

## Incorporación de una quinolina fluorescente a resina ortodóncica

Alondra Parada-Rivera<sup>1</sup> **iD**, José Luis Córdova-De la Luz<sup>2</sup> **iD**, Ismael Juárez-Díaz<sup>1</sup> **iD**, Manuel E. Medina<sup>3</sup> **iD**, Carolina Sámano-Valencia<sup>1</sup> **iD**, Diana del Carmen Pazos-Guarneros<sup>1</sup> **iD**, Alberto Jerezano-Domínguez<sup>1\*</sup> **iD**

<sup>1</sup>Facultad de Estomatología, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), 31 poniente 1304. Los Volcanes, C.P. 72410, Puebla, Pue., México. <sup>2</sup>Laboratorio de Microscopía Confocal, Instituto de Fisiología, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Prol. de la 14 Sur 6301. Cd. Universitaria, C. P. 72592, Puebla, Pue., México. <sup>3</sup>Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Médicos 5, Unidad del Bosque 91010, Xalapa, Veracruz, México.

Email de autor para correspondencia: [\\*alberto.jerezano@correo.buap.mx](mailto:*alberto.jerezano@correo.buap.mx)

**Recibido:** 18 abril 2025. **Aceptado:** 17 agosto 2025

### RESUMEN

**Antecedentes:** La adición de compuestos fluorescentes, como las quinolinas, a resinas ortodóncicas podría ser de gran ayuda al operador, para remover satisfactoriamente los restos de resina y reducir el daño al esmalte dental. **Objetivo:** Incorporar la 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente a la resina ortodóncica P cure-on-touchL®. **Materiales y métodos:** En este estudio experimental, *in vitro*, transversal, se evaluaron tres técnicas de incorporación; amasado, molido y agitado. Se obtuvieron micrografías confocal láser de barrido de 3 grupos experimentales con diferentes concentraciones de quinolina, E1 (0.46%), E2 (1.4%) y E3 (2.3%) y un grupo control sin quinolina. **Resultados:** El compuesto 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente se incorporó a la resina ortodóncica P cure-on-touchL® por la técnica de amasado a una concentración de 1.4% (p/p) de quinolina. **Conclusión:** De acuerdo con las imágenes de microscopía de fluorescencia E2 logró la mejor dispersión del compuesto 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina por medio de la técnica de amasado. Por lo tanto, las resinas más la incorporación de quinolina fluorescente podrían ser consideradas para estudios de remoción de residuos de resina en esmalte.

**Palabras clave:** Quinolina; ortodoncia; resina; amasado; fluorescencia; daño.

## ABSTRACT

**Background:** The addition of fluorescent compounds such as quinolines to orthodontic resins could be of great help to the operator. To successfully remove resin debris in order to reduce damage to tooth enamel. **Objective:** To incorporate the fluorescent 5,7-dimethoxy-4-phenyl-quinoline 5,7-dimethoxy-4-quinoline into Ppure-on-touchL® orthodontic resin. **Materials and methods:** Experimental, *in vitro*, cross-sectional study was carried out. Three incorporation techniques were evaluated: kneading, grinding and stirring. Scanning laser confocal micrographs were obtained from 3 experimental groups with different quinoline concentrations, E1 (0.46%), E2 (1.4%) and E3 (2.3%) and a control group without quinoline. **Results:** The fluorescent 5,7-dimethoxy-4-phenyl-quinoline compound was incorporated into Ppure-on-touchL® orthodontic resin by the kneading technique at a concentration of 1.4% (w/w) quinoline. **Conclusion:** According to fluorescence microscopy images E2 achieved the best dispersion of the compound 5,7-dimethoxy-4-phenyl-quinoline by the kneading technique. Therefore, the resins plus the incorporation of fluorescent quinoline could be useful to decrease the damage to the enamel at the time of resin removal.

**Keywords:** Quinoline; orthodontics; resin; kneading; fluorescence; damage.

## INTRODUCCIÓN

La ortodoncia es una subespecialidad derivada de la odontología, responsable de la supervisión, cuidado y corrección de las estructuras dentofaciales. Las resinas utilizadas para cementar los brackets pueden ser de dos tipos, fotopolimerizables y autopolimerizables [1]. Con la finalidad de mejorar las propiedades de estas resinas se pueden incorporar materiales y/o componentes como nanopartículas de metales [2], moléculas orgánicas [3-5] y/o moléculas inorgánicas [6, 7] fluorescentes que pueden estar unidas covalentemente o se pueden adicionar de forma no covalente a la matriz polimérica del material ortodóncico. Al término del tratamiento ortodóncico es inevitable dejar algunos remanentes del

material resinoso. Esto es debido a la similitud del color entre la resina y el esmalte dental [5]. La resina ortodóncica Ppure-on-touchL [8], proporciona unión fuerte y confiable del bracket al esmalte dental, de uso rápido y accesible gracias a su sistema de curación. Para eliminar por completo el material resinoso, los clínicos dentales suelen utilizar aditamentos como escariador ultrasónico, fresas de profilaxis, fresas de pulido, piedras de Arkansas, entre otros métodos de remoción, que en la mayoría de los casos dañan el esmalte dental [1, 2]. Estos métodos de remoción pueden producir microfracturas en el esmalte lo que, incrementa la sensibilidad dental en el órgano dentario del paciente y por lo tanto un mayor riesgo de fracturas dentales [9]. El uso



de la fluorescencia en materiales dentales y métodos analíticos en la estomatología se ha incrementado recientemente [10]. Las quinolinas son compuestos orgánicos heterocíclicos con propiedades fluorescentes y múltiples características antifúngicas, antiinflamatorias, anticancerígenas, antimicrobianas y antibacterianas [11]. Además, se ha reportado la incorporación de compuestos orgánicos, como las quinolinas, por sus múltiples propiedades en diversos materiales en el área médica y farmacológica [12]. En el presente trabajo se propone la incorporación de la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fluorescente a la resina ortodóncica Ppure-on-touchL®.

