

Síntese e Avaliação de Eficácia de 1,3-Difenilpropan-1,3-dionas, Planejadas Como Absorvedores de Radiação Ultravioleta

Vinícius Soares da Paixão Correia^{1*} (IC), Carolina Maria Teixeira Vale Sarkis Neves¹ (IC), Silvia Keli de Barros Alcanfor¹ (PQ) e Luiz Antonio Soares Romeiro¹ (PQ); menoq2@gmail.com

¹Laboratório de Desenvolvimento de Estratégias Terapêuticas, Universidade Católica de Brasília-DF.

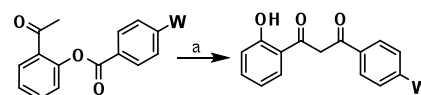
Palavras Chave: 1,3-Diarilpropan-1,3-dionas, Absorvedores de Radiação UV, Síntese Orgânica,

Introdução

A proteção contra a luz UV pode ser obtida pela aplicação de absorvedores orgânicos, os quais possuem similaridade estrutural quanto à presença de anéis aromáticos substituídos com alto grau de conjugações estendidas. De maneira geral, esses agentes funcionam absorvendo radiação na região UV, seguida de relaxação vibracional muito rápida ao estado fundamental. Uma vez no estado fundamental essas moléculas podem absorver outro fóton de luz, repetindo-se o processo e, com isso, protegendo possíveis alvos da radiação UV. Descrevemos neste trabalho a síntese e a avaliação de eficácia para 1,3-diarilpropan-1,3-dionas *para*-substituídas visando compreender características estruturais relevantes para esta classe de compostos associadas ao perfil desejado.

sinais característicos, indicando influência da hidroxila adicional em relação a Avobenzona. Considerando os diferentes *para*-substituintes, os dados revelaram grande influência tanto no deslocamento batocrômico quanto na absorvidade molar. Em relação a absorvidade molar os derivados com grupos retiradores de densidade eletrônica demonstraram reduzir ϵ , ao contrário dos doadores de densidade eletrônica.

Os derivados ésteres precursores dos derivados-alvo apresentaram absorções na região UVC, demonstrando que a conjugação coplanar é determinante para a absorção na região UVA.



a= Terc-Butoxi de Potássio /

Resultados e Discussão

A metodologia sintética empregada na obtenção dos ésteres precursores compreendeu a mistura dos respectivos cloretos de ácido (4,026 eqv), 2'-hidróxiacetofenona (3,66 mmol), trietilamina (4,026 mmol) em diclorometano (25 mL), à 0°C deixando a temperatura evoluir à temperatura ambiente. permanecendo sob agitação magnética por 36 horas. Em seguida, a mistura foi extraída com acetato de etila (3 x 10 mL), lavadas com solução salina (20 mL) e seca sob sulfato de sódio. Após rotoevaporação o resíduo foi cromatografado em sílica eluído com hexano, fornecendo os ésteres-alvo (LDT121,123,125,127). Os ésteres individualmente (0,552 mmol) foram submetidos ao rearranjo de Baker-Venkataraman por meio da reação com *t*-butóxido de potássio (1,096 mmol) em piridina seca (0,5 mL), sob exposição à radiação microondas em um forno doméstico (2 x 30") à potência 5. Após purificação em coluna cromatográfica eluída com hexano-diclorometano 4:1, os derivados-alvo (LDT122,124,126,128) foram obtidos em rendimentos satisfatórios (Tabela 1).

Os espectros UV foram obtidos a partir de soluções etanólicas ($1,5 \times 10^{-5}$ M), visando a obtenção de absorções em torno de 0,5, as quais foram comparadas ao derivado comercial Avobenzona. Os espectros de absorção exibiram deslocamento batocrômico para todas as propanodionas substituídas com deslocamento de 32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1 – Ésteres e 1,3-Difenilpropan-1,3-dionas

Derivados	Grupos (W)	Rend. (%)	UV	ϵ
LDT 121	H	80	233	21.512
LDT 122	H	70	366	19.286
LDT 123	OMe	94	262	20.025
LDT 124	OMe	80	374	37.509
LDT 125	NO ₂	88	244	19.929
LDT 126	NO ₂	68	379	2.124
LDT 127	CN	89	240	30.528
LDT 128	CN	53	374	17.191
Avobenzona	-	-	360	37.857

Conclusões

As metodologias empregadas na obtenção dos ésteres e das 1,3-diarilpropan-1,3-dionas forneceram os produtos desejados em rendimentos que variaram de regulares a excelentes. Os derivados comprovaram o perfil de absorção da subunidade cromofórica 1,3-diarilpropan-1,3-diona presente no filtro solar avobenzona, onde a ligação de hidrogênio adicional está relacionada ao maior deslocamento para a região do UVA.

Agradecimentos

Os autores agradecem à UCB pelo apoio financeiro.

¹Flor, R. J. *et al.*, *Quim. Nova*, **2007**, *1*, 153-158.

²Lowe, N. J. *et al.* *Sunscreens development, evaluation, and regulatory aspects*; 2ª Ed, Editora Marcel Dekker, USA, 1997.