

UV-apsorpcijska svojstva π konjugiranog sustava dibenzalacetona

Sara Polašek, Marta Tojčić, Marta Žuvić

4. razred

Prirodoslovna škola Vladimira Preloga

Mentor: Gordana Majstorović, dipl. ing. kemije

Ključne riječi: Claisen-Schmidt kondenzacija; dibenzalaceton; batokromni pomak; UV-Vis; IR; fotostabilnost

Sažetak

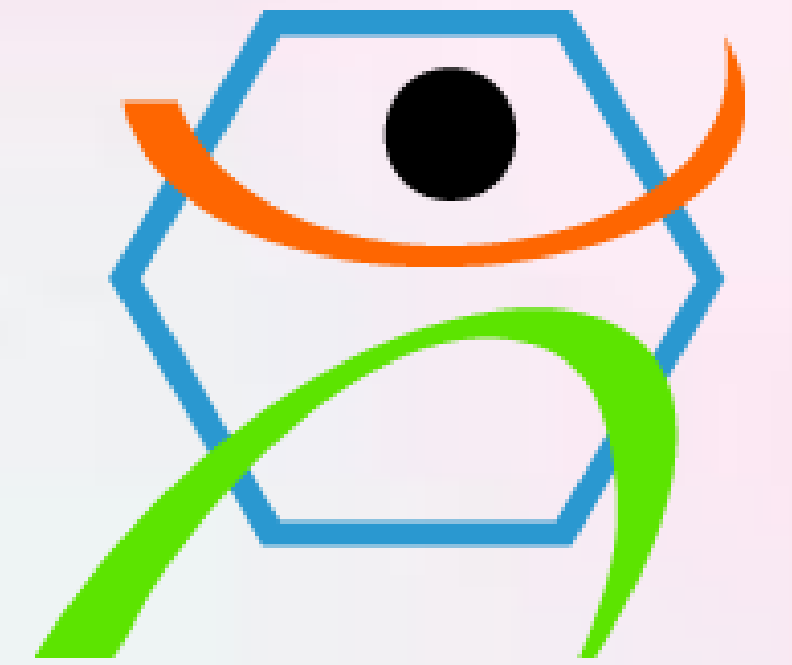
U ovom radu istražena su spektroskopska svojstva dibenzalacetona te njegova stabilnost pri izlaganju UV zračenju. Analizom UV-Vis spektara utvrđeno je da apsorpcijski maksimum dibenzalacetona nastupa pri većim valnim duljinama u odnosu na polazne reaktante benzaldehid i aceton. Ovaj batokromni pomak posljedica je proširenog konjugiranog π -sustava u molekuli dibenzalacetona, koji omogućuje učinkovitiju delokalizaciju π -elektrona i smanjuje energijski razmak između HOMO i LUMO orbitala. Time dolazi do apsorpcije zračenja niže energije, odnosno veće valne duljine, što je u skladu s teorijskim očekivanjima za konjugirane α,β -nezasićene karbonilne spojeve.

Također je ispitana promjena UV-Vis spektra dibenzalacetona nakon izlaganja UV zračenju. Usporedba spektara prije i nakon ozračivanja pokazala je da tijekom promatranog vremenskog razdoblja nije došlo do značajne promjene položaja apsorpcijskog maksimuma niti do pojave novih apsorpcijskih vrpca. Takav rezultat upućuje na relativnu fotokemijsku stabilnost dibenzalacetona u korištenim eksperimentalnim uvjetima, odnosno na to da izlaganje UV zračenju nije uzrokovalo značajnu razgradnju ili strukturne promjene molekule koje bi se očitovale u promjeni spektra.

Dobiveni rezultati potvrđuju da konjugirani sustav dvostrukih veza u molekuli dibenzalacetona značajno utječe na njegova optička svojstva te omogućuje apsorpciju UV zračenja u području većih valnih duljina. Istodobno, stabilnost apsorpcijskog maksimuma nakon izlaganja UV zračenju ukazuje na određeni stupanj fotostabilnosti ovog spoja u otopini. Ova svojstva važna su za razumijevanje ponašanja konjugiranih organskih molekula pri interakciji s UV zračenjem te doprinose boljem uvidu u potencijalnu primjenu takvih spojeva kao UV apsorbera.