## METODOLOGÍA

### Materiales

La resina Ppure-on-touchL® fue obtenida de SCIENTIFIC PHARMACEUTICALS, INC. (Sci-Pharm). El diclorometano grado reactivo fue obtenido de Reasol (USA). La 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fue sintetizada en el laboratorio multidisciplinario, de la FEBUAP (Facultad de Estomatología de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla).

### Métodos

#### Análisis por FTIR-ATR

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) se utiliza para comprender la estructura de las moléculas individuales y la composición de las mezclas moleculares. El espectro de infrarrojo de la muestra de 4-fenil-

5,7-dimetoxiquinolina fue obtenido con un espectrofotómetro de infrarrojo por transformada de Fourier - reflectancia total atenuada (FTIR-ATR-Bruker, Vertex modelo 70), con 32 escaneos en el intervalo de 400 a 4,000  $\text{cm}^{-1}$  y con una resolución de 4  $\text{cm}^{-1}$  (Figura 1).

### Técnicas de incorporación

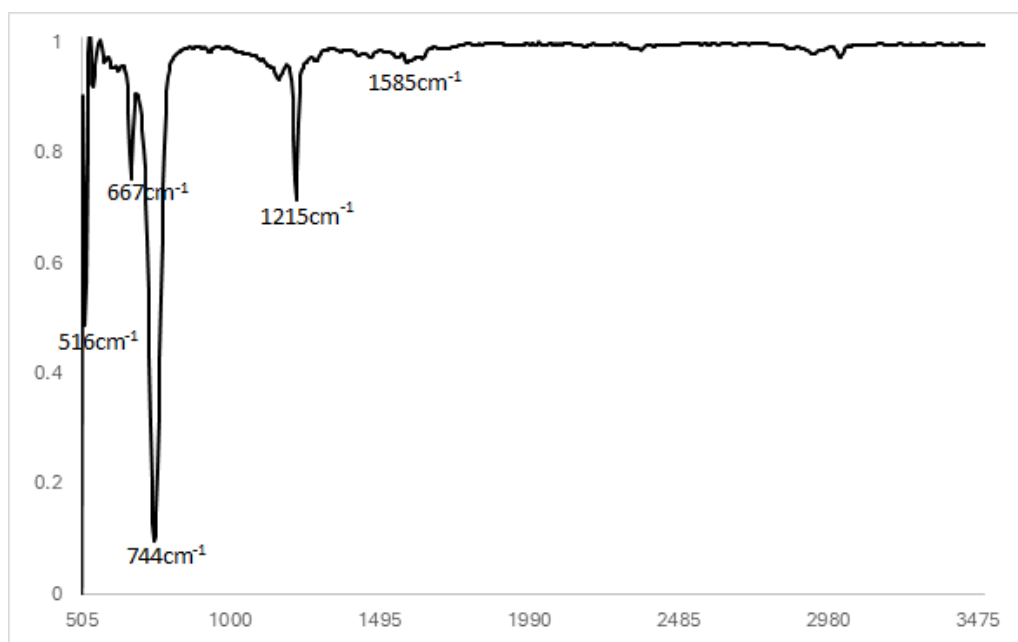
La incorporación de la molécula fluorescente a la resina ortodóncica Ppure-on-touchL®, a una concentración de  $1 \times 10^{-4}$  molar, se realizó con tres diferentes técnicas reportadas en la literatura [7]: amasado, molido y agitado. La solución stock consistió en disolver 13.25 mg de 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fluorescente en 500 mL de diclorometano para obtener una solución al  $1 \times 10^{-4}$  molar. La 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente se integró a la resina ortodóncica Ppure-on-touchL® por medio de alícuota (1 mL) en un godete y se dejó volatilizar el disolvente orgánico, técnica de amasado; posteriormente, una gota del activador de la resina se agregó y mezcló bajo las indicaciones del fabricante. En la técnica de molido se mezcló el activador de forma manual con un pequeño cristal de la quinolina en mortero de cristal con pistilo. En la técnica de agitado, alícuotas de 1mL, 3mL y 5mL de la quinolina fueron agregados al activador y se agitaron por 20 min.

### Preparación de las muestras para microscopía

Como se muestra en la tabla 1, con la técnica de

amasado, 0 mL, 1 mL, 3 mL y 5 mL de la mezcla a concentración de  $1 \times 10^{-4}$  molar, fueron utilizados para conformar los grupos: Control (0 mL, 0%), Experimental 1 (E1, 1mL, 0.46%), Experimental 2 (E2, 3mL, 1.4%) y Experimental 3 (E3, 5mL, 2.3%). El disolvente

se eliminó a temperatura ambiente en una campana de extracción de gases. Posteriormente se agregaron 100 mg de activador y se mezclaron manualmente con espátula de cemento por 5 min hasta observar una mezcla homogénea.



**Figura 1.** Espectro FTIR-ATR de 5,7-dimetoxi-4-fenil quinolina.

**Tabla 1.** Porcentaje (p/p) del compuesto orgánico 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona fluorescente según los mililitros utilizados para la técnica de amasado.

Volumen (mL)	%	Grupos
0	0.0%	Control
1	0.46%	E1
3	1.4%	E2
5	2.3%	E3

Las muestras de resina utilizadas tenían un grosor de 30 micras, debido a que este grosor es óptimo para observar la interferencia de la luz en la superficie a examinar; esta medida se determinó usando un Micrómetro (SHAHE-Model T152002FR. 0-25 mm  $\pm$  0.04 m). Las muestras de resina se revelaron con una lámpara de UV-Vis, Cole-Parmer, UV Lamp – 9762008, 4 Watt, 254/365 nm, 115V/60Hz | 0.16 Amps.

