

Rodrigo Descalzo (IC), Valter Stefani (PQ), Anaí Duarte (PQ), Sandra Tietz (PQ)  
e-mail: rrdesc@gmail.com



Laboratório de Novos Materiais Orgânicos – DQO/IQ/UFRGS  
Av. Bento Gonçalves, 9500 - Porto Alegre-RS - CEP 91501-970  
http://www.iq.ufrgs.br/Inmo

## Introdução

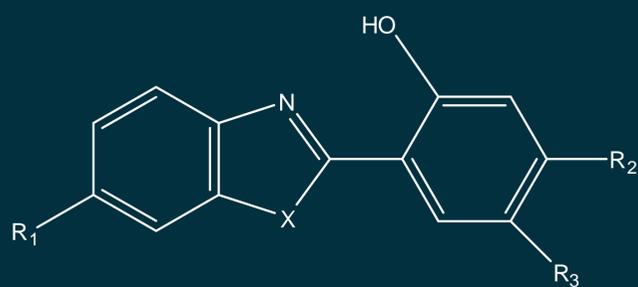
Heterociclos 2-(2'-hidroxifenil)benzazólicos (**Fig. 1**) caracterizam-se por apresentar intensa emissão de fluorescência, com grande deslocamento de Stokes, devido a um mecanismo de transferência protônica intramolecular no estado eletrônico excitado (ESIPT)<sup>1</sup>. Esse fato confere a esses compostos propriedades físicas e químicas que os tornam altamente atrativos dos pontos de vista sintético e tecnológico, incluindo o uso como sondas moleculares para a investigação da estrutura e da atividade de biomoléculas<sup>2</sup>. O propósito do presente trabalho é a síntese e a caracterização de novos corantes benzazólicos fluorescentes funcionalizados com grupamentos que aumentem sua solubilidade em água, tornando-os aptos à aplicação como sondas biológicas.

## Experimental

Os produtos de interesse podem ser obtidos a partir das seguintes rotas sintéticas:

a) condensação do 2-aminofenol (alternativamente, 2-aminotiofenol ou 1,2-fenilenodiamina) com o ácido 4(5)-amino-salicílico por aquecimento em ácido polifosfórico, formando compostos do tipo **1** ou **2**, e posterior conversão em derivados exemplificados pelo composto **6**;

b) preparação de derivados 5-amino substituídos do 2-aminofenol e posterior condensação com os ácidos salicílico ou 4(5)-amino-salicílico em condições semelhantes às anteriores, formando compostos do tipo **3**, **4** ou **5**;



- 1**, X = O, S, NH; R<sub>1</sub> = H; R<sub>2</sub> = NH<sub>2</sub>; R<sub>3</sub> = H
- 2**, X = O, S, NH; R<sub>1</sub> = H; R<sub>2</sub> = H; R<sub>3</sub> = NH<sub>2</sub>
- 3**, X = O, S, NH; R<sub>1</sub> = NRR'; R<sub>2</sub> = H; R<sub>3</sub> = H
- 4**, X = O, S, NH; R<sub>1</sub> = NRR'; R<sub>2</sub> = NH<sub>2</sub>; R<sub>3</sub> = H
- 5**, X = O, S, NH; R<sub>1</sub> = NRR'; R<sub>2</sub> = H; R<sub>3</sub> = NH<sub>2</sub>
- 6**, X = O; R<sub>1</sub> = R<sub>2</sub> = H; R<sub>3</sub> = N(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>H)<sub>2</sub>

Figura 1. Heterociclos 2-(2'-hidroxifenil)benzazólicos.

## Resultados e Discussão

Neste trabalho descrevemos a síntese do composto modelo **6**, que foi purificado por cromatografia em coluna e caracterizado por espectroscopias de absorção no UV-Vis e de emissão de fluorescência (**Fig. 2**), IR, <sup>1</sup>H-RMN e <sup>13</sup>C-RMN.

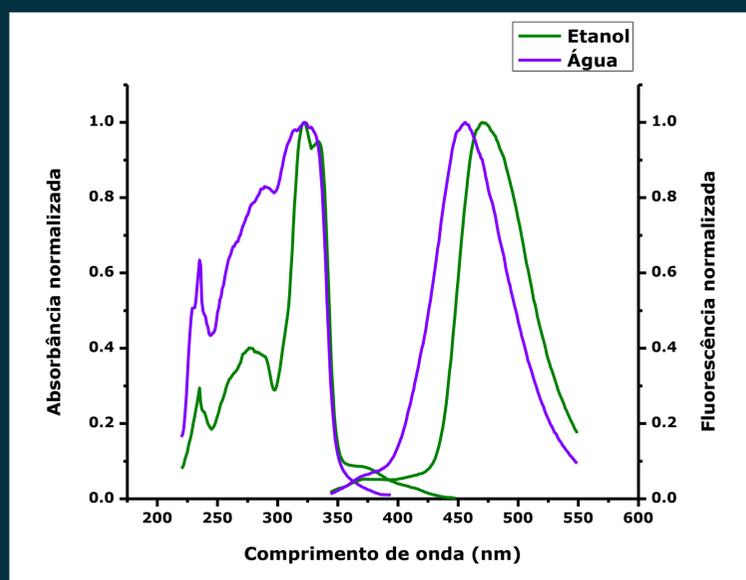


Figura 2. Espectro de excitação e emissão de fluorescência.

O composto **6** apresenta boa solubilidade em água e em outros solventes polares, o que o qualifica à aplicação como sonda biológica para tecido vegetal, microorganismos e parasitos (exemplo de uso na **Fig. 3**).

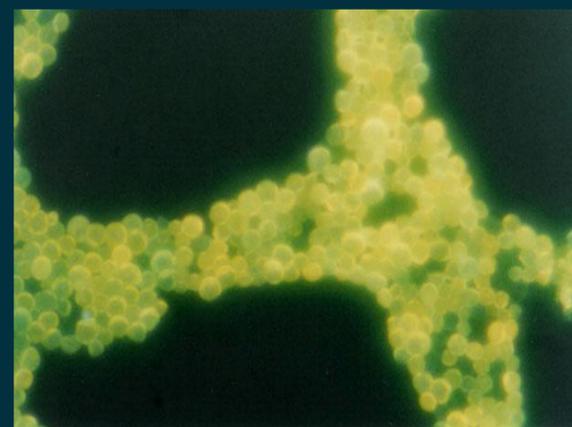


Figura 3. Uso como sonda biológica: *Cryptococcus neoformans* corado.

## Considerações Finais

Foram sintetizados e caracterizados novos heterociclos benzazólicos fluorescentes com as propriedades desejadas.

## Agradecimentos



## Referências

- [1] (a) Elguero, J.; Katritzky, A. R.; Denisko, O. V. *Adv. Heteroc. Chem.* **2000**, 76, 1. (b) Minkin, V. I.; Garnovskii, A. D.; Elguero, J.; Katritzky, A. R.; Denisko, O. V. *Adv. Heteroc. Chem.* **2000**, 76, 157.
- [2] (a) Birch, D. J. S. *Spectrochim. Acta A*, **2001**, 57(11), 2313. (b) Okerberg, E.; Shear J. B. *Anal. Biochem.*, **2001**, 292(2), 311. (c) Rodembusch, F. S.; Leusin, F. P.; Medina, L. F. C.; Brandelli, A.; Stefani V. *Photochem. Photobiol. Sci.* **2005**, 4, 254.