

## Propriedades estruturais e eletrônicas de corantes xantenos.

Suélen T. G. Buck<sup>a</sup> (PG), Janice R. Perussi<sup>a</sup> (PQ), Albérico B. F. da Silva<sup>a</sup> (PQ), Paula Homem-de-Mello<sup>b\*</sup> (PQ).

<sup>a</sup> Instituto de Química de São Carlos, USP; <sup>b</sup> Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC.

\*[paula.mello@ufabc.edu.br](mailto:paula.mello@ufabc.edu.br)

Palavras Chave: xantenos, DFT, IEFPCM.

### Introdução

Em virtude de apresentarem um grande espectro de atividades biológicas, é de grande interesse o estudo de compostos xantenos. Alguns desses corantes têm sido aplicados, por exemplo, em PDT (terapia fotodinâmica) e em PDI (inativação fotodinâmica).

Este trabalho visa contribuir para o conhecimento dos possíveis processos envolvidos no uso terapêutico dos corantes xantenos, dando suporte para áreas de pesquisa sobre planejamento de novos compostos fotossensibilizadores que apresentem atividade terapêutica e ausência de efeitos colaterais. Neste trabalho foram estudados, utilizando a Teoria do Funcional de Densidade (DFT) e o modelo de solvatação contínuo IEFPCM, os corantes xantenos apresentados na Fig. 1.

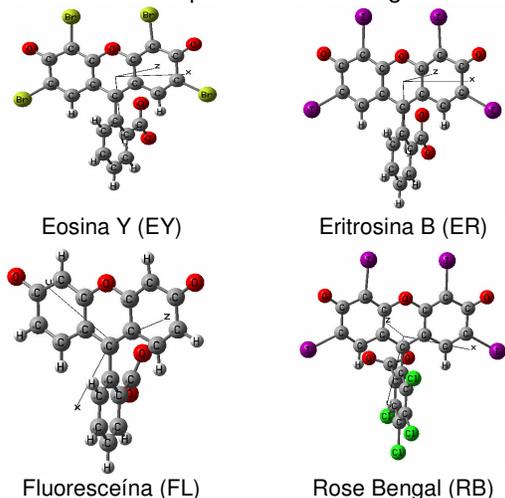


Fig. 1. Estruturas otimizadas para os xantenos estudados.

### Resultados e Discussão

Foram realizadas otimizações de geometria dos corantes *supra* citados com o funcional B3LYP e a base DGTZVP em meio aquoso (simulado com IEFPCM) até que as geometrias correspondessem a um mínimo, ou seja, que não apresentasse frequências imaginárias. Essa metodologia foi previamente testada com sucesso para reprodução de propriedades experimentais de corantes fenotiazínicos e acridínicos.<sup>1</sup> Assim, este estudo procurou também testar a aplicabilidade da metodologia para outros corantes.

32<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1. Propriedades obtidas para os xantenos

Propriedade	FL	ER	EY	RB
E <sub>HOMO</sub> (u.a.)	-0.184	-0.199	-0.199	-0.203
E <sub>LUMO</sub> (u.a.)	-0.075	-0.090	-0.090	-0.101
GAP* (eV)	2.966	2.970	2.966	2.773
Área (Å <sup>2</sup> )	510.1	660.1	626.4	732.7
Volume (Å <sup>3</sup> )	859.0	1169.2	1090.4	1317.1
Dipolo (Debye)	15.87	13.72	13.69	12.90
Dados Experimentais <sup>2</sup>				
IC <sub>50</sub> (mg/mL)	1644	124	213	67
Atividade fotodinâmica (J/cm <sup>2</sup> )	0.4	5.6	4.2	6

\* GAP = diferença entre as energias dos orbitais HOMO e LUMO.

A energia dos orbitais de fronteira (E<sub>HOMO</sub> e E<sub>LUMO</sub>) tem boa correlação com a atividade dos corantes, inclusive o GAP indica porque o RB tem atividade superior aos demais. Entretanto, analisando apenas essas propriedades, não é possível diferenciar ER e EY (cujas diferenças estruturais se restringem à substituição de Br por I) e explicar porque a FL se distingue tão marcadamente dos demais corantes.

As propriedades intrinsecamente estruturais, volume e área, têm relação direta com os dados experimentais: quanto maior os seus valores menor o IC<sub>50</sub> (concentração inibitória média, ou seja, concentração do composto necessária para matar 50% da população celular) e maior a atividade fotodinâmica (parâmetro relacionado à eficiência de PDT e PDI). O mesmo se dá em relação ao dipolo. A presença de átomos de iodo não altera as propriedades eletrônicas, mas faz com que a molécula se torne mais hidrofóbica (menor dipolo e maior volume).

### Conclusões

Para uma melhor compreensão do processo, cálculos do estado tripleto ainda estão em andamento. Entretanto, as propriedades calculadas já fornecem subsídio para entender e planejar novos fotossensibilizadores.

### Agradecimentos

FAPESP (Proc. 07/05370-0) e CNPq.

<sup>1</sup> Homem-de-Mello, P. et al *Theor. Chem. Acc.* **2005**, 113, 274.

<sup>2</sup> Buck, S. T. G. resultados ainda não publicados.