

Natália Goedel Medeiros (IC), Fabiano S. Santos (PG), Fabiano S. Rodembusch (PQ)

Grupo de Pesquisa em Novos Materiais Orgânicos e Fotoquímica - IQ/UFRGS

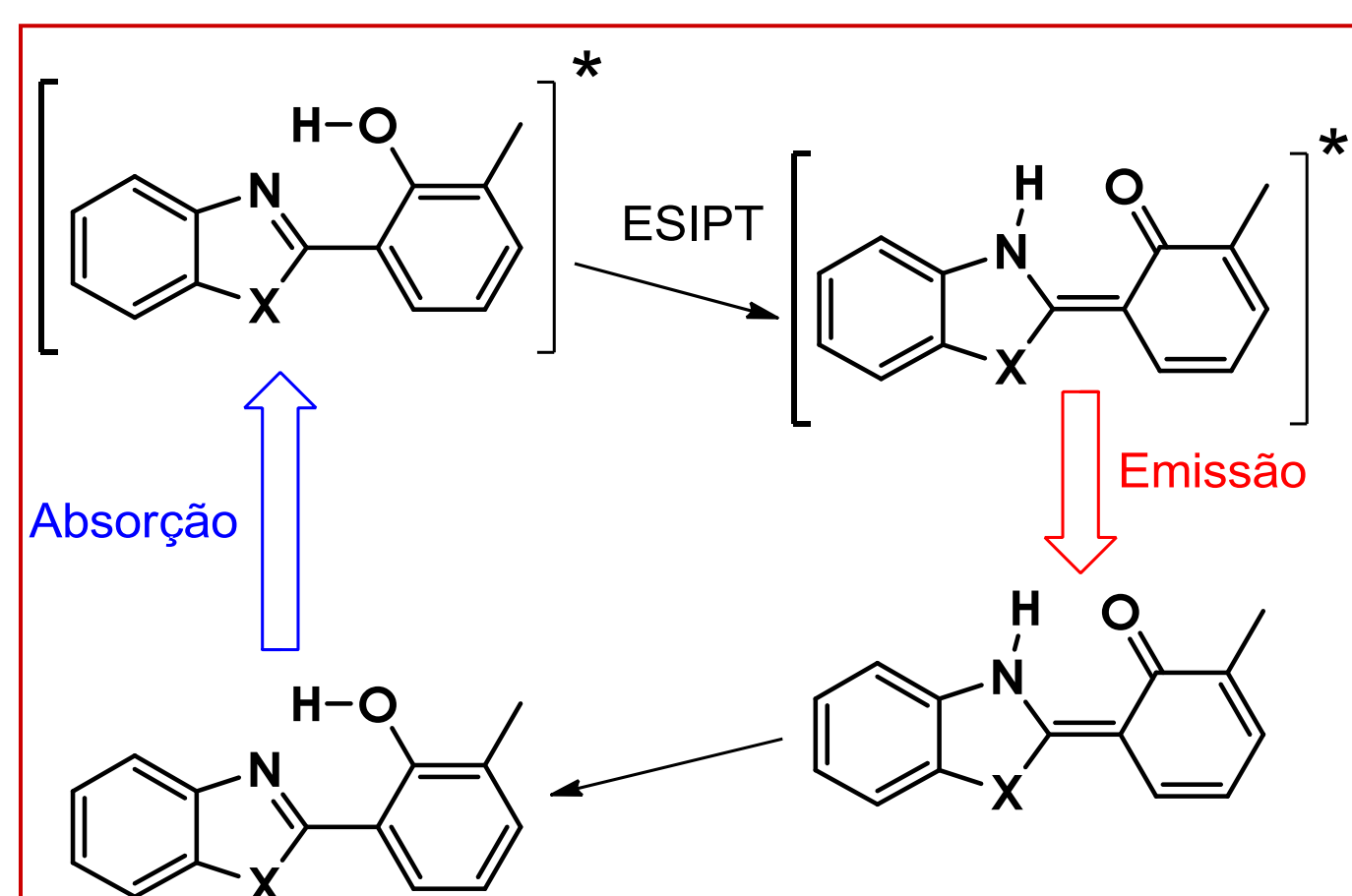
Av. Bento Gonçalves, 9500 - Porto Alegre-RS - CEP 91501-970

