

Caracterização fotofísica de corantes derivados do ácido esquárico fluorescentes na região do vermelho e infravermelho

Diego S. Pisoni (PQ),^{1,*} Marluza P. Abreu (IC),¹ Leandra F. Campo (PQ),¹ Cesar L. Petzhold (PQ),² Fabiano S. Rodembusch (PQ)¹

diego_qui@yahoo.com.br

¹Laboratório de Novos Materiais Orgânicos, ²Laboratório de Síntese Orgânica e Polímeros - IQ/UFRGS. Av. Bento Gonçalves, 9500. Bairro Agronomia. CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil.

Palavras Chave: esquarainas, fotofísica, deslocamento batocrômico

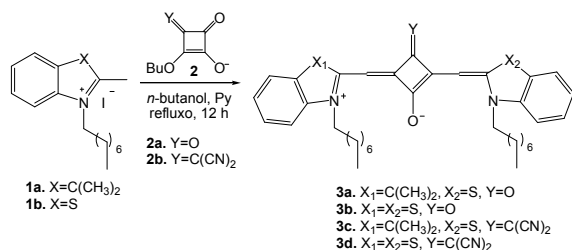
Introdução

Esquarainas são uma classe de compostos orgânicos que se caracterizam por intensa absorção na região do visível em regiões acima de 600 nm, apresentando igualmente elevados valores para absorvidade molar ($\epsilon > 10^5 \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$), intensa emissão de fluorescência e fotoestabilidade.¹ Devido a estas propriedades, estes compostos têm sido utilizados como materiais para conversão fotoelétrica, substratos para células fotovoltaicas, fotorreceptores e fotocondutores.²

Neste trabalho apresentamos a caracterização fotofísica de esquarainas fluorescentes na região do vermelho e infravermelho, obtidas através da reação de condensação entre indóis ou benzotiazóis quaternizados com derivados do ácido esquárico.

Resultados e Discussão

As esquarainas **3a-d** foram preparadas através da condensação de **1a** (ou **1b**) com **2a** (ou **2b**), conforme metodologias padrão descritas na literatura (Esquema 1).³



Esquema 1

Os corantes **3a** e **3b** apresentaram um máximo de emissão de fluorescência na região do vermelho (640 - 680 nm, Tabelas 1 e 2) e os corantes **3c** e **3d** na região do infravermelho (703 - 724 nm, Tabelas 3 e 4). Os compostos mostraram um coeficiente de absorção molar (ϵ) característico de transições eletrônicas do tipo $\pi \rightarrow \pi^*$ ($\sim 10^5 \text{ M}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$) e um deslocamento Stokes ($\Delta\lambda_{ST}$) pequeno, conforme esperado. Além disso, evidenciou-se que a substituição de um anel indólico por um anel benzotiazólico, bem como a substituição do átomo de oxigênio pelo grupo [C(CN)₂] no anel central da

esquarina, resultaram em um deslocamento para o vermelho na emissão dos corantes.

Tabela 1. Dados fotofísicos do corante **3a**.

Solv.	λ_{abs} (nm)	$\epsilon \times 10^5$ (M ⁻¹ ·cm ⁻¹)	λ_{em} (nm)	$\Delta\lambda_{ST}$ (nm)
EtOH	642	1,91	651	9
CHCl ₃	651	2,35	661	10
Dioxano	655	2,54	665	10

Tabela 2. Dados fotofísicos do corante **3b**.

Solv.	λ_{abs} (nm)	$\epsilon \times 10^5$ (M ⁻¹ ·cm ⁻¹)	λ_{em} (nm)	$\Delta\lambda_{ST}$ (nm)
EtOH	656	3,02	665	9
CHCl ₃	670	2,38	676	6
Dioxano	677	2,23	684	8

Tabela 3. Dados fotofísicos do corante **3c**.

Solv.	λ_{abs} (nm)	$\epsilon \times 10^5$ (M ⁻¹ ·cm ⁻¹)	λ_{em} (nm)	$\Delta\lambda_{ST}$ (nm)
DMSO	681	1,42	703	22
CHCl ₃	690	1,39	708	18
Dioxano	694	1,46	708	14

Tabela 4. Dados fotofísicos do corante **3d**.

Solv.	λ_{abs} (nm)	$\epsilon \times 10^5$ (M ⁻¹ ·cm ⁻¹)	λ_{em} (nm)	$\Delta\lambda_{ST}$ (nm)
DMSO	696	1,37	717	21
CHCl ₃	704	1,78	724	20
Dioxano	709	1,61	723	14

Conclusões

O estudo fotofísico das esquarainas **3a-d** mostra que a existência de anéis benzotiazólicos e do grupo [C(CN)₂] na estrutura do corante, promove um deslocamento batocrômico no valor da emissão de fluorescência.

Agradecimentos

CNPq, Instituto de Inovação em Diagnósticos para a Saúde Pública (INDI-Saúde).

¹ Sreejith, S. *et al.*, *J. Mater. Chem.* **2008**, *18*, 264.

² Oswald, B. *et al.*, *Bioconjugate Chem.* **1999**, *10*, 925.

³ Volkova, K. D. *et al.*, *Dyes Pigments*, **2007**, *72*, 285.