

Estudo Teórico do *p*-Metóxicinamato de Octila

Leonardo Falcão Alves* (IC)¹, Luiz Antônio Soares Romeiro (PQ)¹, João B. L. Martins (PQ)², leonardofalcaoalves@gmail.com

1 - Curso de Química, Universidade Católica de Brasília, QS 07, Lote 01, Taguatinga Sul-DF, Brasil, 71966-700.

2- UnB, IQ, Laboratório de Química Computacional, CP 4478, Brasília, DF, 70904970,

PalavraChave: *parsol mcx*, *ab initio*, absorção.

Introdução

O uso de bloqueadores solares tem aumentado em popularidade, principalmente devido ao reconhecimento da relação entre radiação ultravioleta (UV), câncer e envelhecimento da pele [1,2]. A radiação UV é dividida em três regiões: UVA (320–400 nm), UVB (290–320 nm) e UVC (200–290 nm). Destas tem-se que a RUVB é absorvida pela camada de ozônio, a RUVB é absorvida superficialmente na pele, enquanto que UVA penetra mais profundamente na pele [2]. O *p*-metóxicinamato de octila é um filtro orgânico que absorve na RUVB, sendo o principal absorvedor para esta região em formulações de filtros solares.

O objetivo deste trabalho é calcular o valor máximo de absorção usando o método TD/DFT (*time dependent density functional theory*), associando os orbitais de fronteira envolvidos, para auxiliar na previsão e planejamento de novos absorvedores de radiação ultravioleta, por meio de modificações na estrutura do *p*-metóxicinamato de octila.

Resultados e Discussão

Inicialmente a geometria do *p*-metóxicinamato de octila foi otimizada utilizando o método semi-empírico PM5 [3], para determinar os diferentes mínimos conformacionais. A conformação de menor energia foi utilizada para o estudo DFT. Esta geometria (Figura 1) foi otimizada utilizando o método PBE1PBE e a função de base 6-31+G(2d). A função de base foi escolhida para atender a uma melhor relação entre demanda computacional e qualidade dos resultados. Foram testadas funções de base mais complexas, entretanto a demanda computacional mostrou-se muito elevada para cálculos de otimização, e de estados excitados.

A geometria otimizada com método PBE1PBE foi usada para o cálculo do estados excitados com e sem solvente. Para o estudo do efeito do solvente foi utilizado o método PCM. O mesmo procedimento foi adotado com o funcional B3LYP.

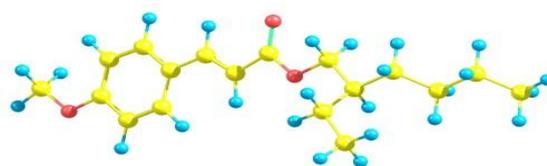


Figura 1. Geometria otimizada usando nível PBE1PBE/6-31+G(2d).

A Tabela 1 apresenta os resultados teóricos da absorção do *p*-metóxicinamato de octila. Os valores obtidos com o funcional PBE1PBE estão em melhor correlação com dados experimentais recentes: 310nm (etanol) [4].

Tabela 1. Resultados PBE1PBE e B3LYP, usando base 6-31+G(2d) para a absorção (nm).

Solvente	PBE1PBE	B3LYP
Acetona	309	317
Acetonitrila	309	317
Etanol	309	317
Benzeno	308	316
Clorofórmio	309	317
Dicloroetano	310	318
Diclorometano	310	318
DMSO	311	319
Metanol	309	317

Conclusões

Resultados PBE1PBE da absorção do *p*-metóxicinamato de octila estão em grande concordância com dados experimentais, permitindo utilizar a abordagem proposta para o estudo de novos bloqueadores.

Agradecimentos

Os autores agradecem a UCB e UNB pelo apoio financeiro.

¹ C. Antoniou, M.G. Kosmadaki, A.J. Stratigos, A.D. Katsambas, J. Eur. Acad. Derm. Vener., **2008**, 22, 1110.

² Dimosthenis L. Giokas, Amparo Salvador, Alberto Chisvert, TrAC, **2007**, 26, 360.

³ CACHE,2002,Fujitsu Limited

⁴ L. O. Silva, L. A. S. Romeiro, S. K. B. Alcanfor, 28ª Reunião da SBQ, **2005**.