

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos

XIV Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos

Livro de Resumos da Pós-Graduação

São Carlos  
2024

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos  
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.  
358p.

Texto em português.

1.Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

156

## Quantificação da formação de tripleto e do impacto de surfactantes nas propriedades emissivas de fotossensibilizadores

DE BONI, Leonardo<sup>1</sup>; KURACHI, Cristina<sup>1</sup>; OLIVEIRA, Diego França de<sup>1</sup>

diegofdeoliveira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Moléculas fotossensibilizadoras são amplamente aplicadas e estudadas nas áreas de medicina e ciências biológicas para diagnóstico e terapias fotoinduzidas. É crucial que suas características fotofísicas sejam bem definidas e quantificadas para determinar a aplicação mais adequada conforme suas propriedades. Esse processo de caracterização pode ser complexo, dado que algumas propriedades, como a formação de tripletos, não são de simples quantificação. Além disso, outras moléculas presentes em solução podem interagir com o fotossensibilizador e interferir em suas características e eficiência de aplicação, como no caso dos surfactantes pulmonares, que prejudicam a terapia fotodinâmica. (1) Nesse contexto, o atual projeto visa realizar a caracterização fotofísica de um conjunto de moléculas fotossensibilizadoras, incluindo três compostos já consolidados na área biomédica, Hematoporfirina IX (HPIX), Indocianina Verde (ICG) e Azul de Metileno (MB), e duas tetrafenilporfirinas que demonstraram potencial em ensaios *in vitro*, ambas com ligante lateral de pirrolina, sendo uma neutra e outra catiônica. Foram realizadas medidas para determinação dos espectros de absorção e emissão, além da quantificação das eficiências de fluorescência ( $\phi_f$ ) através de método comparativo. O tempo de vida de fluorescência ( $\tau_f$ ) foi determinado utilizando um laser pulsado e analisando o decaimento temporal do sinal de fluorescência. Essas características foram exploradas em três solventes distintos: Dimetilsulfóxido (DMSO), tampão aquoso salino pH 7.4 e uma mistura de 95% tampão, 4% DMSO e 1% surfactante não-iônico Tween 20. Foi estudado como a presença de moléculas surfactantes em meio aquoso pode interferir nas propriedades emissivas desses compostos. Além disso, a eficiência quântica de formação de tripleto ( $\phi_T$ ) em DMSO foi determinada utilizando uma técnica de fluorescência induzida por excitação de pulsos laser consecutivos. (2) As soluções preparadas em solvente DMSO apresentaram valores de  $\phi_f$  e  $\tau_f$  maiores em relação às soluções preparadas em tampão aquoso, devido à diferença de polaridade desses solventes. Soluções preparadas com surfactante apresentaram grande aumento dos valores de  $\phi_f$  e  $\tau_f$  em relação às soluções aquosas, se aproximando dos valores observados em DMSO. Observou-se que as cavidades formadas pelos compostos surfactantes fornecem um ambiente de menor polaridade e permitem o alojamento de monômeros de fotossensibilizadores, impedindo agregação e favorecendo propriedades fluorescentes destes compostos. Entre os fotossensibilizadores observados, o MB foi o único que não teve suas propriedades fotofísicas significativamente afetadas pela mudança de solventes, o que é coerente visto que também foi o único não prejudicado pela presença de surfactante pulmonar em estudo anterior. (1) Em relação à formação de tripleto, foi atestado valor significativo de eficiência para as porfirinas, entre 20 e 34%, conforme esperado dada estrutura de anel altamente conjugado, a qual favorece o acoplamento spin-orbita. A amostra de ICG apresentou  $\phi_T$  menor que 1%, coerente com o já reportado na literatura, (3) enquanto a amostra de MB demonstrou valor de 15%, que não se traduz facilmente na estrutura pouco conjugada e livre de átomos pesados. Os resultados encontrados garantem melhor compreensão

sobre a fotofísica de fotossensibilizadores, suas limitações e melhores áreas de aplicação. Estudos futuros pretendem compreender o impacto das cavidades micelares nos valores de  $\phi_T$ .

**Palavras-chave:** Tripleto; Fotossensibilizador; Fluorescência.

**Agência de fomento:** Fapesp (2023/05917-1)

#### Referências:

- 1 KASSAB, G. *et al.* Lung surfactant negatively affects the photodynamic inactivation of bacteria—in vitro and molecular dynamic simulation analyses. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 119, n. 25, p. e2123564119-1-e2123564119-9, 2022.
- 2 GARCIA, R. Q.; DE BONI, L. Revisiting methods for triplet quantum yield determination with double pulse fluorescence excitation. *In*: ULTRAFast OPTICS – UFO, 13., 2023, Bariloche. **Proceedings** [...] Washington, DC: Optical Society of America - OSA, 2023. p. P2.8.
- 3 GRATZ, H. Photo-isomerisation, triplet formation, and photo-degradation dynamics of indocyanine green solutions. **Journal of Photochemistry and Photobiology A: chemistry**, v. 128, n. 1-3, p. 101-109, 1999.