### Microscopia confocal Laser de barrido

Las micrografías de las muestras de resina se obtuvieron con un microscopio confocal láser de barrido (C2 Plus, Nikon, Japón). Las imágenes de micrografías en 3D se obtuvieron a una longitud de onda de 405 y 488 nm, con 50 cortes de 1  $\mu$ m por muestra. En las lámparas de fotocurado, la longitud de onda mínima aceptada por la Organización Internacional de Normalización ISO 4049 es de 350-515 nm [13].

### Espectroscopia de UV-vis

La espectroscopia de UV-Vis se obtuvo con un espectrómetro PDA UV/Vis Lambda 265 con una solución de la quinolina a  $1 \times 10^{-6}$  M en diclorometano.

### Análisis Computacional

Los cálculos computacionales fueron realizados con el paquete de programas Gaussian 16 [14]. Se empleó el funcional M06-2X con la base 6-311++G(d, p) [15]. La optimización y el cálculo de las frecuencias

vibracionales se llevó a cabo para corroborar los mínimos en la superficie de energía potencial, con ayuda de estos resultados se tienen frecuencias vibracionales reales.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 1 presenta el espectro de FTIR-ATR de la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina. El pico de absorción de  $1585 \text{ cm}^{-1}$  corresponde a la banda de intensidad débil del grupo amino aromático. La banda de  $1215 \text{ cm}^{-1}$  corresponde a la banda de intensidad mediana del grupo funcional éter (C-OMe), seguido de bandas de intensidad entre  $744 \text{ cm}^{-1}$  y  $516 \text{ cm}^{-1}$  corresponden a las señales aromáticas (C=C, =C-H), resultados que concuerdan con las bandas de los compuestos de 4-fenilquinolina reportados por Das y cols., en 2024 [16].

La incorporación se refiere a la unión o mezcla homogénea no covalente de una sustancia a una matriz. En la tabla 2 se describen las técnicas utilizadas para la incorporación de la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fluorescente a la resina ortodóncica Pcure-on-touchL®. Tres técnicas de incorporación fueron probadas hasta encontrar la que permitió obtener una mezcla totalmente homogénea. En la técnica 1, amasado, se colocó en un recipiente de cristal la quinolina disuelta en alícuotas de 1mL, 3 mL y 5 mL de diclorometano a una concentración de  $1 \times 10^{-4}$  molar. El disolvente fue eliminado a temperatura ambiente en una campana de extracción de gases. Posteriormente, 100 mg de activador se agregaron a cada grupo y se mezclaron manualmente con espátula de

cemento por 5 min, como reporta Li y cols. [7], hasta observar una mezcla homogénea a las concentraciones de 0.46%, 1.4% y 2.3% respectivamente. Las muestras fueron irradiadas con luz ultravioleta a una longitud de onda de 365 nm y se observó una resina homogénea de color azul fluorescente (Figura 2). En la técnica 2, molienda, al momento de irradiar con UV-Vis se observaron pequeñas partículas del compuesto sin incorporación homogénea. En la técnica 3, con agitación mecánica, los compuestos no se mezclaron.

Resultados similares se han reportado en la literatura, como se muestra en la tabla 3. Li y

cols. [7] usaron estas tres técnicas de incorporación: amasado, molido y agitado, para lograr la dispersión de Hidroxiapatita dopada con Europio (HANW: Eu) en una resina Bis-GMA/TEGDMA a diferentes cantidades de Europio dopadas al 0.5%, 2.0%, 3.8%, 5.0% y 7.6%. Los resultados muestran que, la técnica de amasado presenta una incorporación más uniforme y la mayor intensidad de fluorescencia fue observada a concentración de 5.0% (HANW: Eu(5%)) [3]. Al igual que en este trabajo, con la técnica de amasado con espátula de cemento, el compuesto orgánico 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente a concentración de  $1 \times 10^{-4}$  molar al 0.46%, 1.4%

**Tabla 2.** Resultados de la incorporación del compuesto orgánico 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona a la resina ortodóncica Ppure-on-touchL®.

Técnica de incorporación	1	2	3
	Amasado	Molienda	Agitación mecánica
Resultado	Positivo	Negativo	Negativo



**Figura 2.** Incorporación de 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente y la resina ortodóncica Ppure-on-touchL® a diferentes concentraciones con la técnica 1 de amasado; de izquierda a derecha, 0.46%, 1.4% y 2.3%.

y 2.3% presentó mejor incorporación en la resina ortodóncica Pcure-on-touchL®, con un aumento proporcional de fluorescencia a la cantidad del compuesto orgánico fluorescente añadido a la resina (Tabla 1). Por otra parte, Júnior y cols. [17], utilizaron como método de incorporación la técnica de agitado; con un motor de aire dental, con un rango de velocidad de hasta 20 000 rpm y pieza de mano recta con fresa redonda #10 [4] (Tabla 3). Además, utilizaron alícuotas de etanol/Rodamina B (RB) a cinco concentraciones diferentes (0.5, 0.1, 0.02, 0.004, 0.0008 mg/mL) obtenidas de una dilución de 25 mL del compuesto. Por el contrario, Rütterman y cols. [5] no reportan la técnica de incorporación del compuesto inorgánico “Flu” [5] (Tabla 3). Sin embargo, utilizaron concentraciones de 0.5% y 1.0% del pigmento inorgánico fluorescente experimental (flu), para probar la fluorescencia en las resinas. El uso de fluorescencia en las diversas áreas de estomatología ha sido de interés en los últimos años [10], así como agregar pigmentos fluorescentes a diversos materiales dentales [2, 5, 6, 18-20]. Por lo tanto, la incorporación de la