UV-apsorpcijska svojstva π -konjugiranog sustava dibenzalacetona



Autori: Sara Polašek, Marta Tojčić, Marta Žuvić, 4. razred prirodoslovne gimnazije
Mentor: Gordana Majstorović, dipl. ing. kemije
Prirodoslovna škola Vladimira Preloga

UVOD

Apsorpcija ultraljubičastog zračenja u organskim molekulama određena je njihovom elektronskom strukturom. Povećana konjugacija rezultira batokromnim pomakom prema većim valnim duljinama. Dibenzalacetone (DBA) korišten je kao modelni spoj zbog svoje izražene konjugacije koja omogućuje učinkovitu apsorpciju UV zračenja te ukazuje na njegov potencijal kao UV filter.

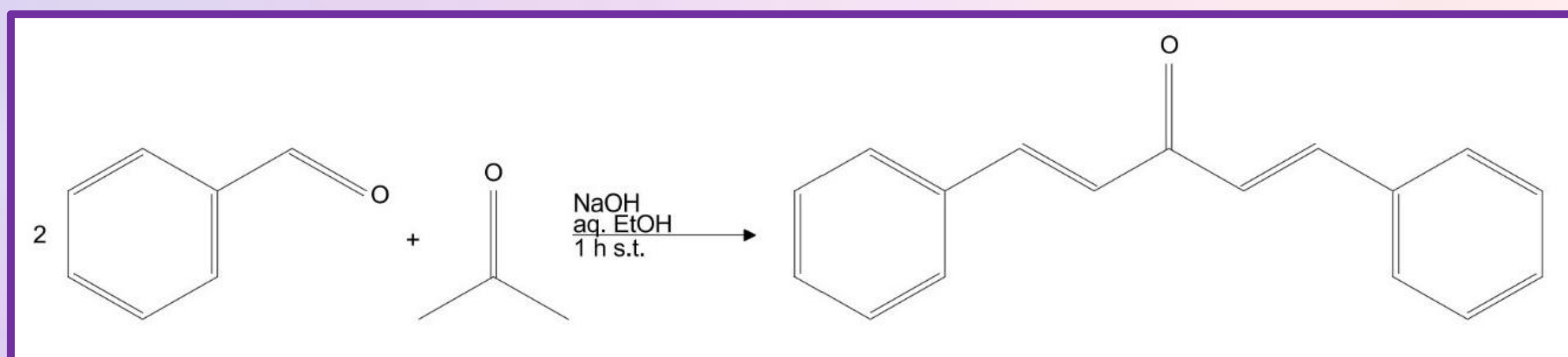
CILJEVI I HIPOTEZE

Cilj istraživanja bio je ispitati optička svojstva sintetiziranog DBA UV-Vis spektrofotometrijom, usporediti položaj apsorpcijskog maksimuma s polaznim reaktantima te utvrditi dolazi li do promjene u apsorbanciji tijekom izlaganja uzorka DBA UV zračenju.

Pretpostavlja se da se apsorpcijski maksimum dibenzalacetona nalazi pri većim valnim duljinama u odnosu na polazne reaktante benzaldehid i aceton te da izlaganje dibenzalacetona UV zračenju neće uzrokovati značajnu promjenu položaja apsorpcijskog maksimuma.

MATERIJALI I METODE

Sintetiziran je uzorak dibenzalacetona Claisen-Schmidtovom kondenzacijom (slika 1).



Slika 1 JKR sinteze dibenzalacetona

Utvrđena je čistoća produkta analizom tališta i provedena je spektroskopska karakterizacija (slika 2). UV-Vis spektrofotometrom izmjerena je apsorbanija pet različitih koncentracija DBA, apsorbanija benzaldehida i acetona iz kojih je DBA sintetiziran te apsorbanija DBA prije i nakon izlaganja UV lampi (slika 3). Iz vrijednosti apsorbanija izračunat je zaštitni faktor.



