



Faculty of Sciences and Technology
Department of Process Engineering
Ref :...../U.M/F.S. T/2026

كلية العلوم والتكنولوجيا
قسم هندسة الطرائق
رقم: / ج. م / ك.ع.ت/2026

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : **GÉNIE DES PROCÉDÉS**

Option : **GÉNIE DES PROCÉDÉS DES MATÉRIAUX**

THÈME

**Modélisation de nouveaux composés à base de benzophénone
pour la protection contre les rayons UV**

Présenté par :

Mouna Alia Ismahane

Soutenu le 17/06/ 2026 devant le jury composé de :

Président :	MEKIBES Zohra	MCB	Université de Mostaganem
Examineur :	BOUBEGRA Naima	MCA	Université de Mostaganem
Rapporteur :	BELKAFOUF Nour El Houda	MCB	Université de Mostaganem

Année Universitaire 2025/2026

Remerciements

Le présent mémoire est le fruit des travaux réalisés au sein du Laboratoire de Technologie et Propriétés du Solide (LTPS) de l'Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.

J'exprime ma profonde gratitude à mon encadrante, Madame Belkafouf Nour El Houda, pour la qualité de son encadrement, sa disponibilité, ses précieux conseils ainsi que son soutien constant tout au long de ce travail. Son accompagnement a largement contribué à l'aboutissement de ce mémoire.

Mes vifs remerciements s'adressent également à Madame Mekibes Zohra pour l'honneur qu'elle me fait en acceptant de présider le jury de ce mémoire.

Je remercie également Madame Boubegra Naima d'avoir accepté d'examiner et d'évaluer ce travail.

Enfin, j'adresse mes sincères remerciements à l'ensemble des enseignants qui ont contribué à ma formation et à mon parcours universitaire.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à mes chers parents, et surtout à ma chère maman, en reconnaissance de son amour, ses sacrifices et son soutien inconditionnel tout au long de ma vie.

À mes chères tantes : Hadjira, Meriem et Amina, qui ont toujours été présentes à mes côtés et m'ont soutenue dans les moments difficiles.

À mes oncles, qui m'ont également apporté leur soutien et leurs encouragements.

A ma chère grand-mère, que Dieu lui fasse miséricorde, dont les prières et l'amour m'accompagnent encore aujourd'hui et pour toujours.

À mon grand-père, qui prie toujours pour moi et me soutient par ses prières et sa bénédiction.

À mes frères Abdrahmne et Ismail, pour leur encouragement et leur présence dans ma vie.

À mes amis Saad et Leila, pour leur aide, leur soutien et les beaux moments partagés tout au long de mon parcours universitaire.

À mes camarades de classe, avec qui j'ai partagé de beaux moments, de l'entraide et un parcours universitaire inoubliable.

À tous ceux qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce travail

Résumé

Ce travail présente une étude théorique de deux dérivés de la famille des benzophénones (BZP1 et BZP2) en tant que filtres UV potentiels, en utilisant les méthodes DFT et TD-DFT. Les résultats montrent un bon accord entre les structures optimisées et les données expérimentales de diffraction des rayons X (DRX). L'analyse des propriétés électroniques met en évidence une meilleure stabilité de la structure BZP2. Les deux composés présentent une absorption efficace des rayonnements UV, avec une performance supérieure pour BZP2. Par ailleurs, Les propriétés pharmacocinétiques et toxicologiques prédites par pkCSM indiquent que BZP2 possède une faible perméabilité cutanée et ne présente pas de sensibilisation cutanée, contrairement à BZP1. Ainsi, BZP2 apparaît comme le candidat le plus prometteur pour une application en tant que filtre UV.

Mots-clés : benzophénones, DFT, TD-DFT, filtre UV, pkCSM.

Abstract

This work presents a theoretical study of two derivatives of the benzophenone family (BZP1 and BZP2) as potential UV filters, using DFT and TD-DFT methods. The results show good agreement between the optimized structures and experimental X-ray diffraction (XRD) data. The analysis of electronic properties highlights a better stability of the BZP2 structure. Both compounds exhibit effective UV light absorption, with superior performance for BZP2. In addition, the pharmacokinetic and toxicological properties predicted by pkCSM indicate that BZP2 has low skin permeability and does not present skin sensitization, unlike BZP1. Thus, BZP2 appears to be the most promising candidate for application as a UV filter.