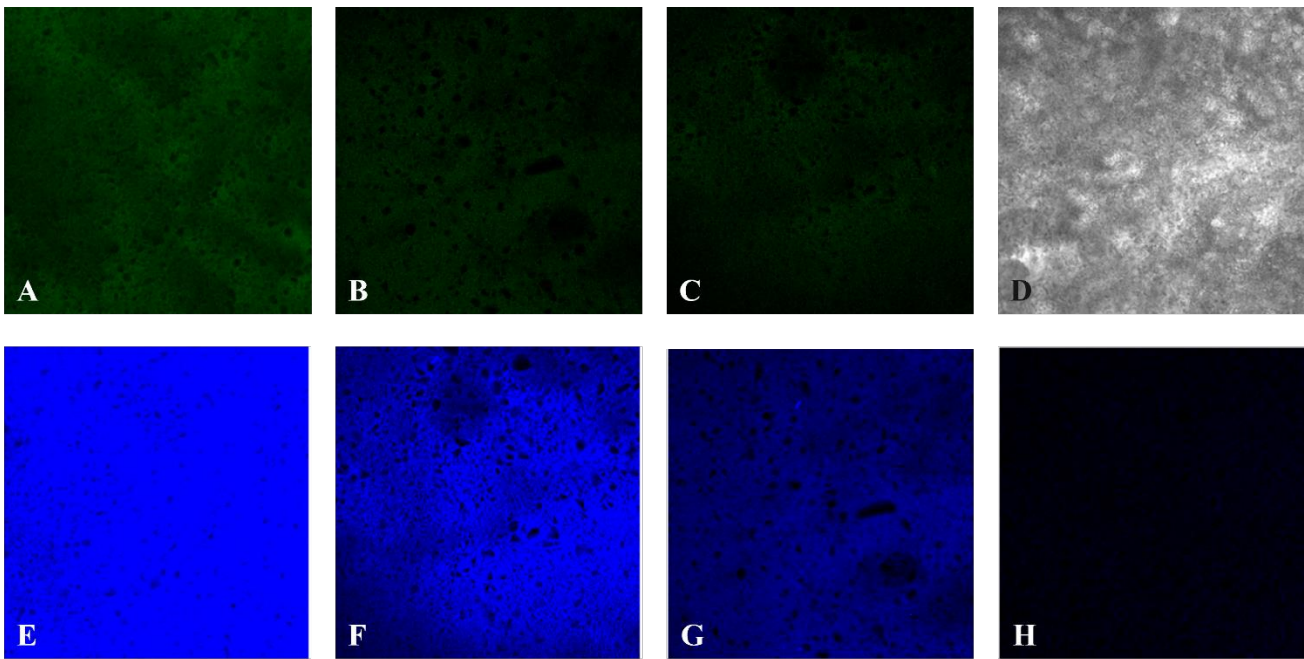
4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fluorescente a la resina ortodóncica Pcure-on-touchL® podría tener un gran impacto en el ámbito estomatológico.

### Micrografías de Grupos Control (0%), E1 (0.46%), E2 (1.4%), E3 (2.3%)

La figura 3 corresponde a micrografías de la resina ortodóncica Pcure-on-touchL®, modificada con la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fluorescente, a diferentes concentraciones, Control (0%), E1 (0.46%), E2 (1.4%), E3 (2.3%) y analizadas a longitudes de onda de 405 nm y 488 nm. Las figuras 3A y 3E corresponde a micrografías de la resina ortodóncica Pcure-on-touchL®, modificada con la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina fluorescente, a concentración de 2.3% (E3). Se observa una considerable fluorescencia color azul a longitud de onda de 405 nm (Figura 3E). La fluorescencia propia de la resina se observa a longitud de onda de 488 nm (Figura 3A). Mientras que la figura 3F corresponde a micrografías de la resina ortodóncica Pcure-on-

**Tabla 3.** Comparación de las metodologías de incorporación de los compuestos fluorescentes a los diferentes materiales encontrados en la literatura.

Literatura	Li y cols., 2020 [7]	Júnior y cols., 2017 [17]	Rütterman y cols., 2007 [5]	En este estudio 2025
<b>Metodología reportada</b>	✓	✓	-	✓
<b>Técnica de homogenización</b>	Amasado	Motor de aire dental y pieza de mano recta	-	Amasado
<b>Material modificado</b>	Resina	Adhesivo	Resina	Resina



**Figura 3.** Micrografías de la resina ortodóncica Ppure-on-touchL®, modificadas con el compuesto orgánico 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente a diferentes concentraciones y analizadas a longitud de onda de 405 nm (A) 2.3%, (B) 1.4%, (C) 0.46%, analizadas a 488 nm, (D) micrografía en campo claro del grupo control (0.0%), (E) 2.3%, (F) 1.4%, (G) 0.46%, y (H) el grupo control (0.0%), analizadas a 405 nm. Magnificación de objetivo de 20x y resolución de 1024 x 1024 píxeles.

touchL®, modificada con la 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente, a concentración de 1.4% (E2). A una longitud de onda de 488 nm (Figura 3F), se observa la fluorescencia emitida por la resina (Figura 3B). A longitud de onda de 405 nm (Figura 3G) se observa fluorescencia en color azul, el cual corresponde al compuesto orgánico 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona. Las muestras de E1 analizadas a longitud de onda de 488 nm (Figura 3C), presenta fluorescencia propia de la resina. Sin embargo, al analizar las muestras a una longitud de onda de 405 nm (Figura 2H), se observa una fluorescencia baja en la muestra E1 modificada con el compuesto orgánico 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente a una concentración de 0.46%. Por

último, se muestra una micrografía del control de la resina ortodoncia en campo claro (figura 3D) y la figura 3H es la micrografía de la muestra control (0.0%) que no presenta fluorescencia a una longitud de onda de 405 nm. Al incrementar la cantidad del compuesto orgánico 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente en la resina ortodóncica Ppure-on-touchL®, se presenta mayor fluorescencia de color azul a longitud de onda de 405 nm.