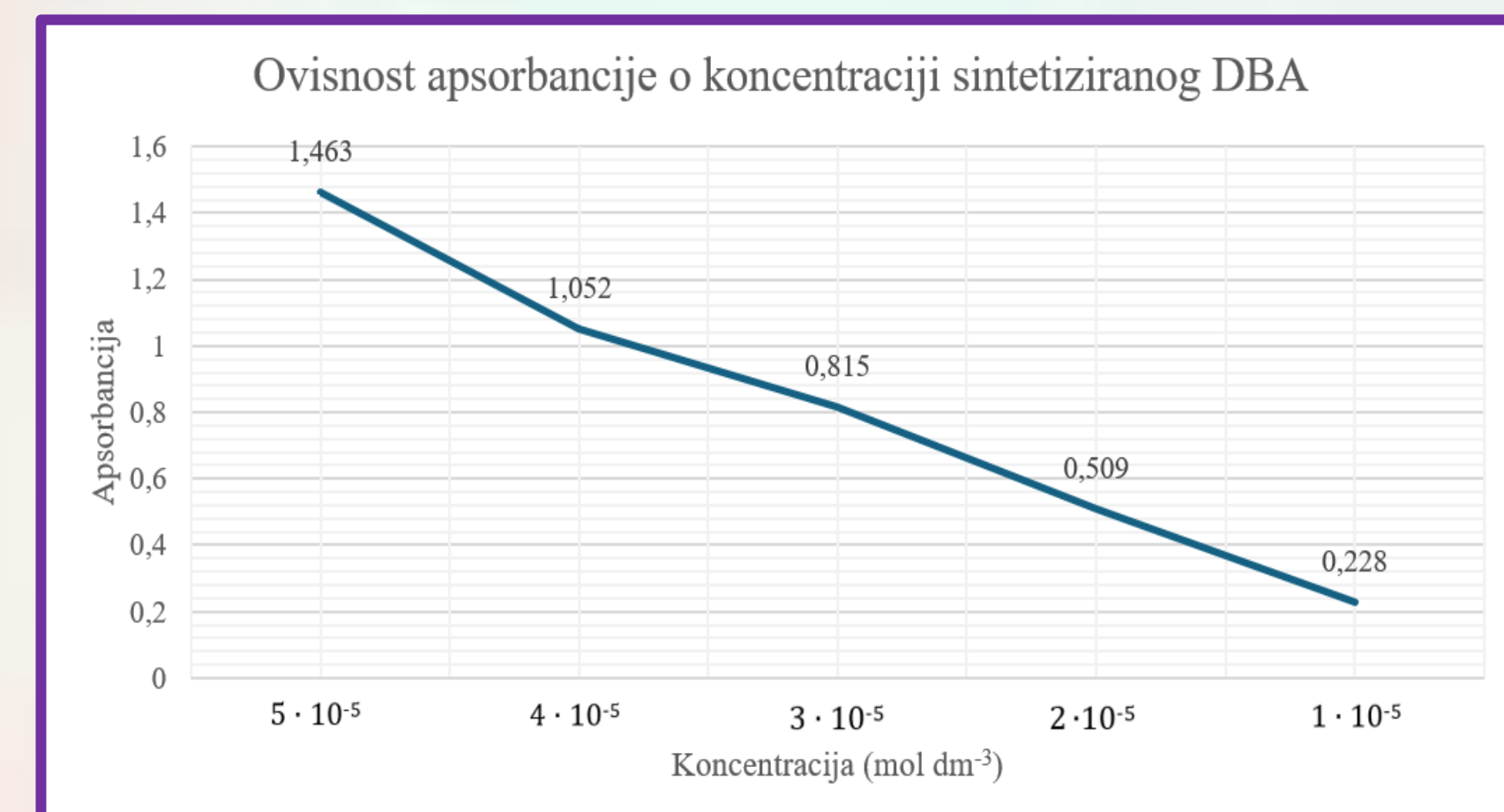
Slika 2 Snimanje IR spektra



Slika 3 Uzorak DBA pod UV lampom

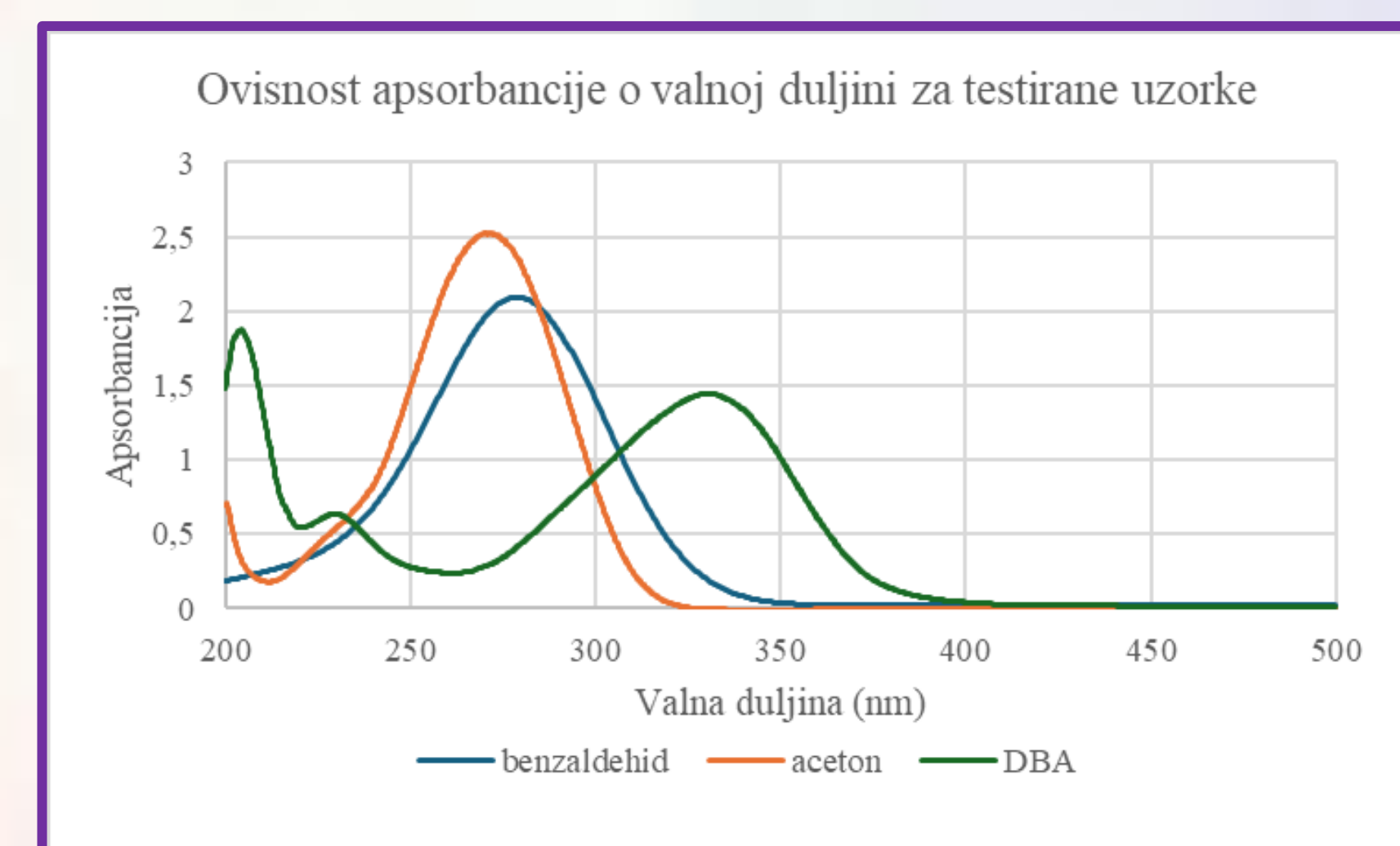
REZULTATI

Vrijednosti apsorbanije izmjerene za pet koncentracija DBA u skladu su s Beer-Lambertovim zakonom, odnosno zabilježena je linearna ovisnost apsorbanije o koncentraciji (slika 4).



