

## Espectro teórico do p-metoxicinamato de octila e derivados de avobenzona.

Leonardo Falcão Alves (IC)<sup>1</sup>, Luiz Antônio Soares Romeiro (PQ)<sup>2</sup>, Italo Pimentel de Lima (IC)<sup>3</sup>, João B. L. Martins (PQ)<sup>3\*</sup>. lopes@unb.br.

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

2- Faculdade de Ciências da Saúde, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 70904-970

3- UnB, IQ, Laboratório de Química Computacional, CP 4478, Brasília, DF, 70904-970.

Palavras Chave: *parsol*, avobenzona, TD/DFT, *ab initio*, absorção.

### Introdução

Bloqueadores solares apresentam uma grande importância devido a relação entre radiação ultravioleta (UV), câncer e envelhecimento da pele [1,2]. Radiação UV é dividida em três bandas: UVA (320–400 nm), UVB (290–320 nm) e UVC (200–290 nm). UVB é absorvida superficialmente na pele, enquanto que UVA penetra mais profundamente na pele [2]. O p-metoxicinamato de octila (Parsol MCX) é um filtro UV orgânico, com absorção entre 290-320nm. A avobenzona, butil metoxidibenzoilmetano (Parsol 1789), tem absorção máxima em 357nm [3]. Ambos estão presentes 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), para auxiliar na previsão e planejamento de novos absorvedores de radiação ultravioleta derivados da avobenzona. Foram estudados derivados da avobenzona (Avo-CN, Avo-NO<sub>2</sub> e Avo-MeO) e parsol (MCX).

### Resultados e Discussão

Inicialmente as geometrias do p-metoxicinamato de octila e da avobenzona foram otimizadas utilizando o método semi-empírico PM5 [4], para determinar os diferentes mínimos conformacionais. A conformação de menor energia (Figura 1) foi otimizada utilizando o método PBE1PBE e B3LYP, com a função de base 6-31+G(2d).

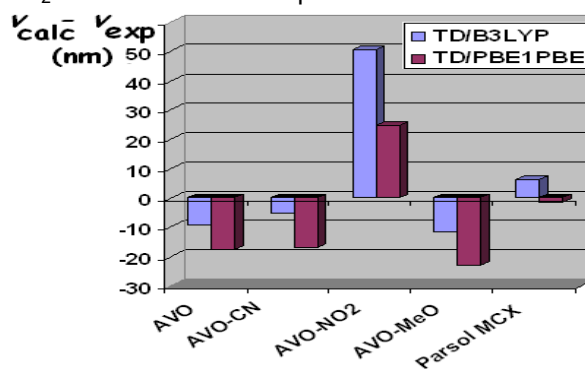
A geometria otimizada com método híbrido PBE1PBE foi usada para o cálculo do estados excitados com e sem solvente. Para o estudo do efeito do solvente foi utilizado o método PCM. O mesmo procedimento foi adotado com o funcional B3LYP. Todos os cálculos *ab initio* foram realizados com o programa Gaussian03.

Todos as estruturas estudadas apresentaram deslocamento positivo do comprimento de onda, do solvente com relação ao vácuo. A Tabela 1 apresenta os valores com relação ao vácuo somente para o maior deslocamento. Também apresentaram deslocamento positivo no vácuo os derivados com relação a avobenzona, no vácuo. A estrutura que

apresentou maior deslocamento foi o derivado da avobenzona com -NO<sub>2</sub>, um desativante forte (Tabela1).

**Figura 1.** Variação do comprimento de onda com relação aos valores experimentais.

Os valores calculados estão em concordância com os valores experimentais, com exceção do -NO<sub>2</sub>. Para a maior parte das moléculas os



resultados TD/B3LYP apresentam maior concordância com o experimental.

Tabela 1 – Variação do comprimento de onda com relação à estrutura no vácuo. Resultados B3LYP, em nm (entre parêntesis PBE1PBE).

	Etanol	Benzeno	DMSO
AVO-NO <sub>2</sub>	35,85 (26,90)	20,271 (6,63)	38,06 28,89

### Conclusões

Os métodos TD/B3LYP e TD/PBE1PBE apresentaram uma boa correlação com o efeito batocrômico, tanto do solvente como das substituições. Portanto, este método será útil para previsão do espectro de UV. É importante notar que os resultados com o substituinte -NO<sub>2</sub> deverão ser estudados para determinar a origem do desvio.

### Agradecimentos

CNPq, CAPES, FINEP, FINATEC.

<sup>1</sup>C. Antoniou, M.G. Kosmadaki, A.J. Stratigos, A.D. Katsambas, J. Eur. Academ. Derm. Vener., **2008**, 22, 1110.

<sup>2</sup> Dimosthenis L. Giokas, Amparo Salvador, Alberto Chisvert, TrAC, **2007**, 26, 360.

<sup>3</sup> G. Vielhaber, S. Grether-Beck, O. Koch, W. Johncock, J. Krutmann, Photochem. Photobiol. Sci., 2006, 5, 275.

<sup>4</sup>Cache Workspace 7.5, Fujitsu Limited, 2006.