



Síntesis y Fotofísica de Derivados de la 3-Metilfenalenona Solubles en Agua. Fotosensibilización en Sistemas Microheterogéneos.

Christian Silva, Catalina Leal, German Gunther.

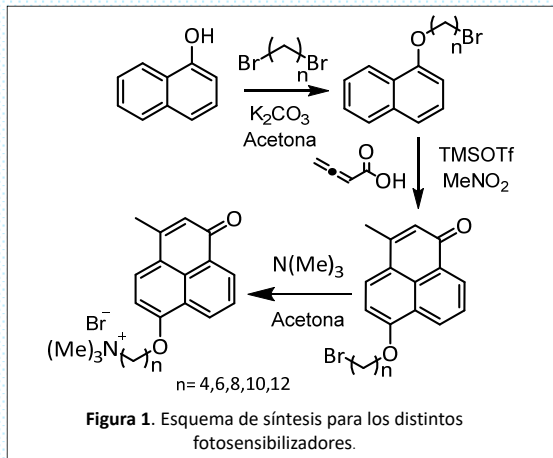
Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Departamento de Química Orgánica y Físicoquímica, Casilla 233, Santiago 1, Chile.
e-mail: christianivan.silvagarcia13@gmail.com



Introducción

La fenalenona corresponde a una cetona cíclica, utilizada principalmente como actinómetro en la generación de oxígeno molecular singlete, debido a que presenta rendimientos cuánticos de generación de esta especie cercanos a la unidad en la mayoría de los solventes (1). Este fotosensibilizador se utiliza en Terapia Fotodinámica (TPD) para combatir ciertos cánceres, y además en la fotoactivación de bacterias (2). A pesar de su amplio uso y múltiples aplicaciones, no existen estudios de estas moléculas en sistemas microheterogéneos. En este trabajo, se presenta la fotofísica de derivados solubles en agua de la 3-metil-6-(alcoxi)fenalenona, la generación de oxígeno molecular singlete en micelas de estos fotosensibilizadores y el efecto que tiene el largo de cadena en el rendimiento de la fotosensibilización.

Síntesis de los Fotosensibilizadores



Propiedades Físicas y Fotofísicas de los Fotosensibilizadores

Tabla 1. Propiedades Físicoquímicas y Fotofísicas de los distintos fotosensibilizadores en agua como solvente.

	$\epsilon / M^{-1}cm^{-1}$	Φ_f	τ_f / ns^*	C.M.C. / μM	
				Emisión	Conductividad
Sal 4C	10367	0,22	12,59	44,2	67,8
Sal 6C	12219	0,22	N.H.D.	35,2	24,1
Sal 8C	12913	0,15	12,69	34,2	43,0
Sal 10C	7396	0,28	N.H.D.	45,9	34,9
Sal 12C	24200	0,27	12,74	14,5	19,1

* τ_f : se midió en agua deuterada.

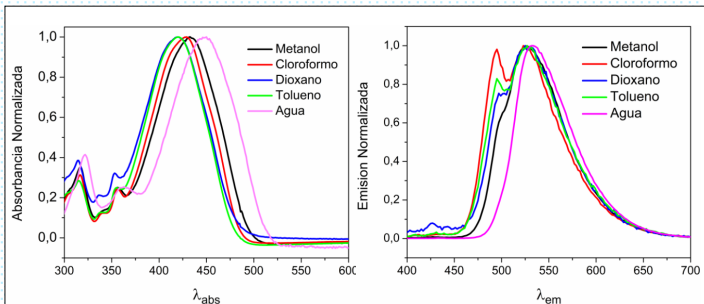


Figura 2. Espectros de absorción y emisión de la sal de 4C en distintos solventes representativos de la escala de polaridad.

Generación de Oxígeno Molecular Singlete

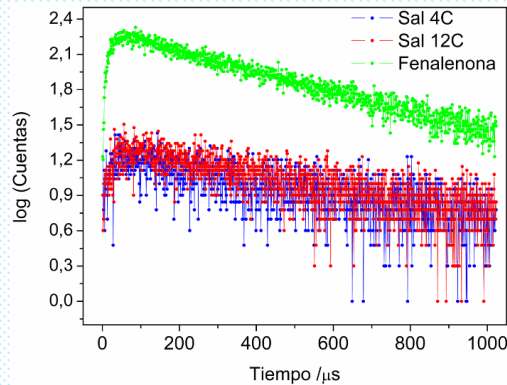


Figura 3. Decaimientos resueltos en el tiempo en D_2O , a mismas absorbancias de las distintas fenalenonas.

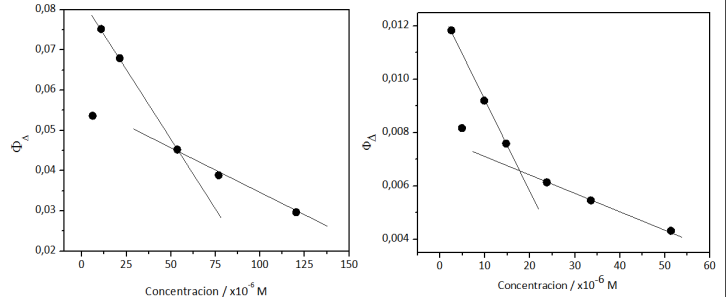


Figura 4. Efecto de la concentración en los rendimientos de generación de oxígeno molecular singlete en D_2O para los fotosensibilizadores Sal 4C y Sal 12C respectivamente.

Tabla 2. Rendimiento cuántico de generación de Oxígeno Molecular Singlete en distintos solventes.

	Φ_Δ		
	ACN	Etanol	Etanol +200 μL D2O
Etoxi*	0,617	0,670	0,670
Metil Metoxi	0,660	0,805	0,201
Sal 4C	0,670	0,849	0,323
Sal 12C	0,549	0,356	0,274

Conclusiones

Se sintetizaron una serie de fenalenonas solubles en agua, con distinto largo de cadena hidrocarbonada, con una sal de trimetilamonio en su extremo. Se caracterizó su fotofísica en medio homogéneo observándose que en solventes apolares, sus rendimientos cuánticos de fluorescencia son bajos, siendo mayores en solventes polares, además presentan tiempos largos del estado excitado en medio acuoso. Por otra parte, se determinaron las concentraciones micelares críticas, observándose una dependencia entre el largo de cadena, siendo menores las c.m.c. a cadenas más largas. Finalmente, se determinaron los rendimientos cuánticos de generación de oxígeno singlete en solventes orgánicos, presentando valores similares que los antes reportados para la 6-etoxifenalenona, aun así, en medio acuoso existe una caída en la generación para las sales. Se realizaron experimentos para determinar la naturaleza de este efecto, observándose una dependencia con la concentración, de modo que, a medida que se aumenta la concentración de la sonda, el rendimiento cae a valores cercanos a cero. Se propone realizar nuevos estudios para definir la naturaleza de este efecto, y poder resolver este problema con el fin de utilizar este fotosensibilizador en medio heterogéneo.

Referencias

- (1) *J. Phys. Chem. A* 2007, 111, 26, 5756-5767
- (2) *Mol. Carcinog.* 2018, 53, 11, 1525-1539

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto FONDECYT 1160705