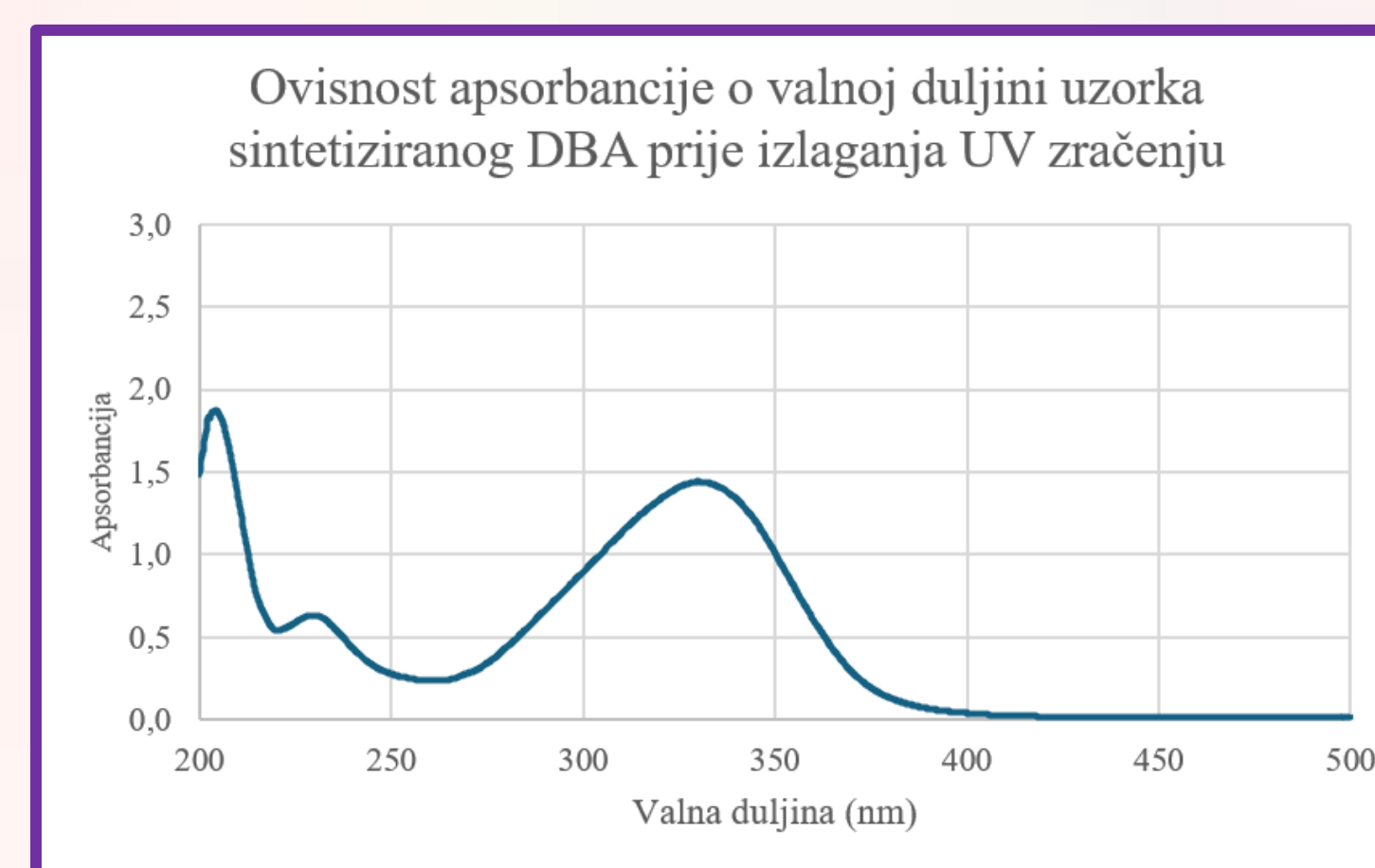
Slika 4 Ovisnost apsorbanije o koncentraciji sintetiziranog DBA

Otopina acetona pokazala je maksimalnu apsorbaniju na 272 nm, a benzaldehid na 279 nm (slika 5). Razlika u valnim duljinama apsorpcijskog maksimuma u odnosu na DBA (330 nm) ukazuje na batokromni pomak.

