

# SÍNTESE E ESTUDOS FOTOFÍSICOS DE DERIVADOS DO FULERENO- $C_{60}$ FUNCIONALIZADOS COM TETRAZÓIS E OXADIAZOL

Leandro J. dos Santos<sup>1</sup>(PG)\*, Ana S. P. Gonçalves<sup>2</sup>(PG), Klaus Krambrock<sup>2</sup>(PQ), Maurício V. B. Pinheiro<sup>2</sup>(PQ), Rosemeire B. Alves<sup>1</sup>(PQ), Rossimiriam P. de Freitas<sup>1</sup>(PQ).

[ljqimica@yahoo.com.br](mailto:ljqimica@yahoo.com.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química-ICEX, UFMG CEP.: 31270-901, Belo Horizonte-MG, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Física-ICEX, UFMG CEP.: 31270-901, Belo Horizonte-MG, Brasil.

Palavras Chave:  $C_{60}$ , espécies reativas de oxigênio.

## Introdução

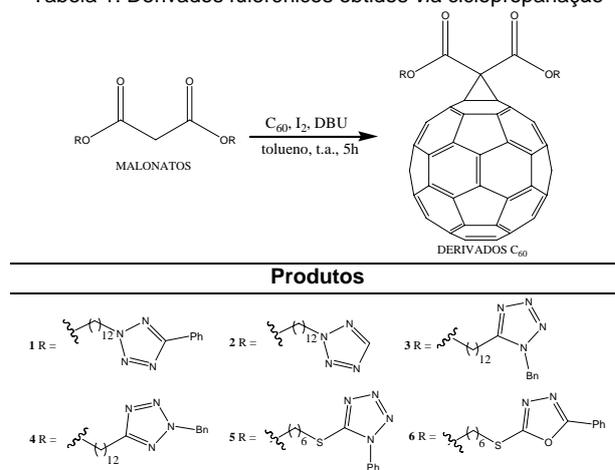
O fulereno- $C_{60}$ , com suas propriedades físico-químicas únicas, se tornou um composto de grande interesse desde sua descoberta em 1985. Entretanto, sua baixa solubilidade em solventes usuais sempre foi um fator limitante no estudo de suas aplicações. Sendo assim, a funcionalização do  $C_{60}$  tornou-se uma das estratégias mais utilizadas para explorar suas possíveis aplicações. Desta forma, vários derivados do  $C_{60}$  têm sido sintetizados nos últimos anos e apresentado potencial aplicação tanto na área biológica quanto na química de materiais como, por exemplo, na construção de fotocélulas e como limitadores ópticos<sup>1</sup>. Com o objetivo de se obter derivados fullerênicos com solubilidade adequada para o estudo de suas propriedades físico-químicas, foram sintetizados neste trabalho seis novos derivados do  $C_{60}$  funcionalizados com tetrazóis e oxadiazol. Estes derivados azólicos apresentaram boa solubilidade em solventes orgânicos e, visando uma possível aplicação destes compostos, foi realizada a investigação da fotossensibilidade destes compostos por meio de ressonância paramagnética eletrônica (RPE).

## Resultados e Discussão

Os derivados azólicos do  $C_{60}$  (**1-6**) foram obtidos por meio de reação de ciclopropanação entre malonatos derivados de tetrazóis e oxadiazol,  $C_{60}$ , DBU,  $I_2$  e tolueno como solvente, Tabela 1. Os malonatos foram obtidos por reação entre o dicloreto de malonila comercial e alcoóis funcionalizados com tetrazóis, obtidos por sua vez ou por cicloadição ou por alquilação de tetrazóis/oxadiazol comerciais. Todos os compostos obtidos foram caracterizados espectroscopicamente por ressonância magnética nuclear uni e bidimensional. Para o estudo das propriedades fotofísicas dos fulerenos funcionalizados com os azóis, utilizou-se a técnica de *spin-trapping* por RPE, usando irradiação com laser de comprimento de onda de 375 nm e como *spin trap* a  $\alpha$ -fenil-*N*-t-butilnitrona (PBN). Quando as soluções de PBN/derivados- $C_{60}$  foram irradiadas com o laser (16 mW) observou-se, a partir do espectro de RPE, que a intensidade dos sinais dos spin-adutos de PBN aumentaram

consideravelmente com a iluminação. Este resultado sugere que espécies reativas de oxigênio (EROs) estão sendo produzidas na solução, sob iluminação com o laser.

Tabela 1: Derivados fullerênicos obtidos via ciclopropanação



### Produtos

Foi possível observar pelos resultados obtidos por RPE dos derivados fullerênicos, que a quantidade total de EROs produzidas pela maioria dos derivados azólicos foram maiores em relação ao  $C_{60}$ , Tabela 2.

Tabela 2: Dados de RPE dos derivados fullerênicos e  $C_{60}$

Composto	EROs ( $10^{16}$ spin adutos/mL)	$C^{16}$ de velocidade ( $10^2$ mL/mol.s)
$C_{60}$	1,747±0,035	6,14±1,45
<b>1</b>	1,091±0,025	8,82±0,75
<b>2</b>	3,146±0,024	3,59±2,38
<b>3</b>	4,234±0,061	3,48±4,68
<b>4</b>	2,557±0,088	3,57±3,04
<b>5</b>	0,520±0,045	11,8±0,21
<b>6</b>	2,345±0,077	3,72±1,95

## Conclusões

Neste trabalho foram obtidos seis novos derivados fullerênicos. Os resultados de RPE sugerem que EROs estão sendo produzidas nas soluções dos derivados azólicos, sendo assim, estes derivados apresentam-se como potenciais fotossensibilizadores, podendo ser utilizados topicamente em terapia fotodinâmica.

## Agradecimentos

Ao CNPq e FAPEMIG pelo suporte financeiro concedido.

<sup>1</sup>Nierengarten, J.F. *New Journal of Chemistry* **2004**, 28, 1177.