Las micrografías mostradas en la figura 4 corresponden a muestras de la resina ortodóncica Ppure-on-touchL® modificada con el compuesto orgánico fluorescente 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona a diferentes concentraciones (0.46%, 1.4%, 2.3% y 0.0%), analizadas por

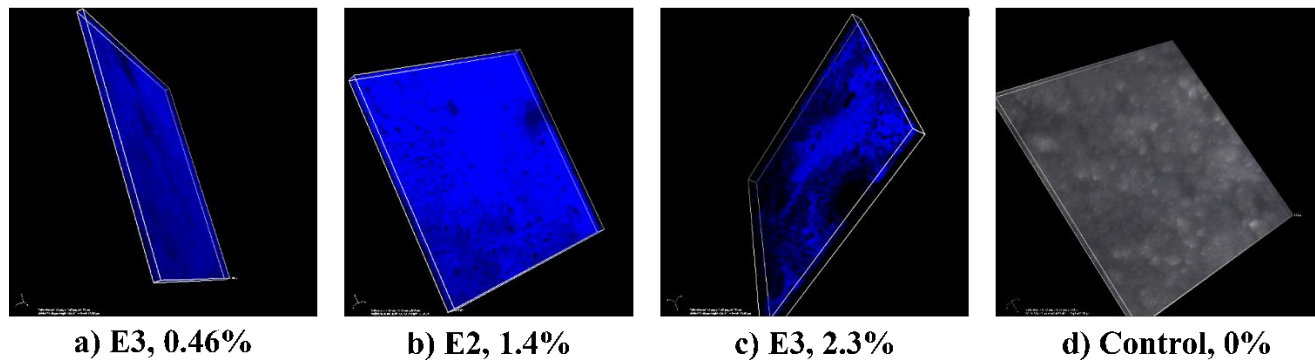
microscopia confocal láser de barrido (C2 Plus, Nikon, Japón), a una longitud de onda de 405 nm, con 50 cortes de 1  $\mu$ m.

La fluorescencia de la resina ortodóncica Pcore-on-touchL® modificada aumenta proporcionalmente con las concentraciones del compuesto orgánico 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina (Figura 4). En cuanto a la incorporación, como se muestra en la tabla 1, el mejor método de incorporación fue el amasado, con el que se observa una buena homogenización del compuesto orgánico 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina a la resina ortodóncica Pcore-on-touchL®. Sin embargo, en la figura 4, podemos ver que la mejor dispersión del compuesto orgánico 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina se observa a concentración de 1.4% (E2).

Como se muestra en la tabla 4, para observar la fluorescencia de las muestras de resina

ortodóncica modificadas con el compuesto orgánico experimental 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolina fluorescente a una longitud de onda de 405 nm, resultados similares fueron reportados por Li y cols. [7]. Sin embargo, el compuesto orgánico experimental 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina presentó fuerte fluorescencia azul. A diferencia de Júnior y cols. [17] que al analizar las características foto-físicas del compuesto orgánico Rodamina B (RB), utilizaron espectroscopia de fotoluminiscencia, con un espectro de emisión (ancho de banda de 525–700 nm, longitud de onda de excitación de 516 nm, tiempo de integración de 0.2 s, incremento de 0.2 nm, rendija de paso de banda de 0.8 nm) y espectro de excitación (ancho de banda de 275–575 nm, longitud de onda de emisión de 587 nm, tiempo de integración de 0.2 s, incremento de 0.2 nm, rendija de paso de banda de 0.8 nm).

#### MUESTRAS INCORPORADAS CON LA TÉCNICA DE AMASADO



**Figura 4.** Microfotografías en 3D. Vistas con una magnificación de objetivo de 20x, con una resolución de 1024 x 1024 píxeles. Micrografías analizadas a longitud de onda de 405 nm en concentraciones de 0.46% (a), 1.4% (b), 2.3% (c) y 0.0% (d).

Complementariamente, Júnior y cols. [4] compararon la intensidad de fluorescencia de las diferentes concentraciones con microscopio confocal láser de barrido a longitud de onda de excitación del láser de 532 nm. La fluorescencia del compuesto orgánico Rodamina B se visualizó en color rojo [4] (Tabla 4). Mientras que Rüttermann y cols. [5] para observar el compuesto Flu, un colorante experimental fluorescente inorgánico a base de óxido de itrio, iterbio y erbio sintetizado por los autores, en el que utilizaron un láser infrarrojo debido a que su compuesto proporciona fluorescencia a una longitud de onda de 980 nm. El compuesto inorgánico Flu presentó fuerte fluorescencia verde (Tabla 4).

