

# Semissíntese e propriedades fotofísicas de betalainas benzotiazólicas

Karina Kinuyo Nakashima\* (PG) e Erick Leite Bastos (PQ)

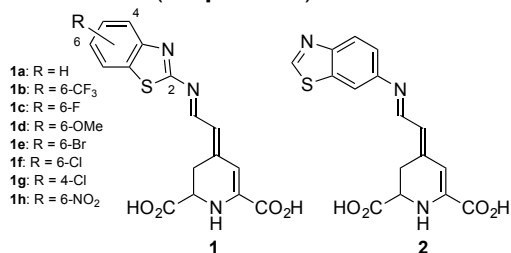
Instituto de Química da Universidade de São Paulo, São Paulo – SP, Brasil; karina.nakashima@usp.br

Palavras Chave: aminobenzotiazóis, betalainas, sondas fluorescentes.

## Introdução

Ácido betalâmico (**HBt**), cromóforo dos pigmentos betalínicos, é um aldeído que sofre acoplamento aldímico na presença de amins em meio ácido. Aminobenzotiazóis (**Bzt**) são fármacos lipofílicos e antiparasitas emergentes.<sup>1</sup> Além disso, o grupo benzotiazólico está presente na molécula de luciferina de vaga-lume e está relacionada ao processo de bioluminescência.

Betalainas semissintéticas obtidas em nosso grupo mostraram-se potenciais sondas fluorescentes para marcação de células, como a betacumarina, eficaz na identificação de células infectadas com *Plasmodium*.<sup>2</sup> A boa interação de compostos betalínicos com a membrana celular<sup>2</sup> motiva o acoplamento de **HBt** com substâncias de interesse biológico. Seguindo essa linha, o acoplamento entre o ácido betalâmico e **Bzt** poderia resultar em compostos fluorescentes com potencial aplicação como marcadores celulares. Para testar essa hipótese, neste trabalho estudou-se o acoplamento entre **HBt** e **Bzts** substituídos, visando, num primeiro momento, a caracterização fotofísica dos produtos obtidos (**Esquema 1**).



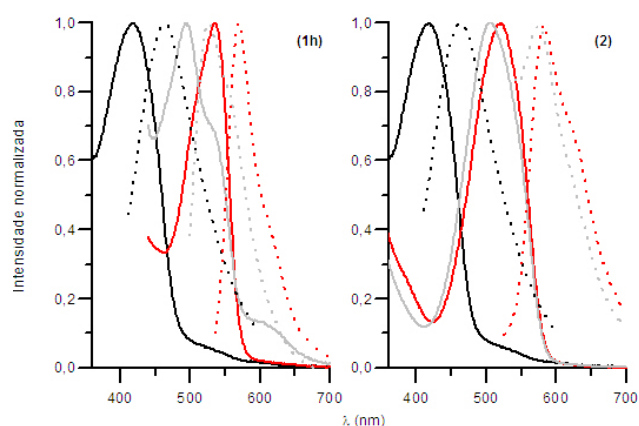
**Esquema 1.** Estrutura dos nove beta-aminobenzotiazóis preparados, derivados de 2-aminobenzotiazol e 6-aminobenzotiazol.

## Resultados e Discussão

O **HBt** foi obtido por meio da hidrólise alcalina de betalainas contidas em extrato de beterraba (*Beta vulgaris*, subsp. *vulgaris*). A semissíntese foi conduzida em presença de ácido p-toluenossulfônico como catalisador ácido e metanol como solvente. Os espectros de absorção e emissão foram registrados em um espectrofotômetro Varian Cary 50 e em um espectrofluorímetro Varian Eclipse, respectivamente. Foram adquiridos espectros de absorção e emissão de fluorescência dos **Bzts** precursores em metanol na presença de ácido.

37<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Todos os precursores têm máximo de absorção na região do UV (picos entre 220 e 340 nm) e são pouco ou nada fluorescentes. O acoplamento aldímico foi bem sucedido somente para a obtenção dos compostos **1h** e **2**, cujos espectros de absorção e emissão são apresentados na **Figura 1**.



**Figura 1.** Pares de espectros de absorção (—) e fluorescência (····) para os reagentes Bzts (preto) e dos produtos **1h** e **2** após a semissíntese (vermelho) e depois de 24 h (vermelho).

A banda de absorção e de emissão de **HBt** pouco se sobrepõe às dos produtos. O produto **1h** tem  $\lambda^{abs} = 536$  nm e  $\lambda^{em} = 570$  nm; **2** tem  $\lambda^{abs} = 520$  nm e  $\lambda^{em} = 583$  nm. A reação no caso de ambos os compostos é imediata. Os espectros registrados logo após a mistura dos reagentes e depois de um dia revelam deslocamento hipsocrômico das bandas de absorção e fluorescência de ambos os produtos.

## Conclusões

O acoplamento entre **HBt** e uma biblioteca de **Bzts** foi bem sucedido, nas condições experimentais utilizadas, apenas para os compostos **1h** e **2**. Os produtos obtidos têm máximo de absorção na região do visível e são fluorescentes e solúveis em água, características importantes em sondas e marcadores fluorescentes para aplicações biológicas.

## Agradecimentos

Ao CNPq (KKN, MS158870/2013-1, ELB, 304094/2013-7) e à FAPESP (ELB 2011/23036-5).

<sup>1</sup> Delmas, F. *et al. Antimicrob. Agents Chemother.* **2002**, 46 (8), 2588.

<sup>2</sup> Gonçalves, L. C. P. *et al. Plos One* **2013**, 8 (1), 53874.