

Estudo das propriedades fotofísicas da 12H-benzo[g]pirido[2,1-b]quinazolin-12-ona em diferentes meios

João Victor Lopes da Silva Néto¹ (PG), Leonardo Jangada dos Santos¹ (IC), Simon John Garden¹ (PQ)* (garden@iq.ufrj.br), Nanci Câmara de Lucas¹ (PQ)* (nanci@iq.ufrj.br)

¹ – Laboratório de Fotoquímica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Palavras-Chave: Fotoquímica, Fotofísica, Fluorescência, Sensor, Heterociclos, Quinazolinona.

Introdução

Compostos orgânicos heterocíclicos são de grande importância na Química Orgânica e se encontram nas mais diversas áreas como, por exemplo, produtos naturais, síntese orgânica, química medicinal e química de materiais, para citar algumas. Existe uma imensidão de possibilidades estruturais e de propriedades de interesse. Uma das frentes de atuação de nosso grupo de pesquisa nos últimos anos tem sido o estudo e o desenvolvimento de novos sensores fluorescentes baseados em sistemas orgânicos heterocíclicos aromáticos. Temos investigado as propriedades fotofísicas de derivados da quinazolinona e sua potencial aplicação em sensores para ácido-base.

O primeiro sistema que investigamos, a 11H-pirido[2,1-b]quinazolin-11-ona, apresentava um grande aumento do rendimento quântico de fluorescência frente a protonação por ácidos e apresentava reversibilidade *turn-on/off* de sua emissão em função da acidez/basicidade do meio.¹ Para dar continuidade com esses estudos, sintetizamos um sistema análogo, a 12H-benzo[g]pirido[2,1-b]quinazolin-12-ona (BAZA, Figura 1), mas observamos de forma inesperada que ela apresenta um comportamento contrário, ou seja, sua emissão sofre uma queda frente a protonação em meio ácido. Desta forma iniciou-se o estudo das propriedades fotofísicas da BAZA em diferentes meios a fim tentar entender a origem deste comportamento antagônico da sua emissão de fluorescência.

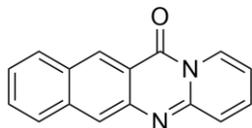


Figura 1. Estrutura da BAZA.

Resultados e Discussão

O espectro de absorção UV-VIS da BAZA em acetonitrila exibe uma banda mais intensa entre 200-340nm e uma menos intensa entre 340-480nm. O espectro de emissão da BAZA, também em acetonitrila, apresenta uma banda entre 450-700nm com resolução vibracional bem definida. Ao comparar os espectros de excitação e emissão normalizados (Figura 2 A) é observado um pequeno deslocamento de Stokes, de apenas 7 nm, o que faz sentido dada a rigidez da estrutura molecular. Além disso a emissão da BAZA se mostrou sensível à

concentração de ácido no meio, frente a adição de ácido trifluoroacético (Figura 2 B) a amostra sofreu uma supressão na intensidade de emissão de 4,7 vezes. Também foi medido o rendimento quântico de formação de oxigênio singlete da BAZA em acetonitrila, de 0,44.

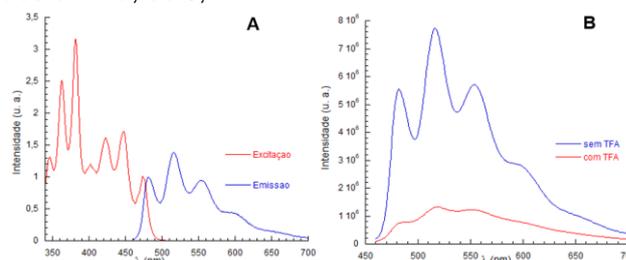


Figura 2. A) Espectros de excitação e emissão de 1 em ACN. B) Espectros de emissão de 1 em ACN antes e após adicionar um excesso de TFA.

Na Tabela 1 se encontram agrupados o tempo de vida de fluorescência (τ_F) e o rendimento quântico de fluorescência (Φ_F) da BAZA em diferentes solventes orgânicos.

Tabela 1. Propriedades fotofísicas da BAZA.

Solvente	Propriedade	
	τ_F (ns)	Φ_F
MeOH	8,8	0,13
ACN	9,44	0,12
DMSO	12,63	0,14
DCM	10	0,15
CHCl ₃	9,59	-
Tolueno	7,87	0,16

Conclusões

Os resultados até então obtidos indicam que a BAZA apresenta um potencial para ser utilizada como um sensor fluorescente de pH do tipo *turn-off* bem como pode ser explorada como fotossensibilizador. Mais estudos visando melhor elucidar os mecanismos de desativação dos estados excitados da amostra em meios neutro e ácido estão em andamento.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelo auxílio financeiro e bolsas de estudo e pesquisa concedidas.

¹Silva Néto, J. V. L.; Teixeira, R. I.; Silva, R. B.; de Lucas, N. C.; Garden, S. J. *Dyes and Pigments*, **2021**, 193, 109536. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109536>.