

Estudo Fotofísico de Derivados Benzazólicos Fotoativos Formilados

Nátalia Goedel Medeiros* (IC), Ricardo Ferreira Affeldt (PG), Fabiano da Silveira Santos (PG), Fabiano Severo Rodembusch (PQ). E-mail: natalia.medeiros@ufrgs.br

Grupo de Pesquisa em Novos Materiais Orgânicos e Fotoquímica. Instituto de Química/UFRGS. Av. Bento Gonçalves, 9500. CEP 91501-970, Porto Alegre, RS.

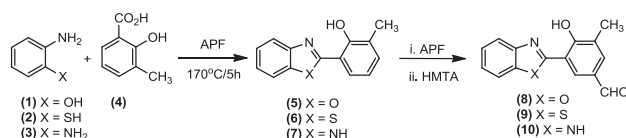
Palavras Chave: Solvatocromismo, fluorescência, benzazolas, ESIPT, photoactive building block.

Introdução

Os derivados dos 2-(2'-hidroxifenil)benzazois são heterociclos fotoativos que apresentam emissão de fluorescência com grande deslocamento de Stokes, permitindo potenciais aplicações para estes compostos.¹ Este comportamento fotofísico peculiar é devido a um fototautomerismo no estado excitado, conhecido por ESIPT (*Excited State Intramolecular Proton Transfer*).¹ A obtenção de derivados funcionalizados destes compostos é de interesse sintético, tendo em vista que podem ser usados como blocos construtores de novos compostos fluorescentes. Assim, este trabalho apresenta a síntese e a caracterização fotofísica de derivados formilados do tipo 2-(2'-hidroxi-3'-metil-5'-formilfenil)benzoxazol.

Resultados e Discussão

Os compostos foram obtidos conforme apresentado no Esquema 1.² A caracterização espectroscópica está de acordo com a estrutura esperada.



Esquema 1

Sabendo que o mecanismo de ESIPT é dependente do solvente,³ por apresentar algumas vezes dupla emissão de fluorescência provenientes das formas enol (E*) ou ceto (C*) excitadas, o estudo fotofísico foi realizado em solventes de diferentes polaridades. Na Figura 1 estão apresentadas as curvas de absorção e emissão do composto (10). Os demais apresentaram comportamento similar.

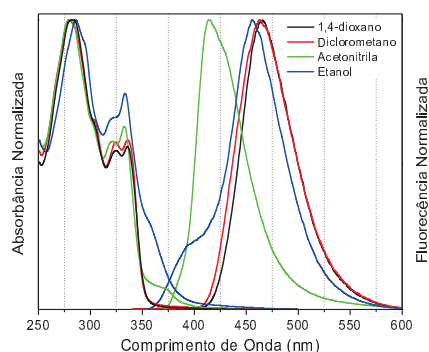


Figure 1. Espectros normalizados de absorção de UV-Vis e emissão de fluorescência do composto (10) [10^{-5} M].

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

Os resultados do estudo fotofísico estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Dados de absorção de UV-Vis e emissão de fluorescência em solução dos compostos (8-10).

Solv	Dye	λ_{abs}	ϵ	Enol		Ceto	
				λ_{em}	$\Delta\lambda$	λ_{em}	$\Delta\lambda$
DIO	8	335	1.09	-	-	493	158
	9	436	1.24	-	-	530	94
	10	336	1.20	-	-	466	130
MeCN	8	333	1.16	440	107	486	153
	9	402	0.54	448	46	-	-
	10	370	0.25	415	45	457	87
EtOH	8	334	1.36	428	94	487	153
	9	374	1.04	445	71	-	-
	10	352	0.72	397	45	452	100
DCM	8	335	1.59	-	-	486	151
	9	347	0.89	-	-	520	173
	10	336	1.04	-	-	463	127

Deslocamento de Stokes: $\Delta\lambda_{ST} = \lambda_{em} - \lambda_{abs}$ (nm) e λ_{em} (nm). ϵ ($\times 10^4$ M⁻¹ cm⁻¹)

Os compostos absorvem na região do UV com transições eletrônicas do tipo $^1\pi\pi^*$ ($\epsilon \sim 10^4$ M⁻¹ cm⁻¹). No estado excitado, é possível verificar uma única banda de emissão, com exceção do etanol, que apresenta uma dupla emissão de fluorescência, com uma banda principal deslocada para o vermelho (banda ceto) e uma banda de menor intensidade deslocada para o azul (banda enol).

Conclusões

Novos derivados formilados fotoativos foram sintetizados e caracterizados. Os compostos apresentam absorção na região do UV e emissão no visível, com grande deslocamento de Stokes.

Agradecimentos



1. Wu, J.; Liu, W.; Ge, J. *et al. Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3483.

2. (a) Barni, E.; Savarino, P. *et al. J. Heter. Chem.* **1983**, *20*, 1517. (b) Singh, B. *Synlett* **2011**, *19*, 2903.

3. Rodembusch, F. S.; Leusin, F. P. *et al. J. Lumin.* **2007**, *126*, 728.

Secretarias Regionais SC, PR e RS