**ESTUDO IN SILICO DE ATIVOS FOTOPROTETORES DERIVADOS DE BENZOTIAZOL NA COSMETOLOGIA**

Gustavo Alencar dos Santos¹; João Victor Teixeira Gomes2; Murilo Lamim Bello3; Bianca Aloise Maneira Corrêa Santos4.

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro. (alencargusta@gmail.com).

² Universidade Federal do Rio de Janeiro. (joao.v8@live.com).

3 Universidade Federal do Rio de Janeiro. (murilo.bello@hotmail.com)

4 Universidade Federal do Rio de Janeiro. (bialoise.santos@gmail.com)

A radiação solar abrange os comprimentos de onda da radiação ultravioleta (280-400nm) (UV), o quais estão associados a diversos danos na pele de seres humanos, sendo o mais preocupante o câncer de pele. Devido a isso, é fundamental procurar meios de se proteger dessa radiação através do uso de vestimentas, óculos de sol, e, principalmente, protetores solares. Os filtros solares são os ativos presentes na formulação destes produtos. Contudo, apesar da clara importância do uso de filtros UV, alguns deles podem causar efeitos adversos locais ou sistêmicos em humanos e impactam o meio ambiente. Ademais, diversos filtros solares apresentam problemas de fotoinstabilidade relatados na literatura. Dessa forma, se torna nítida a importância de buscar desenvolver racionalmente novos compostos mais eficazes e seguros. Em estudo anterior conduzido por DJUIDJE e colaboradores (2020), buscou-se sintetizar derivados de benzotiazol – estrutura amplamente representada na terapêutica – e avaliar suas propriedades fotoprotetora, antioxidante e antifúngica. Devido a modelagem molecular atuar como uma ferramenta capaz de orientar o planejamento de compostos químicos, o presente trabalho teve como objetivo realizar cálculos teóricos de absorção UV e atividade antioxidante dos compostos derivados de benzotiazol. A princípio, realizou-se o desenho 3D das estruturas, seguido pela análise conformacional pelo campo de força MMFF94 e selecionou-se os três confôrmeros de menor energia para cada composto. A otimização geométrica se deu através do método semi-empírico PM7 e do método DFT/B3LYP. Os cálculos quânticos no estado excitado (TD-DFT) foram realizados com a finalidade de avaliar o comportamento dos compostos em seu estado excitado. Os descritores de reatividade foram obtidos com a finalidade de analisar o comportamento antioxidante desses compostos. Os resultados obtidos se provaram consistentes com os dados experimentais de absorção UV, garantindo boa similaridade e demonstrando a acurácia da metodologia adotada. O presente trabalho destaca a importância da modelagem molecular como uma ferramenta extremamente eficaz no apoio à pesquisa de síntese, aumentando a possibilidade de obtenção de compostos promissores, reduzindo custos e a produção de efluentes.

**Keywords ou Palavras-chave:** modelagem-molecular, fotoproteção, cosmetologia

**Acknowledgments ou Agradecimentos: CNPQ, CAPES, LaPFarSC**