

Estudo fotofísico do derivado 3-[2''-tioxo-3''-(cicloexilaminometil)1'',3'',4''-oxadiazolil-5''-il]-1-(4'-dimetilaminofenil)- β -carbolina

Elton Mateus Varela^{1*} (IC), Franciele Cristina Savariz² (PG), Maria Helena Sarragiotto² (PQ) e Maurício Ferreira da Rosa¹ (PQ). ma_fernandinho@hotmail.com

¹Química/ Universidade Estadual do Oeste do Paraná- Rua da Faculdade 645, CEP 85903-000, Toledo (PR), Brasil.

²Departamento de Química - Universidade Estadual de Maringá- Maringá-PR.

Palavras Chave: Solvatocromismo, sonda molecular, absorção, fluorescência.

Introdução

β -carbolinas são alcalóides de ocorrência natural que apresentam o sistema tricíclico pirido(3,4-b)indol. Esta estrutura básica também é conhecida como norharmano. Derivados β -carbolínicos são compostos largamente distribuídos na natureza estando presentes em diversas espécies de plantas e são produzidos endogenamente em tecidos humanos e animais como produtos do metabolismo secundário. Acredita-se que o aminoácido triptofano seja o principal precursor biológico destas estruturas no organismo e nos tecidos. Smith¹ em sua revisão apresenta a reação do triptofano com β -cetoácidos (ácido pirúvico) fornecendo um derivado β -carbolínico que possui propriedades fluorescentes. Derivados β -carbolínicos apresentam uma diversidade de atividades biológicas e farmacológicas², podendo atuar como hipotensivos, antivirais, antimicrobianos e alucinógenos. Estes relatos nos encorajaram a realizar estudos espectroscópicos de absorção e fluorescência de uma série de derivados β -carbolínicos sintetizados por Savariz³ que apresentaram atividade antitumoral contra melanoma, pulmão e mama, entre outros.

Resultados e Discussão

O composto utilizado neste estudo, 3-[2''-tioxo-3''-(cicloexilaminometil)-1'',3'',4''-oxadiazolil-5''-il]-1-(4'-dimetilaminofenil)- β -carbolina, é aqui denominado como cicloexil/DMAB.

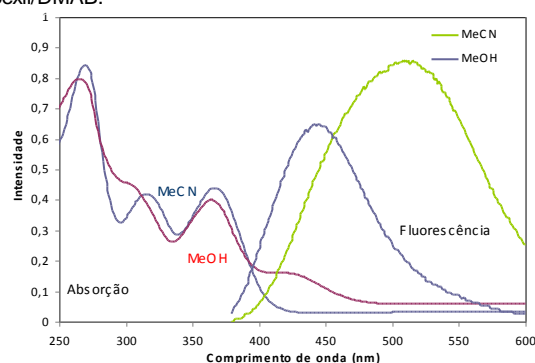
O cicloexil/DMAB foi dissolvido em 25 mL de clorofórmio e, em seguida, separado em cinco alíquotas de 0,25 mL. Após a evaporação do clorofórmio, cada amostra foi dissolvida em 10 mL de acetonitrila (MeCN), metanol (MeOH), tetrahydrofurano (THF), dioxano (Diox) e dimetilformamida (DMF), respectivamente, para posterior obtenção dos espectros eletrônicos na faixa entre 190- 600 nm.

Os espectros de fluorescência foram obtidos para cada mistura, excitando-se a amostra em 369 nm e obtendo-se o espectro de emissão entre 379- 600 nm (Figura 1).

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Todos os espectros de absorção, excetuando-se aquele obtido em MeOH, apresentaram o mesmo perfil. Neste solvente foi observado o aparecimento de uma banda mais deslocada para o vermelho (426 nm).

Figura 1. Espectros de absorção e fluorescência obtidos para o cicloexil/DMAB.



Comparando-se os espectros de fluorescência obtidos, observa-se um deslocamento hipsocrômico nos máximos de aproximadamente 66 nm, quando comparadas as soluções em MeOH e MeCN. Segundo Mallick *et al.*⁴, β -carbolinas são sensíveis ao ambiente (photoswitching) uma vez que seu equilíbrio prototrópico é afetado por fatores externos, tais como pH, polaridade do meio, entre outros. A presença de deslocamentos espectrais associados a mudança no ambiente são características de compostos solvatocrômicos.

Conclusões

O derivado cicloexil/DMAB apresenta propriedades espectrais diferentes dependendo do ambiente presente, o que possibilita o emprego destes compostos como sondas moleculares de ambiente. Entretanto, são necessários mais estudos acerca das propriedades do composto para que esta determinação seja mais concisa.

Agradecimentos

PET/SESu/MEC e Fundação Araucária.

¹Smith, G.J.; *et. al. J. Photochem. Photobiol. B.* **1995**, *27*, 187.

²Formagio, A. N.; *et. al. Bioorg. Med. Chem.* **2008**, *16*, 9660

³Savariz, F.C.; *et.al. J. Braz. Chem. Soc.* **2010**, *21*, 288.

⁴Mallick *et al. J. Photochem. Photobiol. C* **2010**, *11*, 62.