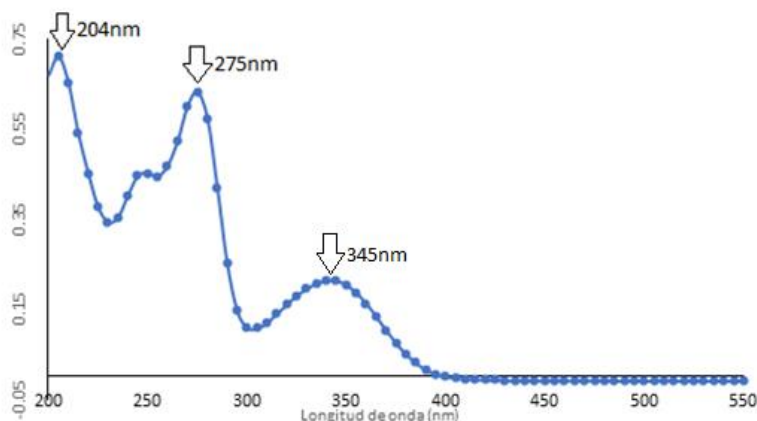
El espectro de absorción de UV-Vis de la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina diluida en diclorometano se muestra en la Figura 5. Esta figura muestra que el espectro de absorción de la quinolina presenta una fuerte absorción en la región de UV-Vis debido a la conjugación de los grupos aromáticos, una banda característica e intensa de absorción a una longitud de onda de 204 nm, como resultado de la mayor

transición electrónica de HOMO – LUMO. transiciones asociadas a los cambios de electrones en los orbitales  $\pi - \pi^*$ , debido a la presencia de enlaces conjugados (C=C y C=N) del sistema conjugado de quinolina, de acuerdo con los resultados de transición  $\pi - \pi^*$  de Geng y cols. (2025) con banda de absorción de 245 nm [21]; seguida de una banda media de absorción de 275 nm, y una banda pequeña de absorción en 345 nm asociada a los grupos metoxilos de transición asociada a los cambios de electrones en los orbitales  $n - \pi^*$  de los grupos auxocrómicos (-OMe), resultados similares son reportados en la literatura, con una banda de 341 nm, indicando propiedades ópticas adecuadas para la interacción con los materiales dentales [22]. De acuerdo con Fernández Moreno y cols. (2024), estos resultados obtenidos muestran que la interacción del material polimérico ortodóncico en la estructura del compuesto fluorescente provoca un efecto hipocrómico en el espectro, lo cual se atribuye a los electrones de no enlace [22].

**Tabla 4.** Técnica de fluorescencia, longitud de onda y color fluorescente adquirido por el compuesto añadido según las diversas literaturas encontradas.

Estudio	Li y cols., 2020 [7]	Júnior y cols., 2017 [17]	Rüttermann y cols., 2007 [5]	En este estudio
<b>Fluorescencia</b>	✓	✓	✓	✓
<b>Técnica de fluorescencia</b>	Microscopio confocal láser de barrido	Espectroscopia de fotoluminiscencia y Microscopio confocal láser de barrido	Láser infrarrojo	Microscopio confocal láser de barrido
<b>Longitud de onda</b>	405 nm	516 nm y 532 nm	980 nm	405 nm
<b>Color Fluorescente</b>	Rojo	Rojo	Verde	Azul

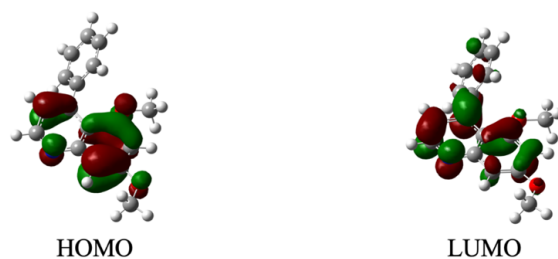




**Figura 5.** Espectro de UV-Vis de 5,7-dimetoxi-4-fenil quinolina a una concentración de  $1 \times 10^{-6}$  molar.

El análisis computacional de la distribución de los orbitales frontera HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) y LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) de la molécula de 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina se muestra en la figura 6. Las contribuciones más importantes en el estado excitado de la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina para las posibles transiciones en el proceso de fluorescencia en presencia de luz ultravioleta se pueden atribuir a la interacción HOMO (-7.27 eV (electron-voltio)  $\rightarrow$  LUMO (-0.84 eV) con un  $\Delta E = 6.44$  eV, o brecha de banda electrónica. Estos factores son importantes en la química teórica ya que describen como las moléculas reaccionan químicamente y su estado basal. El orbital más bajo desocupado (LUMO) atrae a los electrones, pero no puede sostenerlos, mientras que el orbital más alto ocupado (HOMO) tiene capacidades limitadas de aceptar electrones [21]. A la longitud de 405 nm como se muestran en las bandas 204 nm como la banda de mayor contribución en las interacciones  $\pi - \pi^*$ , y 345 nm como de menor

contribución [23]. Los derivados de quinolinas muestran propiedades fluorescentes reversibles [24] y son candidatos para iniciadores en materiales monoméricos [22]. La quinolina estudiada presenta una brecha de banda energética (6.44 eV), que al ser incidida por una longitud de onda de 405 nm, permite un cambio de conjugación de los electrones de no enlace del oxígeno de los grupos metoxilo en transiciones  $n - \pi^*$ , lo que resulta en un excedente de electrones dentro del sistema  $\pi^*$  del anillo de quinolina de acuerdo con los estudios de Suja y cols. (2024) [23] y al regresar a su estado basal la energía es emitida en forma de luz fluorescente.



**Figura 6.** Orbitales moleculares frontera HOMO y LUMO para 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolina.

A diferencia del presente estudio, Li y cols. [7] analizaron únicamente la fluorescencia del compuesto inorgánico de Europio en la Hidroxiapatita (HANW:Eu), donde no observaron un aumento de la intensidad de absorbancia, directamente proporcional con la cantidad de Europio en el espectro de UV-Vis a longitud de onda de 620 nm. Li y cols. [7] utilizaron 5 concentraciones de Europio en la síntesis de hidroxiapatita dopada (0.5%, 2.0%, 3.8%, 5.0% y 7.6%), en donde la concentración de 0.5% presentó menor absorbancia en el espectro de UV-Vis, seguido por la concentración al 3.8%. Las concentraciones al 2.0% y 7.6% tuvieron una absorbancia similar en el espectro de UV-Vis. Sin embargo, la concentración a 5.0% (HANW: Eu (5%)) presentó la mayor absorbancia a 620 nm en el espectro de UV-Vis [12]. Por otra parte, en el presente estudio fue sintetizado el compuesto orgánico 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona. Esta quinolona presentó una máxima absorbancia de 275 nm en espectro de UV-Vis a concentración de  $1 \times 10^{-6}$  molar (Fig. 5 y Tabla 4). La resina ortodóncica P cure-on-touchL® modificada con el compuesto orgánico 5,7-dimetoxi-4-fenil-quinolona presenta fluorescencia azul a una longitud de onda de 405 nm al analizarla a través de microscopia confocal láser de barrido (Tabla 4).

