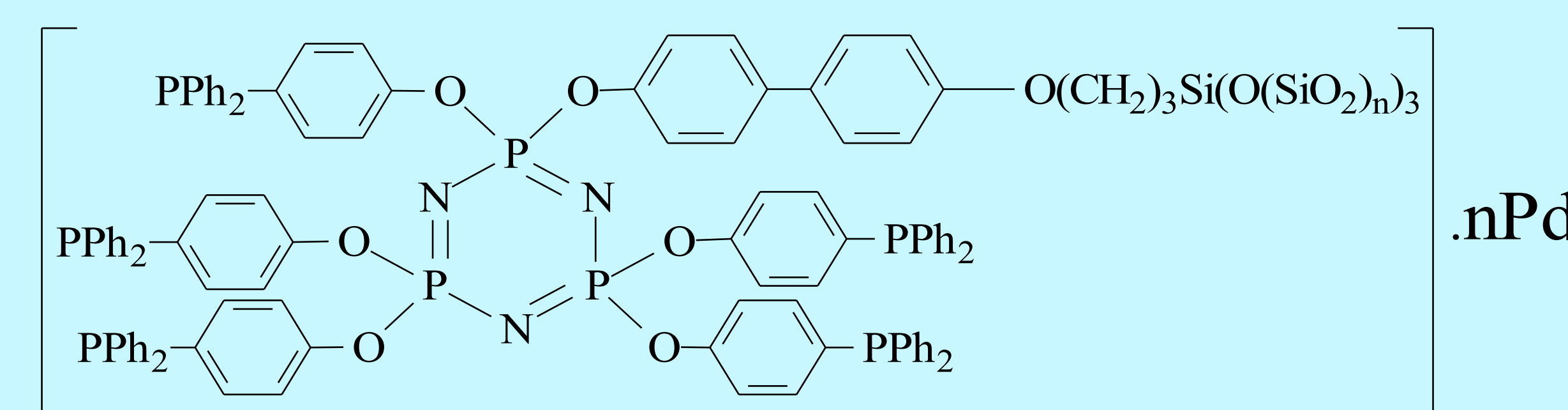


Em fase heterogênea,  
ancorados em matriz de sílica:

CAT1



CAT2



## Conclusão:

Os catalisadores testados mostraram-se versáteis, tendo uma boa atividade para os quatro tipos de reação [4], sendo promissores para estudos futuros.

## Referências:

- [1] Feuerstein, M.; Berthiol, F.; Doucet, H; Santelli, M; *Org. Biomol. Chem.*, 2003, 1, 2235- 2237
- [2] Fairlamb, I.J.S.; Taylor, R.J.K.; Serrano, J.L.; Sanchez, G. *New J. Chem.* 2006, 30: 1695-1704
- [3] Littke, A.F.; Schwarz, L.; Fu, G.C. *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, 124: 6343-6348
- [4] I. R. Jesus; R. M. Rios, R. Buffon; "Utilização de Complexos de Paládio em reações catalíticas de Acoplamento C-C", XV Congresso Interno de Iniciação Científica, Campinas, Livro de Resumos, 2007, E0452 - Apresentação de trabalho.