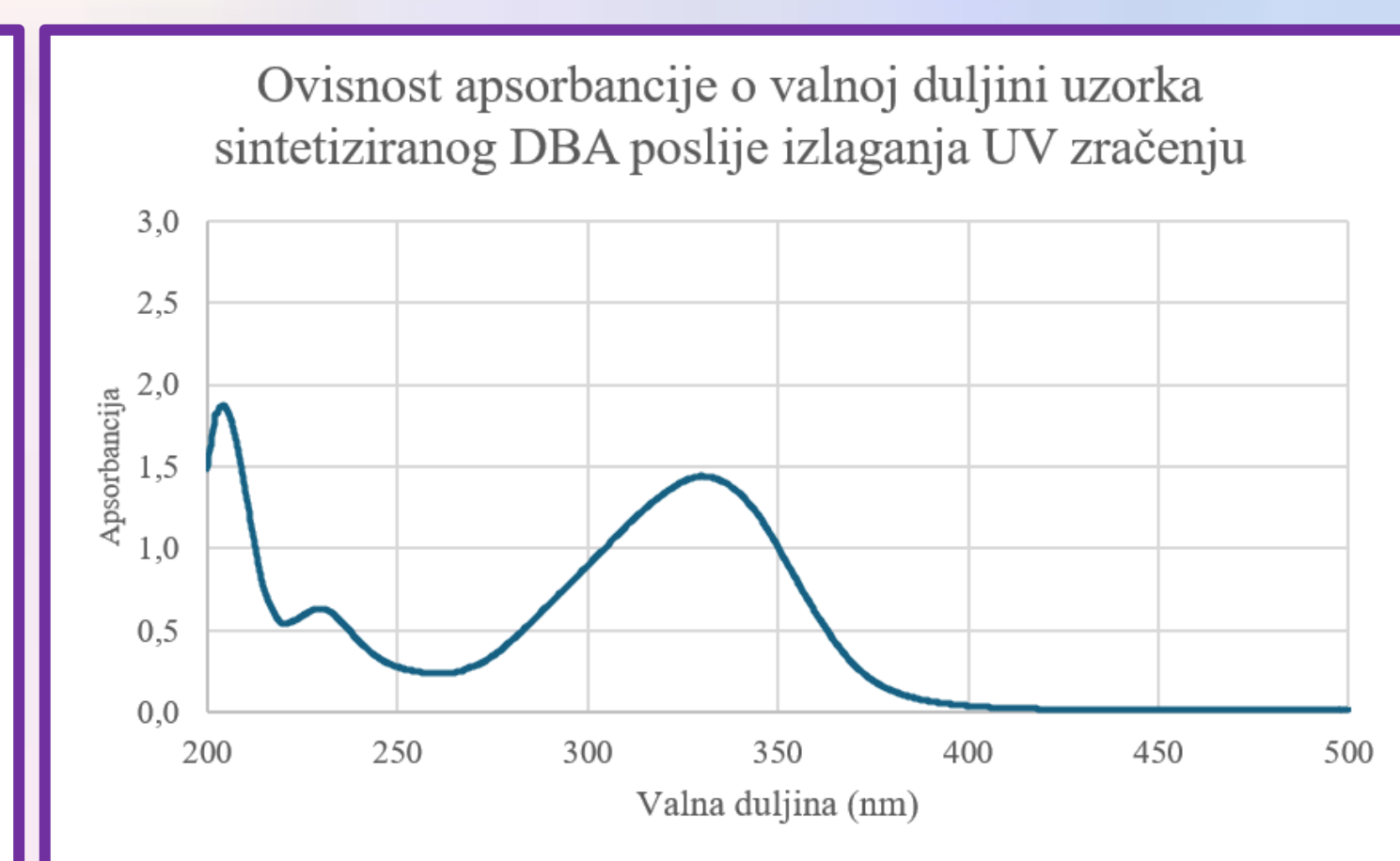


Slika 5 Ovisnost apsorbanije o valnoj duljini za uzorke benzaldehida, acetona i DBA

Usporedba spektra DBA prije (slika 6) i nakon (slika 7) izlaganja UV-lampi pokazala je približno jednake apsorpcijske profile.