Por su parte, Júnior y cols. [17], como se muestra en la tabla 4 y 5, estudiaron los adhesivos modificados con el compuesto orgánico Rodamina B, en donde analizaron fluorescencia de color verde a rojo a una longitud de onda  $\approx 550-565$  nm a través de

espectroscopía de fotoluminiscencia. De forma similar que en este estudio se observa incremento de la fluorescencia con el aumento de la concentración del compuesto orgánico fluorescente. Por el contrario, Rütterman y cols. observaron la resina modificada con del pigmento inorgánico denominado Flu, de color verde por irradiación a una longitud de onda de 980 nm [5].

El estudio fue dirigido a la incorporación de un compuesto orgánico de quinolona a la resina ortodoncia; por lo que la comparación de las propiedades mecánicas de los materiales modificados y sin modificar deben ser consideradas para su evaluación. De acuerdo con la literatura, no existen investigaciones de resinas ortodóncicas modificadas con este compuesto fluorescente. Por lo tanto, se necesitan más estudios *in vitro*, *ex vivo* e *in vivo* para asegurar la implementación clínica de estos materiales ortodóncicos fluorescentes.

## CONCLUSIÓN

Con base en los resultados obtenidos en este estudio, podemos concluir que la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona fluorescente a una concentración de 1.4%, si se incorpora a la resina ortodóncica. Las micrografías de confocal láser de barrido muestran que la mejor dispersión del compuesto fluorescente se obtuvo a una concentración de 1.4% con el método de amasado. Por lo tanto, las resinas modificadas con la 4-fenil-5,7-dimetoxiquinolona fluorescente pueden ser consideradas para estudios de remoción de

residuos de resina en esmalte. Sin embargo, se sugiere continuar con pruebas mecánicas como dureza de Vickers, módulo de elasticidad, resistencia a la flexión, interfaz esmalte-resina, cizallamiento pruebas fisicoquímicas como solubilidad, pH, absorción de agua, así como pruebas de citotoxicidad en fibroblastos.

## CONFLICTO DE INTERESES

Declaramos que este proyecto no está sujeto a ninguna influencia directa por algún fabricante o casa comercial. Declaramos no tener relaciones económicas o personales con otras personas u organizaciones ajenas a los autores de este proyecto.

## CONTRIBUCIÓN DE LOS AUTORES

El manuscrito fue redactado a través de las contribuciones de todos los autores. A P-R: Investigación, recursos, metodología y redacción, J C-DL: metodología, recursos y análisis de datos, ME M: metodología, software y revisión, DC P-G: conceptualización y revisión, I J-D; recursos y revisión, C S-V: análisis de datos y supervisión. A J-D: conceptualización, recursos, investigación, redacción y revisión. Los autores dan su aprobación para la versión final del manuscrito.

## AGRADECIMIENTOS

Agradecemos la participación y colaboración de todos los investigadores en la elaboración de este proyecto. Agradecemos el apoyo brindado del Instituto de Fisiología de la BUAP por

llevar a cabo parte de los experimentos y resultados clave de este trabajo, así como al laboratorio de fisiología y multidisciplinario de la FEBUAP. A J-D y C S-V son miembros del cuerpo académico de Biomedicina y Nuevas Tecnologías Aplicadas a la Odontología “BUAP-CA-383, PROPED. Este estudio fue realizado con recursos por el proyecto VIEP2025 (ID:00507-PV/2025) y los autores.

## REFERENCIAS

- [1]. Shen PC, Rawls HR; Esquivel-Upshaw F, Josephine F, DMD, MS, MS-CI Cementos Dentales. In PHILLIPS. Ciencia de los materiales dentales; 2022; pp. 128–152 ISBN 978-84-13-82223-5. Disponible en: <https://www.inspectioncopy.elsevier.com/book/details/9788413822235>
- [2]. Yu B, Ahn JS, Lim JI, Lee YK. Influence of TiO<sub>2</sub> Nanoparticles on the Optical Properties of Resin Composites. *Dental Materials* 2009; 25 (9): 1142–1147, Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0109564109001663>
- [3]. D’Alpino PHP, Pereira JC, Svizero NR, Rueggeberg FA, Pashley DH. Factors Affecting Use of Fluorescent Agents in Identification of Resin-Based Polymers. *J Adhes Dent*. 2006; 8: 285–292. Disponible en: <https://www.quintessence-publishing.com/deu/en/article/842607>
- [4]. Park MY, Lee YK, Lim BS. Influence of Fluorescent Whitening Agent on the Fluorescent Emission of Resin Composites. *Dental Materials*. 2007; 23(6): 731–735.