Keywords: benzophenones, DFT, TD-DFT, UV filter, pkCSM.

المخلص

يقدم هذا العمل دراسة نظرية لمشتقين من عائلة البنزوفينونات (BZP1) و (BZP2) بهدف استخدامهما كمرشحات للأشعة فوق البنفسجية، وذلك بالاعتماد على طريقتي DFT و TD-DFT. أظهرت النتائج توافقاً جيداً بين البنى الجزيئية المحسنة والبيانات التجريبية المستخلصة من حيود الأشعة السينية (DRX). كما بين تحليل الخصائص الإلكترونية أن المركب BZP2 يتمتع باستقرار أعلى مقارنة بـ BZP1 وأظهرت الدراسة كذلك قدرة المركبين على امتصاص الأشعة فوق البنفسجية بفعالية، مع أداء أفضل للمركب BZP2 إضافة إلى ذلك، كشفت نتائج الخصائص الحركية الدوائية والسمية المتوقعة بواسطة برنامج pkCSM أن المركب BZP2 يتميز بنفاذية جلدية منخفضة ولا يسبب تحسناً جلدياً، خلافاً للمركب BZP1 وبناءً على هذه النتائج، يُعتبر BZP2 المرشح الأكثر ملاءمة للاستعمال كمرشح للأشعة فوق البنفسجية.

الكلمات المفتاحية: البنزوفينونات، DFT، TD-DFT، مرشحات الأشعة فوق البنفسجية، pkCSM.

Sommaire

Introduction Générale.....	-1-
Références bibliographiques.....	-3-
Partie I. Les filtres organiques UV et la modélisation moléculaire	
I .1. Les filtres organique UV.....	-5-
I.1.1. Définition des filtres organiques UV.....	-5-
I.1.2. Classification des filtres UV.....	-5-
I.1.3. Applications des filtres organiques UV.....	-6-
I.2. Modélisation moléculaire par la DFT.....	-8-
I.2.1. Introduction.....	-8-
I.2.2. Principes généraux de la DFT.....	-8-
I.2.3. Théorie de la TD-DFT et calcul des spectres UV-Visible.....	-9-
Références bibliographiques.....	-11-
Partie II. Résultats et discussion	
II.1. Introduction.....	-13-
II.2. Méthodologie de calcul.....	-13-
II.3. Propriétés moléculaires des structures BZP.....	-14-
II.3.1. Propriétés géométriques.....	-14-
II.3.2. Propriétés physicochimiques.....	-16-
II.4. Evaluation de la protection contre les rayons UV des structures BZP	-18-
II.4.1. Propriétés optiques.....	-18-

II.4.2. Propriétés pharmacocinétiques	-19-
II.4.3. Propriétés toxicologiques.....	-21-
Références bibliographiques.....	-22-
Conclusion générale et perspectives.....	-24-

Annexe

Paramètres géométriques de la structure BZP1

Paramètres géométriques de la structure BZP1

Liste des figures

Figure II.1. Structures moléculaires BZP1 et BZP2.....	-15-
Figure II.2. Structures moléculaires BZP1 et BZP2 obtenues par modélisation moléculaire en utilisant la DFT/B3LYP/6-311G (d, p)	-15-
Figure II.3. Représentation des orbitales moléculaires frontières de BZP1 et BZP2.....	-16-
Figure II.4. Spectres UV Visible des structures BZP1 et BZP2 en utilisant l'éthanol comme solvant.....	-19-

Liste des tableaux

Tableau II.1. Indices globaux de réactivité des molécules BZP1 et BZP2.....-17-

Tableau II.2. Paramètres pharmacocinétiques prédits de BZP1 et BZP2 par l'outil pkCSM.....-20-

Liste des abréviations

BZP	Benzophénone
B3LYP	Becke 3-paramètres Lee-Yang-Parr
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité
DRX	Diffraction de rayons X
HOMO	Orbitale moléculaire occupée la plus haute
LUMO	Orbitale moléculaire vacante la plus basse
TD-DFT	Théorie de la fonctionnelle de la Densité dépendante du Temps
UV	Ultraviolet

