

## Estudo espectroscópico do 3-[2-(dietilamina)etil]-7-hidroxi-4-metil-1,2-benzopirona usando absorção e emissão a 77K.

Alberto D.S. Marques(PQ)<sup>\*</sup>, Claudenor D. S. Piedade(PG), Luiza G. Pereira(PQ), Margarida C. Souza(PQ) ([amarques@uea.edu.br](mailto:amarques@uea.edu.br))

Laboratório de Tecnologia com Moléculas Bioativas, situado na Universidade do Estado do Amazonas, Escola Superior de Tecnologia, Av. Darcy Vargas No. 1200, Parque 10, CEP: 69055-035, Manaus, AM

Palavras Chave: propriedades fotofísicas, teoria do funcional da densidade, ZINDO, cumarina.

### Introdução

Recentemente <sup>(1)</sup> um total de 51 cumarinas simples, sintéticas e naturais, foram testadas, com relação as suas potências antimutagênicas, contra o 2-amino-3-metilimidazo[4,5-f]quinolina, (IQ), em *Salmonella typhimurium* TA 98<sup>(2)</sup> e somente sete desses compostos foram inativos entre os quais a 3-[2-(dietilamina)etil]-7-hidroxi-4-metil-1,2-benzopirona, (DHMC). Aqui foi feito um estudo das propriedades fotofísicas das espécies do DHMC usando as espectroscopias de emissão a 77K, absorção e infravermelho e a interpretação dos resultados foi feita com a ajuda de cálculos ZINDO e Teoria do Funcional da Densidade, (TFD) com a função de base 6-31G\*.

### Resultados e Discussão

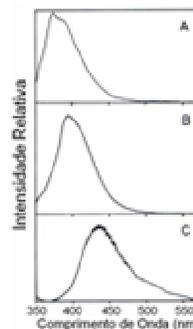
Os espectros de absorção mostraram que o DHMC dissolvido em etanol e em água tem o mesmo cromóforo absorptivo e está situado no anel da pirona. Os espectros de emissão apresentam uma fosforescência muito fraca, caracterizando um comportamento fotofísico completamente diferente das cumarinas, Figura 1. Os estados eletrônicos excitados de menores energias S<sub>1</sub> e T<sub>1</sub> são (π,π\*). Os cálculos com o ZINDO indicaram que a transição de transferência de carga entre N da amina terciária e o C<sub>4</sub> do anel da pirona é importante para as espécies base livre e DHMC-H (Ligação de hidrogênio), enquanto que os cálculos com a TFD essa transição não aparece, mas as transições da carbonila para a dupla ligação da

**Tabela 1.** Energias de excitação (E, em eV) e forças do oscilador (f-valor) de algumas transição eletrônica de menor energia de DHMC base livre; ligada por ligação de hidrogênio com etanol e monocátion calculado pelo ZINDO, comparando com espectro de absorção (Exp.) do DHMC dissolvido em etanol e água.

| Base livre |          |        |         | Ligação de Hidrogênio |          |        |         | Monocátion |         |          |        |         |           |
|------------|----------|--------|---------|-----------------------|----------|--------|---------|------------|---------|----------|--------|---------|-----------|
| Trans.     | En. (eV) | C.P.T. | f-valor | Trans.                | En. (eV) | C.P.T. | f-valor | Exp. (eV)  | Trans.  | En. (eV) | C.P.T. | f-valor | Exp. (eV) |
| Singlet    |          |        |         | Singlet               |          |        |         |            | Singlet |          |        |         |           |
| S1(ππ*)    | 4.327    | N19→C4 | 0.3097  | S1(ππ*)               | 4.323    | C3→C4  | 0.6773  | 3.780      | S1(ππ*) | 3.941    | C5→C4  | 0.8103  | 3.827     |
| S2(ππ*)    | 4.362    | N19→C4 | 0.5794  | S2(ππ*)               | 4.336    | N19→C4 | 0.2224  | ----       | S2(ππ*) | 4.657    | C9→C4  | 0.1109  | 4.912     |
| S3(ππ*)    | 5.176    | C9→C4  | 0.1909  | S3(ππ*)               | 5.038    | C9→C4  | 0.1828  | 4.864      | S3(ππ*) | 5.090    | O11→C4 | 0.0007  | ----      |
| Triplet    |          |        |         | Triplet               |          |        |         |            | Triplet |          |        |         |           |
| T1(ππ*)    | 3.265    | N19→C4 |         | T1(ππ*)               | 3.076    | C3→C4  |         |            | T1(ππ*) | 2.674    | C5→C4  |         |           |
| T2(ππ*)    | 3.600    | C9→C10 |         | T2(ππ*)               | 3.607    | C9→C10 |         |            | T2(ππ*) | 3.923    | C5→C10 |         |           |
| T3(ππ*)    | 3.857    | N19→C4 |         | T3(ππ*)               | 4.018    | N19→C4 |         |            | T3(ππ*) | 3.977    | C9→C4  |         |           |

\* trans. – transição; En. – Energia; C.P.T. - contribuição principal para transição.

pirona estão relacionadas com os estado S<sub>1</sub> e T<sub>1</sub> das espécies base livre e monocátion.



**Figura 1.** Espectro de emissão da DHMC base livre a 77 K: (A) em etanol a  $1 \times 10^{-4}$  M; (B) em etanol + um gota de 2,2,2-trifluoroetanol a  $1 \times 10^{-4}$  M; (C) em água  $1 \times 10^{-3}$  M.

### Conclusões

O DHMC apresenta duas espécies, o monocátion e o complexo com ligação de hidrogênio. Usando sondas fluorescentes verificou-se que a espécie do DHMC no interior da micela é a DHMC-H.

### Agradecimentos

A.D.S.M, agradece o apoio financeiro(553292/2005-6 CT-AMAZÔNIA/MCT/CNPq).



<sup>1</sup> Marques A.D.S., Marques G.S.S., *Photochem. and Photobiol.* **1994**, 59(2), 153.

<sup>2</sup> Marques, A.D.S., Lin, C.T., *J. of Photochem and Photobiol. B Biology* **2004**, 74, 63.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.  
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.