

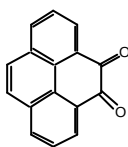
Estudo fotoquímico da pireno-4,5-diona

Ingrid S. M. Abreu (IC), Mônica M. Elias (IC), Suyane D.S. de Alvarenga (IC), David E. Nicodem (PQ), Nanci C. de Lucas (PQ), Rodrigo J. Correa (PQ)*, Simon J. Garden (PQ) e-mail: rcorrea@iq.ufrj.br.
Laboratório de Fotoquímica - Dept. Química Orgânica - Instituto de Química - UFRJ
Av. Brigadeiro Trompowsky s/n.º - Prédio do Centro de Tecnologia, Bloco A, sala 602 - Cidade Universitária
Rio de Janeiro, RJ, Brasil - CEP 21941-590 Telefone /Fax: (55)(21) 2562-7120
Palavras Chave: pirenoquinona, fotoquímica, fotólise por pulso de laser.

Introdução

A irradiação de cetonas aromáticas na presença de um substrato doador de átomo de hidrogênio como álcoois, hidrocarbonetos, fenóis, etc, normalmente resulta em processo fotoquímico primário de abstração de hidrogênio.¹ Esta reação tem sido extensamente estudada.² E conhecido o fato de que neste caso o estado excitado reativo é o estado excitado tripleto, e que a natureza do estado de menor energia controla a reatividade da cetona, sendo os estados de configuração $\pi\pi^*$ menos reativos do que os $n\pi^*$.^{2,3}

Neste trabalho nós apresentamos os resultados da reação fotoquímica de abstração de hidrogênio de pireno-4,5-diona (**1**), utilizando-se fotólise no estado estacionário e fotólise por pulso de laser de nanossegundos.



1

Resultados e Discussão

-Fotólise no estado estacionário: sabe-se que a fenantrenoquinona (**2**) em 2-propanol apresenta um rendimento quântico de 1. A reatividade de pireno-4,5-diona frente a 2-propanol foi feita a partir da comparação com **2**. Assim amostras das duas cetonas foram irradiadas em diversos intervalos de tempos e os seus consumos foram acompanhados por espectroscopia de UV-Visível em 405 nm, região onde as duas cetonas absorvem. A tabela 1 mostra o rendimento quântico das cetonas **1** e **2** calculado a partir do tratamento matemático dos espectros de UV-Visível, observando-se a diminuição da banda de 405 nm de **1** e **2** quando irradiadas frente a 2-propanol em diferentes doses de irradiação e por comparação direta dos coeficientes angulares.

Cetona	Coefficiente angular	Rendimento Quântico
1	0,0057	1
2	0,0046	1,2

Tabela 1: Rendimento quântico da cetona 1 comparada à cetona 2

-Fotólise por pulso de laser: FPL de **1** em acetonitrila levou a formação de um transiente com λ_{max} de absorção em 400 e 480 nm (figura 1), na presença de bons doadores de hidrogênio como 2-propanol observou-se o aparecimento de um novo transiente com λ_{max} em torno de 500 nm.

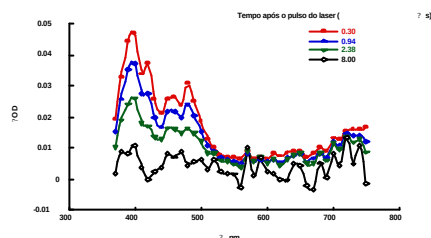


Figura 1: Espectro de absorção do transiente obtido após FPL de **1** em acetonitrila.

Conclusões

Para a reação de abstração de hidrogênio de **1** por 2-propanol obteve-se um valor de rendimento quântico igual a 1,2. Este valor mostra que a cetona **1** se mostrou ainda mais reativa do que a cetona **2**.

A irradiação por FPL de **1** em acetonitrila levou a formação de um transiente com absorção em 400 e 480 nm, caracterizado como o estado excitado tripleto de **1** e na presença de 2-propanol levou a formação de um novo transiente em 500 nm.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Dr. J.C. Scaiano pelo uso do sistema de FPL.



¹. Turro, N. J. *Modern Molecular Photochemistry* University Science Books, Editora Mill Valley Califórnia, **1991**.

². Wagner, P.; Park, B.-S. *Organic Photochemistry II* **1991**.

³. Gilbert, A.; Baggot, J. *Essential of Molecular Photochemistry*, Blackwell Science Ltda.; Oxford, 1991.