- Disponibile en: <https://doi.org/10.1016/j.dental.2006.06.028>
- [5]. Rüttermann S, Ritter J, Raab WHM, Bayer R, Janda R. Laser-Induced Fluorescence to Discriminate between a Dental Composite Resin and Tooth. *Dental Materials*. 2007; 23: 1390–1396. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0109564106003162>
- [6]. Chen S, Wang S, Li H, Forsberg K. Eu<sup>3+</sup> Doped Monetite and Its Use as Fluorescent Agent for Dental Restorations. *Ceramics International*. 2018; 44 (9): 10510–10516. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0272884218306199>
- [7]. Li L, Li D, Zhao W, Cai Q, Li G, Yu Y, *et al.* Composite Resin Reinforced with Fluorescent Europium-Doped Hydroxyapatite Nanowires for in-Situ Characterization. *Dental Materials*. 2020; 36 (1): e15–e26. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.dental.2019.11.010>
- [8]. CURE-ON-TOUCH Trademark of SCIENTIFIC PHARMACEUTICALS, INC. - Registration Number 2101536 - Serial Number 75179881 :: Justia Trademarks. Disponible en: <https://trademarks.justia.com/751/79/cure-on-touch-75179881.html>
- [9]. Rocha RS, Salomão FM, Silveira Machado L, Sundfeld RH, Fagundes TC. Efficacy of Auxiliary Devices for Removal of Fluorescent Residue after Bracket Debonding. *Angle Orthod*. 2017; 87 (3): 440–447. Disponible en: [https://angle-](https://angle-orthodontist.kglmeridian.com/view/journals/angle/87/3/article-p440.xml)
- [10]. Tang S, Wu X, Yang T, Peng S, Ding G. Fluorescent Probes in Stomatology. *Arabian Journal of Chemistry*. 2022; 15 (12): 104350. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1878535222006669>
- [11]. Weyesa A, Mulugeta E. Recent Advances in the Synthesis of Biologically and Pharmaceutically Active Quinoline and Its Analogues: A Review. *RSC Adv*. 2020; 10: 20784–20793. Disponible en: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2020/ra/d0ra03763j>
- [12]. Yadav P, Shah K. Quinolines, a Perpetual, Multipurpose Scaffold in Medicinal Chemistry. *Bioorganic Chemistry*. 2021; 109: 104639. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2021.104639>
- [13]. ISO 4049:2019 - Dentistry — Polymer-Based Restorative Materials. Disponible en: <https://www.iso.org/es/contents/data/standard/06/75/67596.html>
- [14]. Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, *et al.* Gaussian 16, Revision C.01. Wallingford (CT): Gaussian, Inc.; 2016. Disponible en: [https://gaussian.com/citation/?utm\\_source=cha](https://gaussian.com/citation/?utm_source=chatgpt.com)
- [15]. Zhao Y, Truhlar DG. The M06 Suite of Density Functionals for Main Group Thermochemistry, Thermochemical Kinetics, Noncovalent Interactions, Excited States, and Transition Elements: Two New Functionals and

Systematic Testing of Four M06-Class Functionals and 12 Other Functionals. *Theor Chem Account.* 2008; 120: 215–241. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s00214-007-0310-x>

[16]. Das P, Chakraborty G, Friese N, Roeser J, Prinz C, Emmerling F, *et al.* Heteropolyaromatic Covalent Organic Frameworks via One-Pot Multicomponent Reactions. *J. Am. Chem. Soc.* 2024; 146 (25): 17131–17139. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/jacs.4c02551>

[17]. Júnior, OB, Cebim MA, Atta MT, Machado CM, Francisconi-dos-Rios LF, Wang L. Determining Optimal Fluorescent Agent Concentrations in Dental Adhesive Resins for Imaging the Tooth/Restoration Interface. *Microscopy and Microanalysis.* 2017; 23 (1): 122–130. Disponible en: <https://doi.org/10.1017/S143192761601271X>

[18]. Volpato CAM, Pereira MRC, Silva FS. Fluorescence of Natural Teeth and Restorative Materials, Methods for Analysis and Quantification: A Literature Review. *Journal of Esthetic and Restorative Dentistry.* 2018; 30 (5): 397–407. Disponible en: <https://doi.org/10.1111/jerd.12421>

[19]. Meller C, Klein C. Fluorescence Properties of Commercial Composite Resin Restorative Materials in Dentistry. *Dental Materials Journal.* 2012; 31: 916–923. Disponible en: <https://doi.org/10.4012/dmj.2012-079>

[20]. Burgard N, Kienitz M, Jourdan C,

Rüttermann S. The Influence of Modified Experimental Dental Resin Composites on the Initial In Situ Biofilm-A Triple-Blinded, Randomized, Controlled Split-Mouth Trial. *Polymers* 2021; 13(16): 2814. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2073-4360/13/16/2814>

[21]. Geng Y, Wang S, Zhang Y, Liu Y, Tang H, Li X, *et al.* Novel Quinoline Derivatives: Synthesis, Spectroscopic Characterization, Crystal Structure, DFT Calculations, Hirshfeld Surface Analysis, Anti-Tuberculosis Activities and ADMET Analysis. *Journal of Molecular Structure.* 2025; 1332: 141751. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2025.141751>

[22]. Fernandes Moreno V, Hori Barboza B, Michelão Martins L, Gaglieri C, Bannach G, *et al.* Novel Quinoline Photoinitiators for Dimethacrylate Monomer Photopolymerization under UV and Blue Light. *European Polymer Journal.* 2024; 218: 113331. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2024.113331>

[23]. Suja R, Rathika A, Jeeba Reeda VS, Arum kumar A, Divya P. Synthesis, Spectroscopic Analysis (FT-IR, FT-Raman, UV, NMR), Non-Covalent Interactions (RDG, IGM) and Dynamic Simulation on Bis (8-hydroxy Quinoline) Salicylate Salicylic Acid. *Journal of Molecular Structure.* 2024; 1310: 138231. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.138231>

[24]. Shen Y, Xue P, Liu J, Ding J, Sun J, Lu R. High-Contrast Mechanofluorochromism and

Acidochromism of D- $\pi$ -A Type Quinoline  
Derivatives. *Dyes and Pigments*. 2019; 163:  
71–77. Disponible en:  
<https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2018.11.044>

