



## DESENVOLVIMENTO DE COMPLEXO HETEROBIMETÁLICO Ni/Pd DERIVADO DE BIS(TIOSSEMICARBAZONA) TETRADENTADA VISANDO APLICAÇÃO COMO CATALISADORES BIFUNCIONAIS

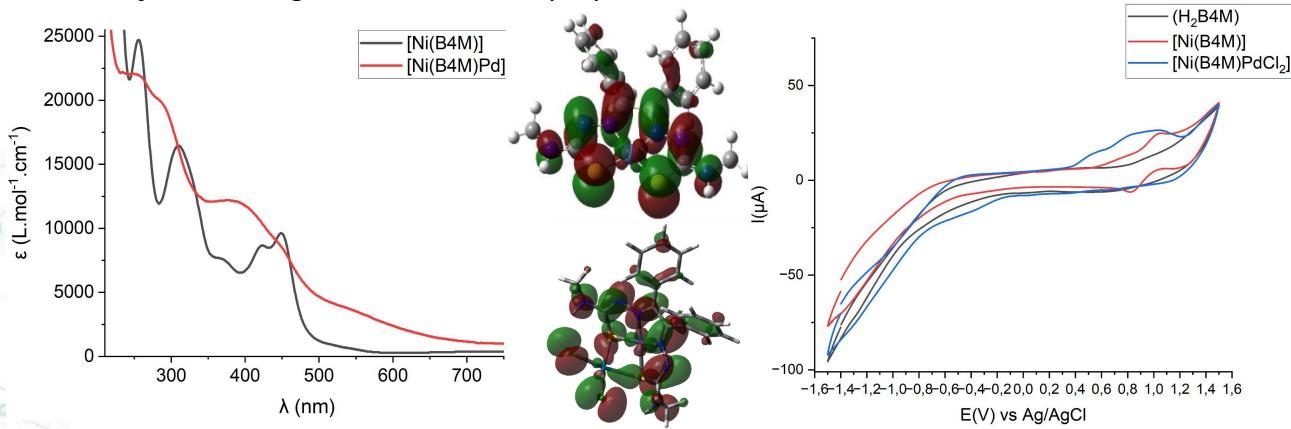
Raíza F. X. Lima<sup>1\*</sup>, Isabella C. D. Costa<sup>2</sup>, Antônio E.D. Machado<sup>3</sup>, Pedro I. S. da Maia<sup>4</sup>

<sup>1,2,4</sup> Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Instituto de Ciências Exatas, Naturais e Educação, Uberaba, Minas Gerais, Brasil, 38025-440.

<sup>3</sup> Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química, Uberlândia, Minas Gerais, Brasil, 38400-902.

\*e-mail: raizauftm@gmail.com

As propriedades notáveis dos complexos metálicos derivados de ligantes orgânicos, têm despertado o interesse em investigar a influência de um segundo centro metálico, a fim de combinar propriedades e obter espécies ainda mais potentes e multifuncionais<sup>1,2</sup>. Sendo assim, o presente trabalho buscou a síntese de um novo complexo bimetálico, contendo como íons metálicos o Pd(II) e o Ni(II). A síntese do complexo [Ni(B4M)PdCl<sub>2</sub>] foi realizada a partir da reação entre o complexo de níquel contendo um ligante diiminico [Ni(B4M)] e o precursor [PdCl<sub>2</sub>(MeCN)<sub>2</sub>], em etanol. A caracterização por UV-vis mostrou que a inserção do paládio não altera significativamente as transições π-π\* aromáticas, mas desloca a banda das transições da porção imina, que encontra-se mais próxima da região de coordenação, para 286 nm, sugerindo a segunda coordenação do metal. Além disso, houve uma mudança significativa na natureza e intensidade das bandas MLTC, que ocorrem em menores comprimentos de onda no complexo binuclear. A inserção do paládio é capaz de influenciar os orbitais do níquel, como mostrado pelas imagens obtidas pelos cálculos de DFT para o orbital HOMO. Enquanto, para o complexo [Ni(B4M)] é possível observar a densidade eletrônica centrada no níquel, representada com os lóbulos entre os eixos, o [Ni(B4M)PdCl<sub>2</sub>] promove uma distribuição segundo a qual a densidade agora está localizada ao longo dos eixos das ligações. O complexo também apresenta uma absorção na região de 550 nm, associada a transições d-d, conferindo-lhe uma coloração avermelhada. A voltametria cíclica revelou diferenças entre os processos de oxidação e redução. O complexo de níquel apresentou um único pico de oxidação entre 0,5 e 1,3V, enquanto o complexo bimetálico exibiu dois picos oxidativos, podendo ser associados à presença do segundo centro metálico. Portanto, pode-se admitir a obtenção do [Ni(B4M)PdCl<sub>2</sub>] por meio das técnicas de caracterização e como essa inserção altera significativamente as propriedades eletrônicas e reacionais do complexo.



**Agradecimentos:** CAPES, PROAP do PPGMQ-MG.

[1] Guedes G.P, Allão R.A, Mercante L.A, Vaz MGF, Novak M.A. Molecular magnetic compounds - the development of new nanostructured magnetic materials. *J. Mater. Chem. C.* 25, 2023, 12345.

[2] Ruiz R, Castro I, Pardo E, Ferrando-Soria J, Cano J, Lloreta F, Julve M. Slow Relaxation of the Magnetization in Oximate-Bridged Heterobimetallic Copper(II)-Manganese(III) Chains. *Chem. Soc. Rev.* 40, 2011, 3887.