

Transferência protônica intramolecular no estado excitado (ESIPT) em Imina derivada do benzoxazol

Fabiano da Silveira Santos^{1,2,*} (PG), Valter Stefani¹ (PQ), Edilson V. Benvenutti² (PQ), Fabiano S. Rodembusch¹ (PQ)

(fabiano@ufrgs.br)

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

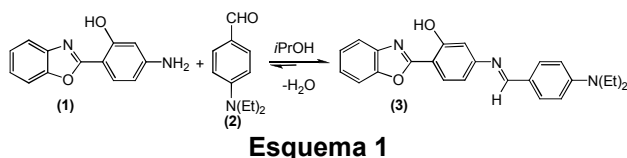
Palavras Chave: Fotofísica, Benzoxazol, Base de Schiff, Dupla emissão.

Introdução

O comportamento fotofísico de diferentes compostos tem sido investigado nos últimos tempos.¹ Existem moléculas que no estado excitado modificam não somente a estrutura eletrônica, mas também a estrutura molecular pela transferência de um próton de um grupo doador (-OH) para um grupo aceptor (-N=) a partir de uma ligação hidrogênio intramolecular (ESIPT).² O presente trabalho apresenta a síntese de uma nova imina e o seu estudo fotofísico através de espectroscopia de absorção no UV-Vis e emissão de fluorescência.

Resultados e Discussão

A nova imina foi sintetizada conforme apresentado no Esquema 1.³



Na Figura 1 estão apresentados os resultados do estudo fotofísico em 1,4-Dioxano (DIO), Etanol (EtOH) e acetonitrila (MeCN), onde se observa um máximo de absorção em ~389 nm (λ_1), referente a uma estrutura mais conjugada.

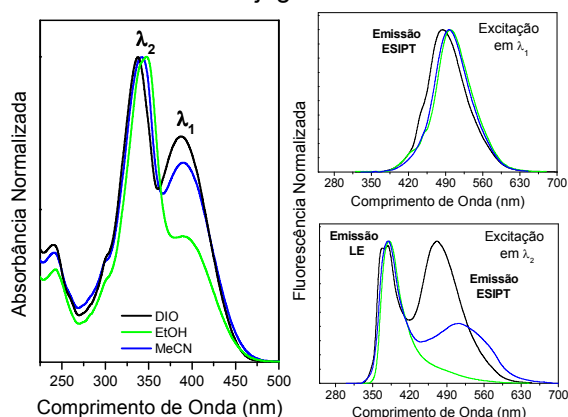


Figura 1. Espectros de absorção no UV-Vis (esq.) e emissão de fluorescência (dir.).

Além disso, observa-se uma banda mais intensa (~343 nm) deslocada para o azul (λ_2), referente a

34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

uma estrutura torcida, de menor conjugação, ambas com coeficientes de absorção molar referentes a transições eletrônicas do tipo $\pi \rightarrow \pi^*$ ($\sim 10^4 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$).

A partir de uma excitação em λ_1 tem-se um máximo de emissão em ~499 nm com um grande deslocamento de Stokes (~109 nm), característico de mecanismo do tipo ESIPT. Entretanto, quando excitado em λ_2 ocorre dupla emissão: emissão normal (LE) do conformero enol (~377 nm) e emissão ESIPT de outro tautômero ceto (~488 nm), que se forma a partir da estrutura torcida.¹

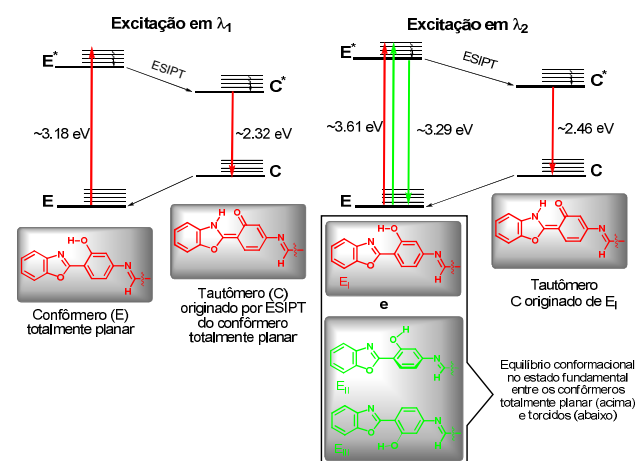


Figura 2. Esquema do mecanismo ESIPT da imina 3.

Conclusões

Foram observadas duas conformações para o composto em solução no estado fundamental, uma mais planar e outra torcida, referentes a duas conjugações distintas, que refletem uma emissão de fluorescência do tipo ESIPT e outra do tipo LE, mostrando que o solvente desempenha um papel fundamental na fotofísica deste corante.

Agradecimentos

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

¹ Lakowicz, J.R. (Author). *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, Springer; 3rd edition (September 15, 2006).

² Rodembusch, F.S.; Campo, L.F. *et al. J. Lumin.* **2007**, *126*, 728. (e referências citadas)

³ Bhat, K. *et al. Mater. Chem. Phys.* **1996**, *44*, 261.