Introduction Générale

Introduction Générale

Le rayonnement solaire constitue une source d'énergie essentielle à la vie sur terre. Cependant, une exposition excessive aux rayons ultraviolets (UV) peut provoquer des effets néfastes sur la peau, tels qu'un vieillissement prématuré, des dommages cellulaires et un risque accru de cancer cutané. Les UV sont classés en trois types : UVA, UVB et UVC, qui présentent des effets différents sur les tissus biologiques [1,2]. Afin de limiter ces effets nocifs, le développement de filtres UV efficaces et sûrs représente un enjeu important dans les domaines cosmétique et dermatologique. Les filtres UV peuvent absorber, réfléchir ou diffuser le rayonnement ultraviolet afin de protéger la peau contre ses effets délétères. Parmi les composés les plus utilisés, les dérivés de la benzophénone se distinguent par leur capacité à absorber efficacement les rayonnements UVA et UVB grâce à leur système aromatique conjugué, capable de transformer l'énergie absorbée en chaleur non dangereuse [3,4].

Dans ce contexte, la modélisation moléculaire constitue un outil scientifique important permettant d'étudier et de prédire les propriétés physicochimiques des molécules utilisées pour filtrer le rayonnement UV. Parmi les méthodes les plus utilisées, la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) et son extension dépendante du temps (TD-DFT) sont largement employées. Ces méthodes permettent de déterminer les propriétés électroniques et optiques, notamment les orbitales moléculaires frontières HOMO et LUMO, d'évaluer le gap énergétique et de simuler les spectres d'absorption UV-Visible [5–7].

Ce travail porte sur deux composés de la famille des benzophénones, appelés BZP1 et BZP2, déjà synthétisés et caractérisés expérimentalement par diffraction des rayons X (DRX) [8, 9]. La modélisation moléculaire permet de compléter ces résultats expérimentaux en étudiant leurs propriétés géométriques, électroniques et optiques, ainsi que certains paramètres pharmacocinétiques et toxicologiques, afin d'évaluer leur efficacité en tant que filtres UV.

Ce mémoire est organisé en deux parties. La première partie présente les filtres UV organiques ainsi que les bases théoriques de la modélisation moléculaire. La deuxième partie décrit la méthodologie de calcul, la modélisation des deux composés, ainsi que l'analyse et la discussion des résultats obtenus.

Enfin, une conclusion générale ainsi que des perspectives sont présentées.

Références Bibliographiques

- [1] World Health Organization (WHO). Global Solar UV Index: A Practical Guide, 2002.
- [2] Diffey, B. L. (2002). Sources and measurement of ultraviolet radiation. *Methods*, 28(1), 4–13.
- [3] Shaath, N. A. (2010). Ultraviolet filters. *Photochemistry and Photobiology Sciences*.
- [4] Serpone, N., Salinaro, A., & Emeline, A. (2002). Deleterious effects of sunscreen UV filters. *Journal of Photochemistry and Photobiology B*.
- [5] Parr, R. G., & Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*.
- [6] Koch, W., & Holthausen, M. (2001). *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*.
- [7] Casida, M. E. (1995). *Time-Dependent Density Functional Response Theory*.
- [8] Javed, S., et al. (2016). 2-Amino-5-chlorobenzophenone.
- [9] Geetha, D., et al. (2021). Crystal structure and Hirshfeld-surface analysis of a monoclinic polymorph of 2-amino-5-chlorobenzophenone oxime at 90 K.

Partie I :

Les filtres organiques UV
et la modélisation moléculaire

I .1 Les filtres organique UV

I.1.1. Définition des filtres organiques UV

Les filtres organiques UV sont des composés chimiques caractérisés par la présence de groupements chromophores capables d'absorber les rayonnements ultraviolets, notamment les UVB et les UVA. Après absorption du rayonnement, l'énergie absorbée est principalement dissipée sous forme de chaleur, ce qui permet de limiter les effets nocifs des rayons UV sur la peau ainsi que sur certains matériaux [1–2].

Grâce à leurs propriétés d'absorption optique, les filtres organiques UV jouent un rôle essentiel dans les produits de photoprotection. Leur efficacité dépend principalement de leur structure moléculaire, de la nature des groupements chromophores ainsi que de l'étendue de la conjugaison électronique présente dans la molécule. Le développement de nouvelles molécules plus efficaces et plus stables constitue aujourd'hui un axe important de recherche dans le domaine des matériaux photoprotecteurs [2–3].

