

Síntese, Caracterização e Estudo Fotofísico de Corantes Fluorescentes do tipo Triazinil-benzazólicos para marcação de Matrizes de Celulose

Fábio dos S. Grasel¹ (PG)*, Valter Stefani¹ (PQ).

E-mail: fsgrasel@yahoo.com.br

(1) Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9500. CP 14003 CEP 91501-970, Porto Alegre, Brasil.

Palavras Chave: Fluorescência, ESIPT, Benzazol.

Introdução

Corantes triazínicos monossustituídos são moléculas eletrofílicas com a capacidade de formar ligação covalente com o grupo hidroxila das fibras celulósicas, com grupo amino, hidroxila e tiol das fibras protéicas e também com o grupo amino das poliamidas.¹ Por outro lado, corantes fluorescentes do tipo 2-(2'-hidroxifenil)benzazóis caracterizam-se por apresentar propriedades fotofísicas muito interessantes, como uma intensa emissão de fluorescência com um grande deslocamento de Stokes devido a um mecanismo de transferência protônica intramolecular no estado eletrônico excitado (ESIPT).²

Neste trabalho apresentamos a síntese, caracterização e estudo fotofísico de novos corantes triazinil-benzazólicos fluorescentes por ESIPT.

Resultados e Discussão

A síntese dos novos corantes foi realizada conforme figura 1.

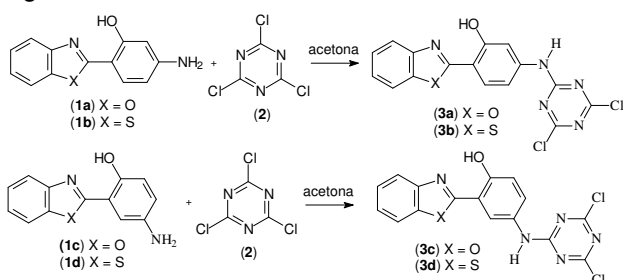


Figura 1. Esquemas sintéticos dos corantes triazinil-benzazólicos.

Os produtos foram obtidos com rendimentos de 70-95% e foram caracterizados por IV, ¹H-RMN, UV-Vis e emissão de fluorescência. Na Tabela 1 são apresentados os máximos de absorção, os máximos de emissão, os deslocamentos de Stokes e os rendimentos quânticos de fluorescência dos produtos em solução. Os derivados **3a-d** apresentam um máximo de absorção (λ_{abs}) na faixa de 337-357 nm. Os máximos de emissão (λ_{em}) ficaram na faixa de 463-543 nm. O deslocamento de Stokes ficou entre 110-191 nm. Os derivados com grupo amino na posição 5' (**3c-d**) apresentaram maior deslocamento de Stokes ($\Delta\lambda_{ST}$) que seus

análogos com grupo amino na posição 4' (**3a-b**), sendo maior esta diferença quando se tem um derivado benzotiazólico (**3b** e **3d**) do que um benzoxazólico (**3a** e **3c**). Os rendimentos quânticos de fluorescência (ϕ_{fl}), apresentaram resultados na faixa de 0,003-0,061.

Tabela 1. Dados de estudo fotofísico dos corantes **3a-d**.

Corante	Solvente	λ_{abs} (nm)	λ_{em} (nm)	$\Delta\lambda_{ST}$ (nm)	(ϕ_{fl})
3a	CHCl ₃	357	467	110	0,061
	MeOH	353	463	110	0,016
3b	CHCl ₃	337	507	170	0,043
	MeOH	339	512	173	0,011
3c	CHCl ₃	354	500	146	0,009
	MeOH	352	498	146	0,006
3d	CHCl ₃	354	540	186	0,008
	MeOH	352	543	191	0,006

Conclusões

Quatro novos derivados triazinil-benzazólicos fluorescentes por ESIPT foram sintetizados com bons rendimentos.

Os derivados 5'-substituídos possuem maior deslocamento de Stokes que seus análogos na posição 4', sendo este efeito mais pronunciado para derivados benzotiazólicos do que os derivados benzoxazólicos.

Os derivados 4'-substituídos apresentaram maior rendimento quântico de fluorescência do que seus análogos na posição 5'.

Foram obtidos novos materiais celulósicos fluorescentes, estáveis ao calor, à luz ambiente e a lavagens com detergentes usuais.

Agradecimentos

CNPq e FAPERGS.

¹ Goresek, M. *Dyes Pigments*. **1999**, 40, 225.

² Acuña, A. U.; Costela, A.; Muñoz, J. M. *J. Phys. Chem.* **1986**, 90, 2807.