http://www.iq.ufrgs.br/Inmo

E-mail: natalia.medeiros@ufrgs.br

## Introdução

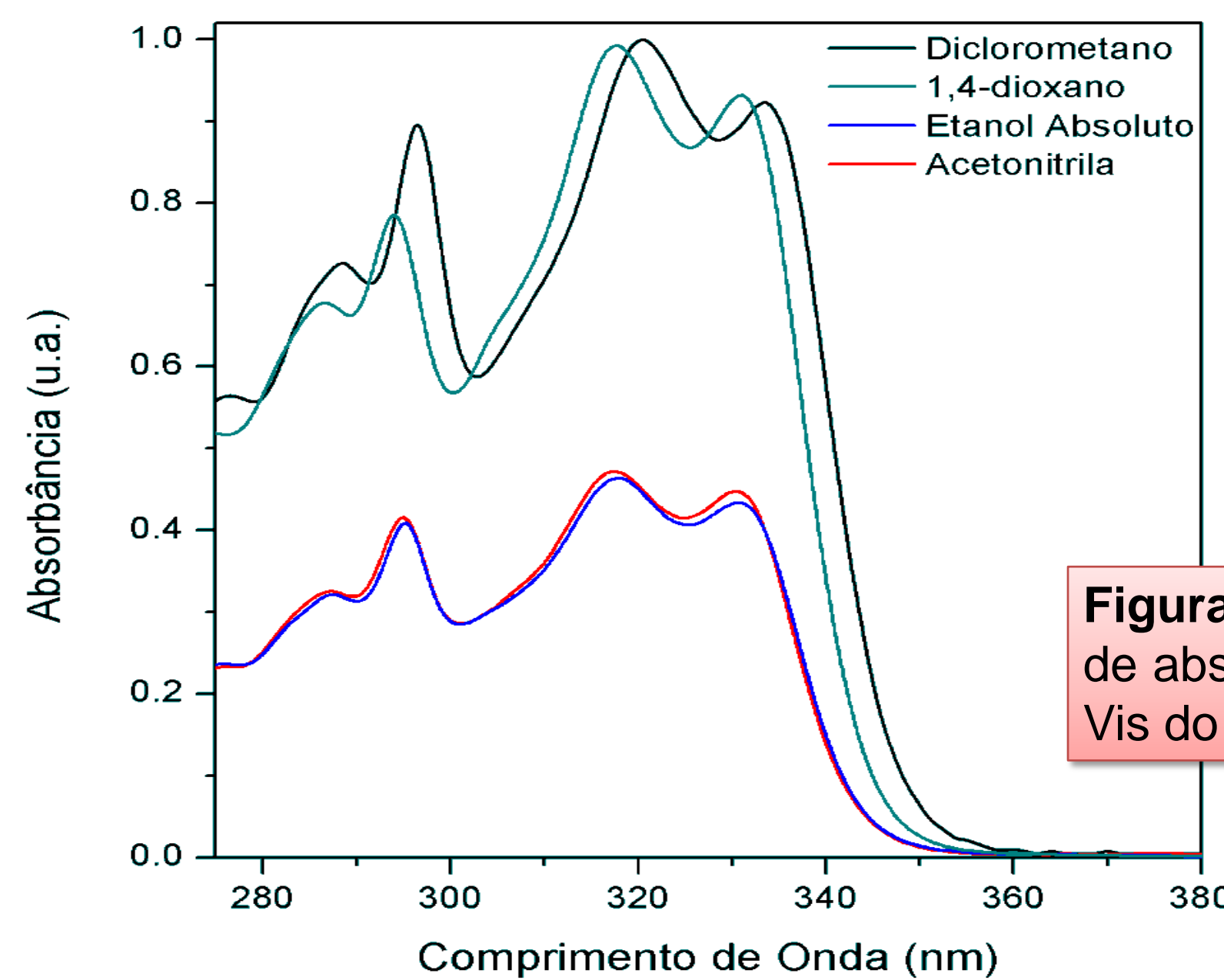
Heterociclos do tipo 2-(2'-hidroxifenil)benzazóis são compostos fotoativos que emitem fluorescência com grande deslocamento de Stokes, permitindo potenciais aplicações para estes compostos.<sup>1</sup> Este comportamento fotofísico é devido a um fototautomerismo no estado excitado, conhecido por ESIPT (*Excited State Intramolecular Proton Transfer*).<sup>1</sup>