I.1.2. Classification des filtres UV

Les filtres ultraviolets peuvent être classés selon plusieurs critères, notamment leur nature chimique et la gamme du spectre UV qu'ils couvrent [2].

➤ Classification selon la nature chimique

Les filtres UV se divisent principalement en deux grandes catégories : les filtres organiques et les filtres inorganiques.

- Les filtres organiques sont des molécules à base de carbone capables d'absorber l'énergie des rayons UV puis de la dissiper sous forme de chaleur ou d'énergie de faible intensité. Ils possèdent généralement des structures aromatiques contenant des systèmes chromophores spécifiques qui absorbent dans certaines régions du spectre ultraviolet [2,3]
- Les filtres inorganiques, également appelés filtres minéraux, agissent principalement par réflexion et diffusion des rayonnements UV. Les composés les plus utilisés dans cette

catégorie sont le dioxyde de titane (TiO_2) et l'oxyde de zinc (ZnO), reconnus pour leur efficacité et leur stabilité photochimique [4].

➤ **Classification selon la gamme de rayonnement UV**

Les filtres UV peuvent également être classés selon la région du spectre ultraviolet contre laquelle ils assurent une protection. Certains filtres protègent principalement contre les rayons UVB, situés entre 280 et 320 nm, responsables notamment des coups de soleil et des brûlures cutanées. D'autres absorbent principalement les rayons UVA, compris entre 320 et 400 nm, impliqués dans le photovieillissement cutané et certains dommages cellulaires. Enfin, les filtres à large spectre assurent une protection simultanée contre les UVA et les UVB, ce qui constitue aujourd'hui une caractéristique essentielle des formulations photoprotectrices modernes [1].

I.1.3. Applications des filtres organiques UV

➤ **Applications en cosmétique et en dermatologie :**

L'application la plus courante des filtres organiques UV concerne les formulations solaires et les produits de soins photoprotecteurs. Ils sont incorporés dans les crèmes solaires, les lotions, les sprays photoprotecteurs ainsi que dans différents produits cosmétiques contenant un facteur de protection solaire (SPF). Ces composés contribuent à prévenir les érythèmes provoqués par les UVB, à réduire le photovieillissement associé aux UVA et à limiter les lésions cutanées induites par une exposition prolongée au rayonnement ultraviolet. Leur utilisation régulière joue également un rôle important dans la prévention des dommages cutanés liés au soleil [1,2].

➤ **Applications pharmaceutiques**

Dans le domaine pharmaceutique, les filtres organiques UV sont utilisés comme agents photostabilisants afin de protéger certains principes actifs sensibles à la lumière ultraviolette. L'exposition aux UV peut provoquer la dégradation chimique de plusieurs substances médicamenteuses et entraîner une diminution de leur efficacité thérapeutique [5].

L'incorporation de filtres UV dans les formulations pharmaceutiques, notamment dermatologiques, permet ainsi d'améliorer la stabilité des médicaments et d'augmenter leur durée de conservation.

➤ Applications dans la protection des matériaux

Les filtres organiques UV sont également utilisés dans plusieurs applications industrielles afin de protéger les matériaux contre les phénomènes de photodégradation causés par le rayonnement solaire. Dans le domaine des polymères, ils sont employés comme additifs stabilisants pour absorber les rayonnements UV avant qu'ils n'endommagent la structure du matériau. Cette protection permet de limiter le jaunissement, la fragilisation et la perte des propriétés mécaniques des polymères exposés au soleil. Ils sont également intégrés dans les peintures et les revêtements afin d'améliorer leur résistance aux rayons UV, de prévenir la décoloration et d'augmenter la durabilité des surfaces exposées aux conditions extérieures [6].

I.2. Modélisation moléculaire par la DFT

I.2.1. Introduction

La modélisation moléculaire est une approche théorique qui utilise des méthodes computationnelles afin de représenter, d'étudier et de prédire le comportement des molécules à l'échelle atomique et moléculaire [7]. Parmi les méthodes les plus utilisées dans ce domaine figure la théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT), reconnue pour sa capacité à décrire avec précision les propriétés électroniques et structurales des systèmes moléculaires [8].