Slika 6 Ovisnost apsorbanije o valnoj duljini uzorka sintetiziranog DBA prije izlaganja UV zračenju



Slika 7 Ovisnost apsorbanije o valnoj duljini uzorka sintetiziranog DBA poslije izlaganja UV zračenju

Eksperimentalno određena vrijednost zaštitnog faktora iznosila je **9,93**.

LITERATURA

- Abuellla, K.E., Gaid, S.N., Khattab, M.A., Rashwan, K.O. & Sheta, N.M. (2025). Photoprotective efficacy of dibenzalacetone in sunscreen formulations: Physicochemical properties, synthesis, characterization, potential applications in sunscreen and biological activities. *International Journal of Cosmetic Science*, 47(6): 1125-1135.
- Azevedo, J., Junior, N. & Soares, C. (1999). UVA/UVB sunscreen determination by second-order derivative ultraviolet spectrophotometry. *Farmaco*, 54: 573-578.
- Badal, M.M.R., Ashekul Islam, H.M., Maniruzzaman, M. & Abu Yousuf, M. (2020). Acidochromic Behavior of Dibenzylidene Cyclohexanone-Based Bischalcone: Experimental and Theoretical Study. *ACS omega*, 5(36): 22978-22983.
- Blažević, I., Kos, K., Kovačević, M., Marković, T., Sović, L. & Miloloža, M. (2023). SPF – super problematična formula? Aktivni sastojci krema za sunčanje u vodenom okolišu. *Kemija u industriji*, 72(3-4): 257-267.
- da Silva Marcelino, P., Martinez, R.M., Daneluti, A.L.M., Morocho-Jácome, A.L., Pessoa, F.V.L.S., Rijo, P., Rosado, C., Velasco, M.V.R. & Baby, A.R. (2023). In Vitro Photoprotection and Functional Photostability of Sunscreen Lipsticks Containing Inorganic Active Compounds. *Cosmetics*, 10(2): 46.
- Dutra, E., Oliveira, D., Kedor-Hackmann, E. & Santoro, M. (2004). Determination of sun protection factor (SPF) of sunscreens by ultraviolet spectrophotometry. *Revista Brasileira De Ciencia Do Solo*, 40(3): 381-385.
- Flauder, E. (2021). Dermokozmetički pripravci s UV zaštitom i zdravlje kože. Diplomski rad, Sveučilište u Zagrebu.
- Houshia, O., Walwil, A., Jumaa, H., Orareya, H., Daraghme, H., Daraghme, I., Owies, A. & Qushtom, A. (2019). Assessment of the Ratio of Geometric Isomers of Dibenzalacetone Spectroscopically. *Journal of Pharmaceutical Research International*, 31(4): 1-9.
- Jablonski, N.G. & Chaplin, G. (2010). Human skin pigmentation as an adaptation to UV radiation. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 107(Suppl 2): 8962-8968.
- Jadhav, S.D., Lokhande, R.P. & Hilal, N.E. (2023). Review on synthesis of dibenzalacetone from benzaldehyde by Claisen-Schmidt reaction and their biological activities. *World Journal of Pharmaceutical Research*, 12(5): 429-437.
- Kuhar, M. (2014). Modeliranje zračenja Sunčeve atmosfere na sub-mm, mm i cm valnim duljinama. Diplomski rad, Sveučilište u Zagrebu.
- Sayre, R.M., Agin, P.P., LeVee, G.J., Marlowe, E. (1979). A comparison of in vivo and in vitro testing of sunscreening formulas. *Photochem Photobiol*, 29(3): 559-566.
- Singer, S., Karrer, S. & Berneburg, M. (2019). Modern sun protection. *Current Opinion in Pharmacology*, 46: 24-28.
- Sudha, S., Sundaraganesan, N., Vanchinathan, K., Muthu, K. & Meenakshisundaram, S.P. (2012). Spectroscopic (FTIR, FT-Raman, NMR and UV) and molecular structure investigations of 1,5-diphenylpenta-1,4-dien-3-one: A combined experimental and theoretical study. *Journal of Molecular Structure*, 1030: 191-203.