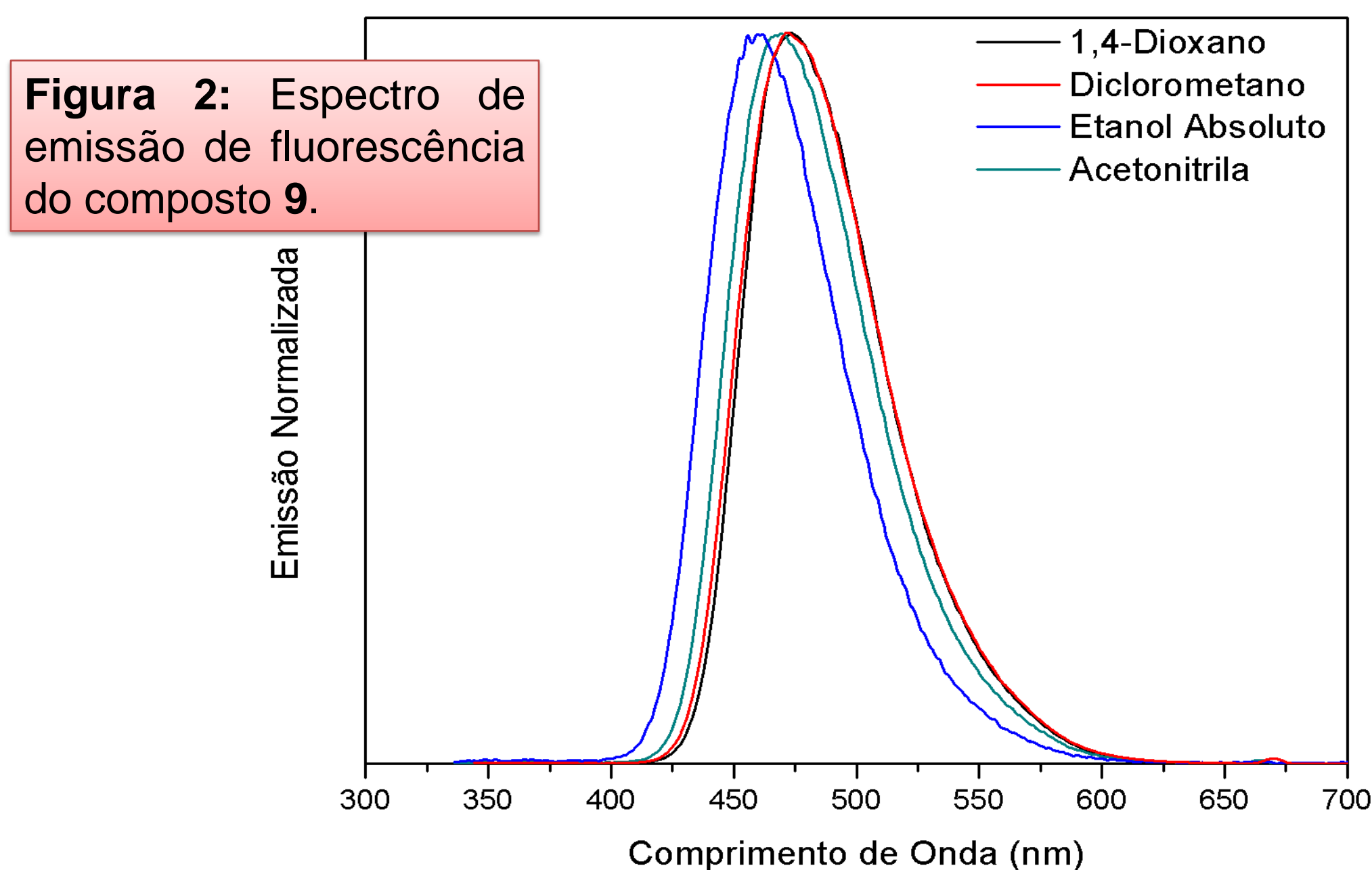
**Mecanismo de ESIPT**

Estes compostos são de interesse sintético, tendo em vista que podem ser usados como blocos construtores para a obtenção de novos compostos fluorescentes.<sup>2</sup>

Este trabalho possui como objetivo principal a síntese e caracterização de derivados benzazólicos fluorescentes por ESIPT, para posterior síntese regioseletiva de aldeídos fluorescentes.