La DFT constitue un outil essentiel dans plusieurs domaines scientifiques et industriels, notamment la chimie, la science des matériaux, la biologie et le génie des procédés. Elle permet d'obtenir des informations détaillées sur la structure électronique, les orbitales moléculaires, les propriétés énergétiques ainsi que la réactivité chimique des molécules étudiées [8].

L'objectif principal de la modélisation moléculaire est de fournir une compréhension approfondie des interactions entre les atomes et les molécules, lesquelles peuvent être difficiles, voire impossibles, à observer directement par les méthodes expérimentales conventionnelles [7].

II.2.2. Principes généraux de la DFT

La théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT) est une méthode de calcul quantique largement utilisée pour étudier les propriétés électroniques et structurales des molécules et des matériaux. Contrairement aux méthodes basées sur la fonction d'onde, la DFT repose sur la densité électronique, c'est-à-dire la répartition des électrons dans l'espace, pour décrire le système étudié [8]. Cette approche permet de simplifier les calculs tout en offrant une bonne précision pour de nombreux systèmes chimiques.

Les bases théoriques de la DFT ont été établies par les théorèmes de Hohenberg et Kohn en 1964. Le premier théorème indique que la densité électronique détermine de manière unique toutes les propriétés du système, notamment le potentiel externe et l'énergie totale. Le second théorème montre qu'il existe une fonctionnelle de l'énergie dépendant de la densité électronique, et que l'énergie du système est minimale lorsque la densité électronique exacte de l'état fondamental est obtenue [9]. Ces théorèmes ont permis de reformuler les problèmes de mécanique quantique en fonction de la densité électronique, ce qui facilite l'étude des systèmes moléculaires complexes.

La DFT est aujourd'hui largement employée pour optimiser les structures moléculaires et déterminer la géométrie la plus stable des composés étudiés. Elle permet également de calculer plusieurs propriétés électroniques importantes, telles que les orbitales moléculaires frontières HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) et LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Ces orbitales jouent un rôle essentiel dans l'interprétation de la réactivité chimique, des transferts de charge et des propriétés optoélectroniques des molécules [10].

II.2.3. Théorie de la TD-DFT et calcul des spectres UV-Visible

La théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (Time-Dependent Density Functional Theory, TD-DFT) est une extension de la DFT utilisée pour étudier les états excités des molécules ainsi que leurs propriétés optiques et électroniques [10]. Contrairement à la DFT classique, qui décrit principalement l'état fondamental, la TD-DFT permet d'analyser les transitions électroniques produites lors de l'absorption d'un rayonnement électromagnétique.

La méthode TD-DFT est largement utilisée pour calculer les spectres d'absorption UV-Visible des composés moléculaires. Elle permet de déterminer les longueurs d'onde d'absorption (λ_{max}), les énergies de transition, les forces d'oscillateur ainsi que la nature des transitions électroniques impliquant les orbitales moléculaires frontières, notamment les transitions de type HOMO $\rightarrow$ LUMO [10].

L'étude des spectres UV-Visible fournit des informations importantes sur la capacité des molécules à absorber les rayonnements ultraviolets. Cette analyse permet d'évaluer le comportement photochimique et photophysique des matériaux organiques, ainsi que leur efficacité potentielle dans les applications de protection contre les rayons UV. En particulier, les composés présentant une forte absorption dans la région ultraviolette peuvent être considérés comme de bons candidats pour la conception de matériaux photoprotecteurs.

Ainsi, la combinaison des méthodes DFT et TD-DFT constitue une approche efficace pour étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques des matériaux organiques destinés aux applications de protection contre les rayonnements UV.

