



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Síntese, caracterização e investigação fotofísica de novos derivados benzazólicos fotoativos
Autor	NATÁLIA GOEDEL MEDEIROS
Orientador	FABIANO SEVERO RODEMBUSCH

Derivados de benzazólicos são heterocíclicos cujas propriedades fluorescentes são amplamente exploradas na química de materiais, especialmente como ligantes para a complexação com metais de transição, ligantes em macromoléculas, polímeros e materiais híbridos. Estes compostos caracterizam-se por apresentar um grande deslocamento de Stokes, devido a um fototautomerismo no estado excitado (ESIPT) que ocorre nestes compostos após absorção de luz. Assim, o objetivo do trabalho é investigar a influência de um substituinte no anel fenólico nos espectros de absorção e emissão de fluorescência e estabelecer uma comparação com análogos de estrutura mais simples. Desta forma, foram sintetizados com sucesso três derivados metilados através da condensação dos fenóis correspondentes orto-substituídos com o ácido 3-metil-salicílico em ácido polifosfórico como agente desidratante e solvente da reação. A partir do conhecimento da dependência do mecanismo ESIPT com o solvente, os espectros de absorção na região do UV-Vis e emissão de fluorescência foram realizadas em acetonitrila, 1,4-dioxano e etanol, solventes de diferentes constantes dielétricas. Esta variação tem por objetivo caracterizar as propriedades fotofísicas dos corantes e comparar com os já conhecidos derivados de 2-(2'-hidroxifenil)benzoxazol (HBO), 2-(2'-hidroxifenil)benzotiazol (HBT) e 2-(2'-hidroxifenil)benzoimidazol (HBI). Todos os compostos apresentaram absorção na região do UV (~ 340 nm) e emissão de fluorescência na região do azul-verde. Pode-se observar ainda que estes compostos apresentaram dupla emissão de fluorescência, com uma banda principal, localizada em aproximadamente 490 nm (denominada de banda ESIPT) e outra banda deslocada para o azul, em aproximadamente 380 nm (denominada de banda normal). Além disso, um efeito solvatocrômico negativo foi observado no estado excitado. Os resultados preliminares deste estudo mostraram que: (i) a caracterização espectroscópica (FTIR, RMN ¹H e ¹³C) permitiu a comprovação da estrutura esperada para estes compostos, (ii) a introdução de um grupo metil no grupo fenil ligado ao núcleo benzazólico não afetou significativamente o equilíbrio ceto/enol dos compostos sobre os estados excitados singletos e apresentaram bandas de emissão deslocadas para o vermelho em 10-15 nm, em comparação com HBO, HBT e HBI; (iii) a adição de um grupo metila para a obtenção de derivados do HBO, HBT e HBI manteve a mesma característica do fototautomerismo no estado excitado em comparação com o HBO, HBT e HBI. Esses derivados ainda podem ser usados como potenciais blocos fotoativos de construção para outras reações químicas, a partir de derivações via reações de Duff, Reimer-Tiemann ou de Vilsmeier-Haack, a fim de aumentar a abrangência destas moléculas em síntese orgânica. Agradecemos ao CNPq, CAPES e ao Instituto Nacional de Inovação em Diagnósticos para Saúde Pública (INDI-Saúde) pelo apoio financeiro.