

8 Conclusões

Com Base nos resultados obtidos neste trabalho podemos concluir que:

- Os corantes cianicos com dois cromóforos (BCD) em solução aquosa possuem a absorção na região espectral dentro da janela terapêutica $\lambda \geq 600$ nm;
- Absorção desses corantes na região citada acima é muito intensa ($\epsilon \approx 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$);
- Em soluções aquosas os BCD têm alta afinidade para formar agregados já em concentrações baixas ($< 10^{-6} \text{ M}$) formando os agregados tipo H;
- A adição de sal estimula a formação de agregados em concentrações ainda menores do que na sua ausência, estimulando junto com os agregados tipo H os agregados tipo J;
- BCD têm alta afinidade com moléculas de DNA e se ligam totalmente em concentrações de DNA entre 2-10 μM (calculada em concentrações de pares de base de DNA);
- Com a adição de DNA nas soluções de BCD ocorre a presença de três espécies diferentes em equilíbrio: monômeros livres de BCD, agregados (H+J) de BCD no DNA e monômeros de BCD ligados com DNA. O conteúdo relativo dessas espécies depende da razão $[\text{DNA}]/[\text{BCD}]$ e da estrutura espacial do corante;
- Os experimentos com DNA e sal mostram que pela competição entre os cátions do sal e moléculas de corante ocorre a diminuição dos sítios de DNA disponíveis para as moléculas de BCD se ligarem, aumentando a concentração de DNA necessária para a formação de agregados e de monômeros ligados;
- Interação com DNA induz a desagregação dos agregados de corantes formados pela interação com sal;
- Na presença de DNA e sal os BCD se ligam nos sítios menos eletronegativos da molécula de DNA, pois os sítios mais eletronegativos são ocupados pelos íons;

-
- Moléculas de corantes ligadas com DNA aparecem no meio menos polar comparado com a água;
 - O método de dicroísmo circular mostrou que as moléculas de BCD não se intercalam entre as bases do DNA. Isso significa que ele se ligam na superfície das moléculas do DNA;
 - O rendimento quântico de fluorescência dos monômeros de BCD ligados com DNA é 20 vezes maior do que o dos monômeros livres, e atinge um valor de $\approx 45\%$. Baseando-se nesse resultado, e pela analogia com outros fotosensibilizadores já conhecidos, podemos esperar que o rendimento quântico do estado tripleto também aumente.
 - **Conclusão geral:** Pelas conclusões citadas acima podemos confirmar que os BCD possuem características espectrais e energéticas adequadas para aplicação como fotosensibilizadores em fotoquimioterapia. Por esse motivo achamos importante continuar seu estudo em sistemas mais complexos como membranas celulares, células e, futuramente, em animais experimentais.