Références bibliographiques

- [1] Diffey, B. L. (2001). Sunscreens and UVA Protection: A Major Issue of Minor Importance. *Photochemistry and Photobiology*, 74(1), 61–63.
- [2] Shaath, N. A. (2010). *Sunscreens: Development, Evaluation, and Regulatory Aspects* (3rd ed.). CRC Press, Boca Raton.
- [3] Serpone, N., Dondi, D., & Albini, A. (2007). Inorganic and Organic UV Filters: Their Role and Efficacy in Sunscreens and Suncare Products. *Inorganica Chimica Acta*, 360(3), 794–802.
- [4] Smijs, T. G., & Pavel, S. (2011). Titanium Dioxide and Zinc Oxide Nanoparticles in Sunscreens: Focus on Their Safety and Effectiveness. *Nanotechnology, Science and Applications*, 4, 95–112.
- [5] Florence, A. T., & Attwood, D. (2016). *Physicochemical Principles of Pharmacy* (6th ed.). Pharmaceutical Press, London.
- [6] Allen, N. S., Edge, M., Ortega, A., Sandoval, G., Liauw, C. M., Verran, J., Stratford, M., & McIntyre, R. B. (2000). Aspects of the Thermal Oxidation and Stabilisation of Polymers. *Polymer Degradation and Stability*, 68(3), 363–371.
- [7] Leach, A. R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd ed.). Pearson Education.
- [8] Parr, R. G., & Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press.
- [9] Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864–B871.
- [10] Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). Wiley.

Partie II :

Résultats et discussion

II.1. Introduction

La modélisation moléculaire des composés organiques utilisés comme filtres UV constitue un domaine de recherche très important, notamment dans les applications cosmétiques et pharmaceutiques. Ces composés permettent d'absorber les rayonnements ultraviolets nocifs, contribuant ainsi à la protection de la peau contre leurs effets néfastes [1].

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude des propriétés moléculaires de deux nouveaux composés organiques de la famille des benzophénones (BZP), reconnue pour leur capacité d'absorption dans le domaine des UV [2]. Une attention particulière est portée à leur structure moléculaire ainsi qu'à leurs propriétés physicochimiques, afin de mieux comprendre la relation entre leur structure et leur efficacité en tant que filtres UV.

II.2. Méthodologie de calcul

La modélisation moléculaire des deux structures de benzophénone, notées BZP1 et BZP2, a été réalisée à l'aide du logiciel Gaussian 09 [3], en se basant sur les structures moléculaires obtenues par détermination structurale à partir de la diffraction des rayons X (DRX). La visualisation des structures moléculaires a été réalisée à l'aide du logiciel GaussView [4]. Les calculs computationnels ont été effectués en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ainsi que la méthode TD-DFT, avec la fonctionnelle hybride B3LYP et la base 6-311G (d, p). Cette fonctionnelle a déjà montré de bonnes performances dans la modélisation des molécules organiques utilisées comme filtres des rayonnements UV [5].

L'optimisation géométrique a été réalisée afin d'obtenir la structure la plus stable correspondant au minimum d'énergie. Les indices globaux de réactivité ont été calculés à partir des orbitales moléculaires frontières HOMO et LUMO, permettant ainsi d'évaluer la réactivité des deux molécules étudiées. Leurs propriétés optiques ont été déterminées à l'aide de la méthode TD-DFT afin de simuler les spectres UV-Visible [6]. Enfin, les propriétés pharmacocinétiques et toxicologiques ont été évaluées à l'aide de l'outil pkCSM [7].

II.3. Propriétés moléculaires des structures BZP

II.3.1. Propriétés géométriques

L'étude des propriétés géométriques des molécules permet de comprendre leur stabilité structurale ainsi que la fiabilité des résultats théoriques obtenus. Elle constitue également une étape essentielle pour valider les structures optimisées par rapport aux données expérimentales issues de la diffraction des rayons X (DRX) [6].

Les deux structures moléculaires BZP1 et BZP2 sont illustrées dans la figure II.1. Les paramètres géométriques, tels que les distances interatomiques, les angles de valence et les angles dièdres, ont été déterminés afin de valider leurs structures moléculaires obtenues par DRX [8,9]. Les tableaux 1 à 6, présentés en annexe, montrent une comparaison détaillée entre les paramètres géométriques déterminés expérimentalement et ceux calculés par la méthode DFT.

Un bon accord a été observé entre les résultats expérimentaux obtenus par la DRX et les résultats théoriques calculés par la DFT. Les différences observées peuvent s'expliquer principalement par le fait que les géométries issues de la diffraction des rayons X correspondent à l'état solide (phase condensée), tandis que les calculs théoriques ont été réalisés en phase gazeuse.

