

## Síntese, propriedades fotofísicas, e marcação celular de derivados do núcleo 2,1,3-benzotiadiazola.

Pedro H. P. R. Carvalho\* (PG), Diego C. B. D Santos (PG), Jefferson A. Medeiros (IC), Brenno A. D. Neto (PQ).

*IQ-UnB, Campus Darcy Ribeiro, pedrohpinmenta@hotmail.com*

Palavras Chave: Benzotiadiazola, fotoluminescência, ESIPT, marcação celular

### Introdução

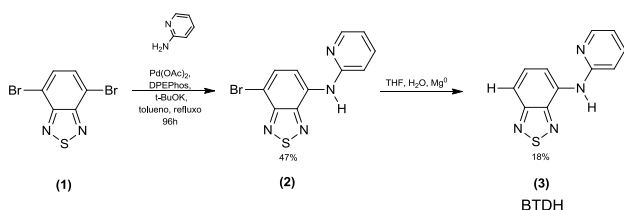
O núcleo 2,1,3-benzotiadiazola (BTD) e seus compostos derivados apresentam interessantes e desejáveis propriedades para a construção de moléculas fotoluminescentes.<sup>1</sup>

O ESIPT (Excited state intramolecular proton transfer) é um processo que diminui a energia da estrutura no estado excitado, estabilizando a molécula. O processo ESIPT depende do meio em que se encontra o composto, fatores como polaridade e pH tem grande influência na conformação adotada pela molécula.

Neste trabalho descreve-se a síntese de um composto derivado BTD, o estudo de suas propriedades fotofísicas e seguinte aplicação como marcador celular.

### Resultados e Discussão

O derivado benzotiadiazola foi sintetizado conforme mostra o Esquema 1. O composto **1** (4,7-dibromo-2,1,3-benzotiadiazola) foi submetido a um processo de aminação de Buchwald-Hartwig com 47% de rendimento, levando à formação do derivado **(2)**. Em seguida, **(2)** foi reduzido com magnésio metálico em uma solução de THF e H<sub>2</sub>O, formando **(3)** com 18% de rendimento.



Esquema 1. Síntese dos derivados BTDs.

As investigações das propriedades fotofísicas, foram realizados por meio de análises espectrofotométricas e espectrofluorimétricas. Os dados obtidos são apresentados na Tabela 1.<sup>2</sup>

Tabela 1. Dados espectroscópicos dos compostos BTDH.

	Solvente	$\lambda_{\text{max}}$ abs(nm)	log $\epsilon$	$\lambda_{\text{max}}$ em(nm)	$\lambda_{\text{em}}-\lambda_{\text{abs}}$
BTDH	AcOEt	423	4.13	534	111
	MeCN	417	3.91	550	133
	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	422	3.96	547	125
	Hexano	417	3.70	514	97
	Tolueno	421	3.92	536	115
	Etanol	421	3.93	560	139

Após ter suas propriedades fotofísicas investigadas, o composto BTDH foi testado como possível marcador celular (Figura 2).<sup>2</sup>

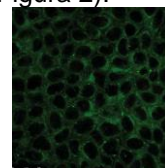


Figura 2. Mitôcondrias de células de câncer de mama marcadas pelo composto BTDH.

### Conclusões

Um novo derivado BTD foi sintetizado, caracterizado e testado como um novo marcador celular seletivo para mitôcondrias. Os dados obtidos pelas investigações fotofísicas confirmam que o composto realiza ESIPT. Apresenta um largo deslocamento de Stokes, o que caracteriza um estado excitado estabilizado, e elevados valores de absorvidade molar (log  $\epsilon$ ) que são características de moléculas que realizam este processo.<sup>3</sup>

### Agradecimentos

Às instituições FAPDF, CNPq, CAPES, pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Neto, B.A.D. *Síntese de novas moléculas fotoluminescentes com conjugações p-estendidas com potencial para aplicação em sistemas OLEDs*. (Programa de Pós-Graduação em Química). Doutorado – UFRGS, 2006

<sup>2</sup> Neto, B. A. D.; Carvalho, P. H. P. R.; Santos, D. C. B. D.; Gatto, C. C.; Ramos, L. M.; Vasconcelos, N. M.; Correa, J. R.; Costa, M. B.; Oliveira, H. C. B.; Silva, R. G. *RSC Adv.* 2012, 2,1524;

<sup>3</sup> G. Ulrich, F. Nastasi, P. Retailleau, F. Puntoriero, R. Ziessel and S. Campagna, *Chem.-Eur. J.*, 2008, 14, 4381–4392.