**Figura 1:** Espectro de absorção de UV-Vis do composto 9.



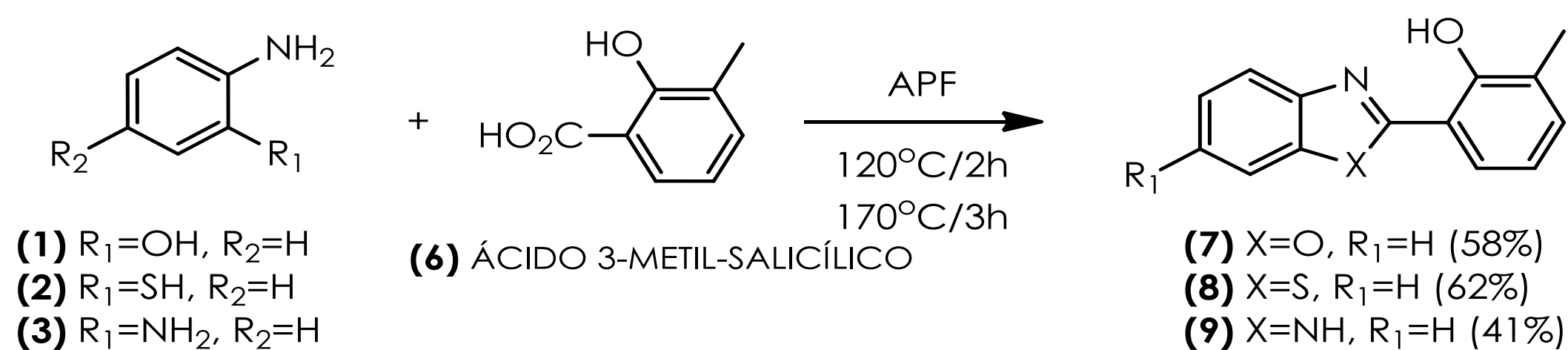
**Figura 2:** Espectro de emissão de fluorescência do composto 9.

A emissão de fluorescência apresentou perfil similar para os três compostos, com emissão na região do visível: ~490 nm (7), ~530 nm (8) e ~470 nm (9).

O deslocamento de Stokes calculado está entre 130-197 nm, o que está de acordo com o esperado para o mecanismo ESIPT.

## Experimental

Foram sintetizados os derivados metilados (7-9) a partir de reação de condensação das correspondentes aminas *orto*-substituídas (1-3) com o ácido 3-metil-salicílico (6) em ácido polifosfórico (APF) utilizando rampa de aquecimento de 120-170°C durante 5 horas.<sup>3</sup>



**Esquema 1.** Reação de obtenção dos derivados (7-9).

A mistura resultante foi vertida em gelo, neutralizada e filtrada. Os sólidos obtidos foram purificados por cromatografia em coluna. Fase estacionária: sílica. Fase móvel: (7) e (8): 5% acetato de etila em hexano e (9): diclorometano.

## Resultados

A caracterização espectroscópica (FTIR, <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C RMN) comprovou a estruturas esperadas para os compostos obtidos. Os produtos foram obtidos com rendimentos similares aos reportados na literatura (40-60%).

Todos compostos apresentaram perfil similar para o espectro de absorção de UV-Vis (Figura 1), com absorção na região do ultravioleta (~330-340 nm) referente a transições eletrônicas do tipo <sup>1</sup>π-π\*.

## Conclusão

Foram sintetizados derivados metilados fluorescentes com bons rendimentos. A metilação do anel fenólico não influenciou o comportamento fotofísico desses corantes. Estes compostos serão formilados em uma etapa posterior para a obtenção de novos blocos de construção fotoativos para obtenção de estruturas mais complexas.

## Referências

- Wu, J.; Liu, W.; Ge, J. *et al. Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3483.
- Lakowicz, J.R. (Editor). In: *Topics in Fluorescence Spectroscopy, Vol. 4: Probe Design and Chemical Sensing*. Publisher: Springer; **1994** edition.
- Barni, E.; Savarino, P.; Marzona, M.; *et al. J. Heter. Chem.* **1983**, *20*, 1517
- Rodembusch, F.S.; Campo, L.F. *et al. J. Lumin.* **2007**, *126*, 728.

## Agradecimentos

