

Síntese e avaliação do solvatocromismo de azocorantes apresentado grupos fenolatos elétron-doadores e grupos nitros elétron-aceitadores.

Carlos E. A. de Melo¹ (PG), Marcos C. Rezende² (PQ), Vanderlei G. Machado^{1*} (PQ).

*vanderlei.machado@ufsc.br

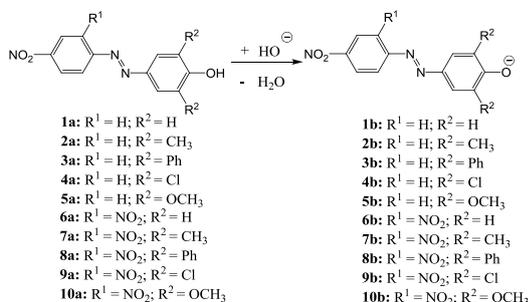
¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC, Florianópolis/SC, 88040-900, Brasil.

² Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago, Santiago, Chile.

Palavras Chave: Solvatocromismo, Solvatocromismo reverso, Azocorantes.

Introdução

O termo *solvatocromismo* é utilizado para descrever uma mudança na posição (eventualmente na forma e na intensidade) da banda de absorção no espectro de UV-vis acompanhando uma alteração de polaridade do meio.^{1,2} Compostos que apresentam este tipo de propriedade são largamente empregados como sondas para estudar as interações do tipo solvente-solvente e soluto-solvente.² Muitos destes compostos apresentam unidades elétron-doadoras e elétron-aceitadoras ligadas por um sistema conjugado. Neste trabalho foi sintetizada uma série de azocorantes (compostos **1b-10b**) apresentando grupos fenolatos como unidade elétron-doadora e grupos nitro na porção elétron-aceitadora e foram estudadas suas potencialidades como sondas solvatocromáticas.



Resultados e Discussão

Como se pode observar na **Figura 1**, os compostos **1b-10b** são solvatocromáticos e apresentam uma ampla variedade de cores em diferentes solventes.



(a) (b) (c) (d) (e)

Figura 1. Composto **1b** em: a) água, b) etanol, c) éter etílico, d) acetonitrila e e) *N,N*-dimetilformamida (DMF).

O comportamento solvatocromático dos corantes pôde ser quantificado através das variações observadas nos comprimentos de onda de absorção máxima (λ_{max}) das suas bandas solvatocromáticas em solventes diferentes (ver **Figura 2A** para o corante

6b). As bandas solvatocromáticas ocorrem devido a uma transição eletrônica $\pi\text{-}\pi^*$ da porção elétron-doadora para a porção elétron-aceitadora.

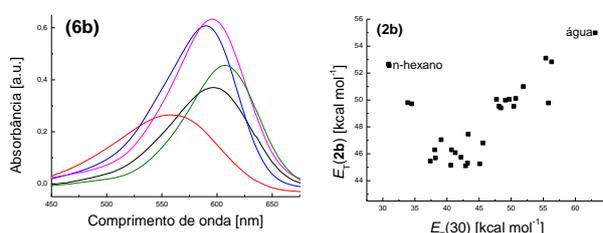


Figura 2. (A) Espectros de UV-vis para os composto **6** em água (—), etanol (—), éter etílico (—), acetonitrila (—) e dimetilformamida (—). (B) Valores de E_T (corante) para o corante **2** em vários solventes como uma função de E_T (30).

Os valores de λ_{max} em 28 solventes foram transformados em energias de transição molar^{1,2} para cada um dos corantes. Gráficos dos valores de E_T (corante) em função da escala de polaridade de Reichardt E_T (30)¹ revelaram a ocorrência de solvatocromismo reverso para todos os corantes (**Figura 2B** para o corante **2b**). Este é decorrente da solvatação diferencial dos estados fundamental e excitado da molécula. Em solventes apolares o estado excitado é mais bem estabilizado, enquanto que em solvente polares o estado fundamental é mais bem estabilizado. Os dados foram ajustados a equações multiparamétricas e os resultados evidenciaram que os corantes são bastante sensíveis à acidez do meio.

Conclusões

Foi sintetizada uma série de compostos os quais ao serem desprotonados geram corantes que exibem um importante solvatocromismo reverso e são bastante sensíveis à acidez do meio.

Agradecimentos

À Capes, ao CNPq e à UFSC pelo suporte financeiro.

¹ Machado V. G., Stock R. I., Reichardt C., *Chem. Rev.* 2014, 114, 10429-10475.

² Melo, C. E. A.; Nandi, L. G.; Dominguez, M.; Rezende, M. C.; Machado, V. G. *J. Phys. Org. Chem.* 2015, no prelo