

## PESQUISA - FACET

### **SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE UMA 1,4-NAFTOQUINONA 2,3-BIS-(N-PIRAZOIL)-SUBSTITUÍDA E DO SEU COMPLEXO DE Pd(II)**

*Andriely Costa De Mattos (Andrielycosta2013@gmail.com)*

*Cristiane Storck Schwalm (cristianeschwalm@gmail.com)*

A síntese e caracterização de naftoquinonas 2,3-bis-(amino)-substituídas têm sido bastante exploradas na literatura, especialmente no que diz respeito à sua utilização como corantes orgânicos. Entretanto, os derivados correlatos 2,3-bis-(N-heterociclo)-substituídos permanecem pouco estudados, apesar de seu potencial para apresentar propriedades fotofísicas e atividades biológicas interessantes, bem como amplas possibilidades de coordenação a diferentes centros metálicos. Neste contexto, este trabalho tem como foco a síntese e caracterização de uma 1,4-naftoquinona 2,3-bis-pirazoil substituída, bem como a obtenção do respectivo complexo de Pd(II), para posterior estudo de suas propriedades fotofísicas e aplicações em catálise. O objetivo geral do trabalho é a preparação do ligante bis-pirazólico (oriundo da reação entre 2,3-dicloro-1,4-naftoquinona e pirazol), enquanto os objetivos específicos incluem a otimização das condições reacionais, a obtenção deste composto em escala apropriada (mínimo de 0,5 g), a sua caracterização fotofísica e a síntese do respectivo complexo de Pd(II). Para a otimização da preparação do ligante, foi investigada a variação de parâmetros reacionais como estequiometria e solvente. Os resultados iniciais demonstraram que, em experimentos com estequiometria pirazol : dicloronaftoquinona igual a 2:1, em etanol e sob aquecimento, o rendimento do produto desejado foi de aproximadamente 20%,

mas com contaminação significativa. Ajustes na estequiometria e a troca do solvente para acetonitrila levaram a um aumento na pureza e no rendimento do produto. Utilizando 6 equivalentes de pirazol, em acetonitrila, sob aquecimento e em 24 horas de reação, foi possível obter o produto bis-pirazólico com rendimento de 80% e pureza satisfatória, sugerindo que a troca do solvente foi eficaz na supressão de subprodutos indesejados. Além disso, foram exploradas várias técnicas de purificação para remover contaminantes, permitindo a obtenção de material em quantidade apropriada e pureza adequada para os primeiros testes de complexação com  $\text{Pd}(\text{MeCN})_2\text{Cl}_2$  como precursor metálico. A reação de complexação foi realizada em acetonitrila, à temperatura ambiente, utilizando estequiometria 1:1 entre metal e ligante, o que resultou na formação de um precipitado. O sólido foi coletado, seco e analisado por TG/DSC, apresentando um resíduo compatível com a formação de um complexo do tipo  $\text{PdCl}_2$ , no qual o composto bis-pirazólico age como um ligante neutro e dois átomos de cloro permanecem como ligantes aniônicos na esfera de coordenação do metal. A análise de UV-Vis também corrobora a formação do complexo: embora não tenha sido observado um deslocamento considerável do máximo de absorção, foi observado um efeito hipocrômico em relação ao ligante puro. Experimentos para caracterização do ligante e complexo por fluorescência, bem como tentativas de obtenção de monocristal para análise por difração de raios-X encontram-se em andamento.

Agradecimentos: UFGD, CNPq, CAPES e FUNDECT.

Palavras-chave: naftoquinona; pirazol; paládio.