

Cláudia de Ávila Braga(IC)*, Fabiano da Silveira Santos (PG), Fabiano Severo Rodembusch (PQ)

Grupo de Pesquisa em Fotoquímica Orgânica Aplicada – IQ/UFRGS

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

<http://www.gpfotoquimica.com> e-mail: claudia.avila@ufrgs.br

Introdução

A obtenção das constantes de acidez no estados fundamental e excitado através de espectroscopia eletrônica permite visualizar potenciais aplicações frente a ambientes de diferentes polaridades. Neste contexto, compostos do tipo flavonóides apresentam destaque pela dependência das propriedades ópticas com a variação do pH.¹

Assim, este trabalho visa obter os respectivos valores de pKa no estado fundamental e excitado de quatro diferentes flavonóides fotoativos (**Figura 1**) via espectroscopia de absorção na região do UV-Vis com variação do pH do meio para posterior aplicação como sensores ópticos.^{2,3}

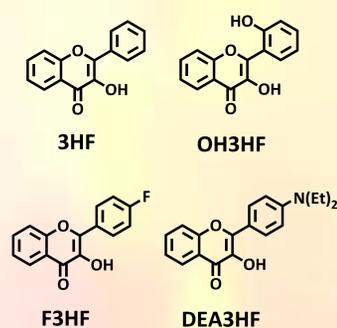


Figura 1. Flavonóides estudados.

Resultados e Discussão

Efeito da variação do pH nas fotofísica dos flavonóides.

A partir de uma solução mãe de KCl em EtOH:H₂O dos flavonóides, foram adicionadas alíquotas de soluções de HCl ou KOH 1M em KCl 0,15M EtOH:H₂O. Após o ajuste da concentração, foram adicionados a esta, alíquotas (5 µL) contendo o flavonoide em etanol (≈1 mM). Estas por sua vez foram estudadas via espectroscopia de absorção na região do UV-Vis. (**Figura 2**).

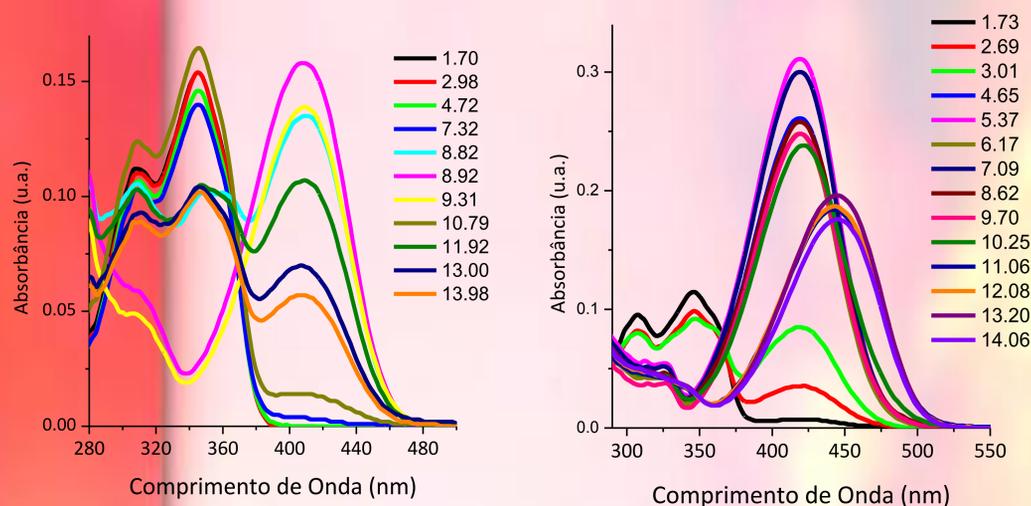


Figura 2. Espectros de absorção na região do UV-Vis dos compostos **3HF** (esquerda) e **DEA3HF** (direita) em diferentes pHs.

A partir dos espectros de absorção em diferentes concentrações de ácido-base se obteve a contribuição das espécies neutra, catiônica e aniônica na absorção, representado na **Figura 3**, sendo possível obter o valor do pKa no estado fundamental.

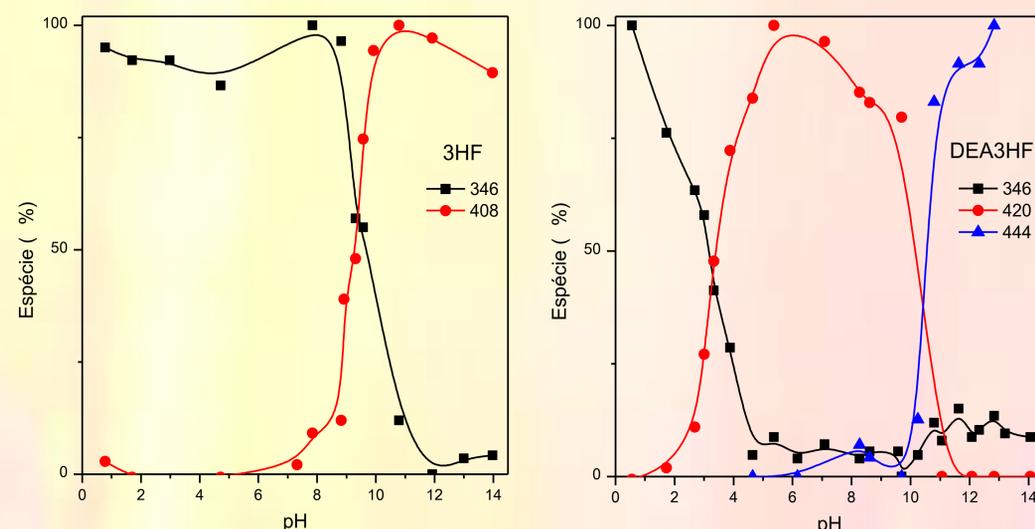


Figura 3. Variação da absorbância em função do pH para diferentes comprimentos de onda para os compostos **3HF** (esquerda) e **DEA3HF** (direita).

Tabela 1. Dados fotofísicos para as espécies neutra, catiônica e aniônica e ponto isobéstico dos compostos **3HF**, **OH3HF**, **DEA3HF** e **F3HF**.

Composto	Espécies			Ponto isobéstico	pK _a
	Neutra	Catiônica	Aniônica		
3HF	346	-	408	370	9,48
OH3HF	331	-	389	353	5,19
DEA3HF	419	345	443	-	3,03 e 11,77
F3HF	344	-	406	367	10,27

Conclusões

Foi possível observar a presença de espécies neutras e iônicas e a variação de concentração destas em função do pH. Foram obtidos os valores para o pKa no estado fundamental, permitindo uma comparação entre os valores experimentais e teóricos. Observou-se uma proximidade nos valores, conforme o esperado. Além disso, este estudo permitiu um melhor conhecimento das espécies emissoras em função do valor do pH do meio.

Agradecimentos



Referências

1. G. T. Castro, et al. *J. Mol. Struct.*, **2003**, 626, 167. 2. X. Poteau, et al. *J. Photoch. Photobio. A.*, **2004**, 162, 431. 3. M. Voicescu, et al. *Spectrochim. Acta. A.*, **2014**, 123, 303.