

***RESUMO***

---

---

GUERTA, A.C.. **Propriedades Fotoquímicas e Fotofísicas de Novos Materiais Derivados de Quinolinas e Di-Naftalimidias**. 2007. Dissertação (Mestrado em Química (Área: Química Orgânica)). 330 páginas. Instituto de Química, Universidade de São Paulo.

## RESUMO

Um dos temas modernos em fotoquímica em soluções aquosas é a observação de prototropismo de estados eletrônicos excitados. Resumidamente, moléculas orgânicas contendo grupamentos ácido-base quando excitadas, e cujo tempo de vida do estado excitado seja longo o suficiente, reações competitivas de transferência de prótons com as do processo de relaxação poderão ocorrer. No caso de aumento de acidez os compostos são denominados fotoácidos e no contrário fotobases. Este fenômeno é atribuído a um estado isoeletrônico da molécula no estado fundamental tendo sido descritos variações de até sete unidades de pKa.

Do ponto de vista da investigação Físico-Química o estudo da circunvizinhança, na qual as espécies excitadas percorrem uma superfície de potencial seja na direção da reassociação seja na da ionização com posterior solvatação das mesmas, fornece uma importante ferramenta de análise de propriedades de micro ambiente. Esta possibilidade advém das excelentes propriedades espectrais dos grupos cromofóricos desta classe de compostos o que facilita o monitoramento das espécies transientes adicionado ao estágio técnico atual de medidas ultra-rápidas. Neste estudo enfocamos

o estudo de derivados de quinolina (fotobase), contendo grupos passíveis de reação de polimerização.

Os derivados 3-alil-2-metilquinolin-4-ol (HIQ) e 3-alil-4-cloro-2-metilquinolina (CLQ) foram preparados e as propriedades fotoprototrópicas determinadas. O primeiro monômero comporta-se como fotobase ou fotoácido dependendo do pH do meio que este se encontra e o CLQ como fotobase. Na seqüência tentamos obter polímeros do HIQ e CLQ, porém não se obteve um resultado positivo devido a dificuldade da polimerização de grupos alil inclusive por via eletroquímica.

Em seqüência prosseguimos à determinação das propriedades fotoquímicas e fotofísicas de derivados de di-naftalimidias, devido às inúmeras aplicações destes compostos em novos materiais. Propriedades destas ftalimidias são em geral devidas à conjugação dos elétrons do grupo imida aos do anel naftalênico. Esta conjugação confere uma alto grau de planaridade aos derivados, de forma que a solvatação é dificultada. Observa-se via de regra espectros tanto de absorção como de emissão de fluorescência com alta resolução vibrônica seja nas transições  $S_0-S_1$  ou  $S_0-S_2$ . Os efeitos espectroscópicos esperados de solventes devem ser função das cadeias laterais nos grupos imidas. Neste contexto foram preparados vários derivados para uso como sondas. Foram estudados sete compostos: N,N'-n-butil-1,4,5,8-di-naftalimida (BUNDI); N,N'-(2-cloro-etileno)-1,4,5,8-di-naftalimida (CLNDI); N,N'-(2-bromo-etileno)-1,4,5,8-di-naftalimida (BRNDI); N,N'-2-hidroxi-etileno-1,4,5,8-di-naftalimida (OHNDI); N,N'-(N,N'-dimetiletilenodiamina)-1,4,5,8-di-naftalimida (DMNDI); N,N'-amino-1,4,5,8-di-naftalimida (DANDI) e N,N'-1,4,5,8-di-naftalimida (NDI).

Os derivados aqui estudados responderam de forma excelente às expectativas levando seja à formação de dímeros e agregados seja a alterações nas intensidades e relações das bandas vibrônicas (excitação e emissão) das transições  $S_0$ - $S_1$ . Demonstra-se aqui a excelente qualidade destes compostos como repórteres do próprio estado de suas moléculas como do meio circunvizinho.

**Palavras-chave:** quinolinas, fotoquímica, micro ambiente, di-naftalimidias