Par ailleurs, les deux structures BZP1 et BZP2 ne sont pas planes (figure II.2). Leur non-planéité a été mise en évidence à travers les valeurs des angles dièdres reliant les deux cycles benzéniques : C12–C17–C52–C10 et C19–C10–C52–C17 pour la molécule BZP1, ainsi que C5–C6–C7–C8 et C6–C7–C8–C9 pour la molécule BZP2. Ces géométries optimisées seront utilisées dans la partie suivante pour déterminer leurs propriétés physicochimiques et leur efficacité à absorber les rayons UV.

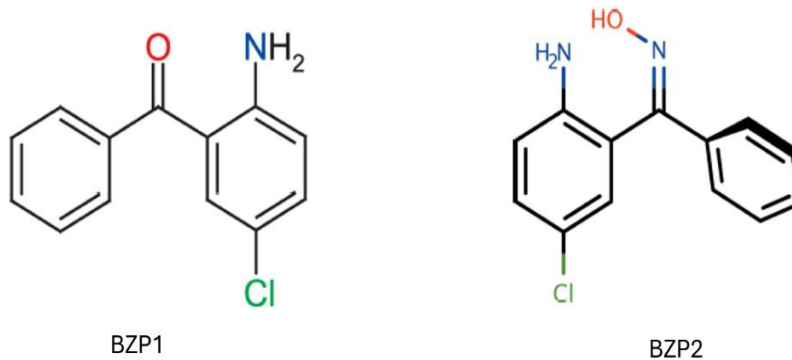


Figure II.1. Structures moléculaires BZP1 et BZP2

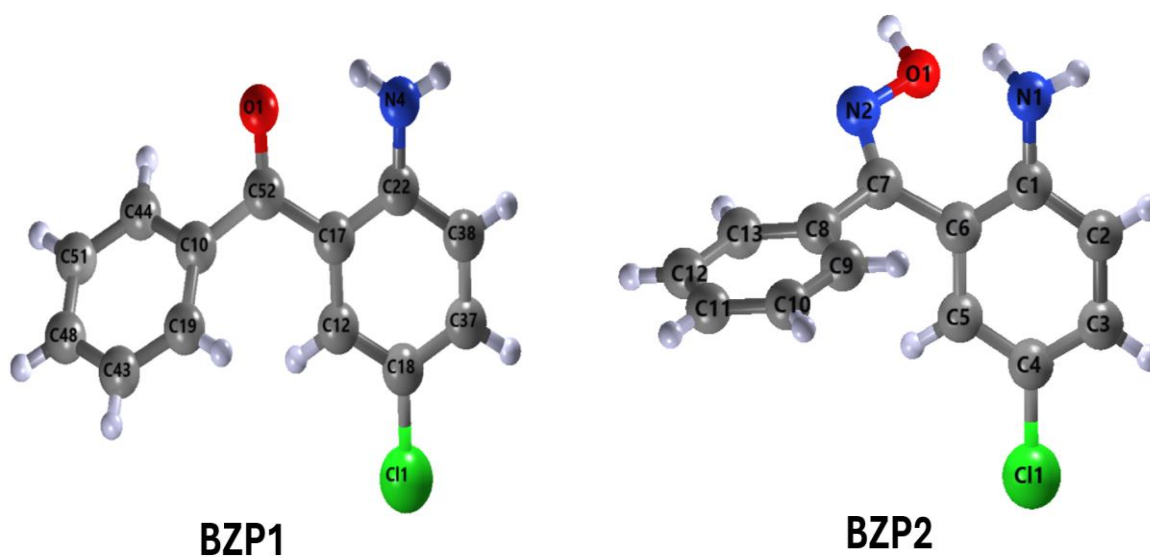


Figure II.2. Structures moléculaires BZP1 et BZP2 obtenues par modélisation moléculaire en utilisant la DFT/B3LYP/6-311G (d, p)

II.3.2. Propriétés physicochimiques

Afin d'étudier le comportement physicochimique des composés BZP1 et BZP2, des indices globaux de réactivité ont été calculés à partir des énergies des orbitales moléculaires frontières HOMO et LUMO. Ces orbitales moléculaires ainsi que les gaps énergétiques des structures BZP1 et BZP2 sont représentés dans la figure II.3.

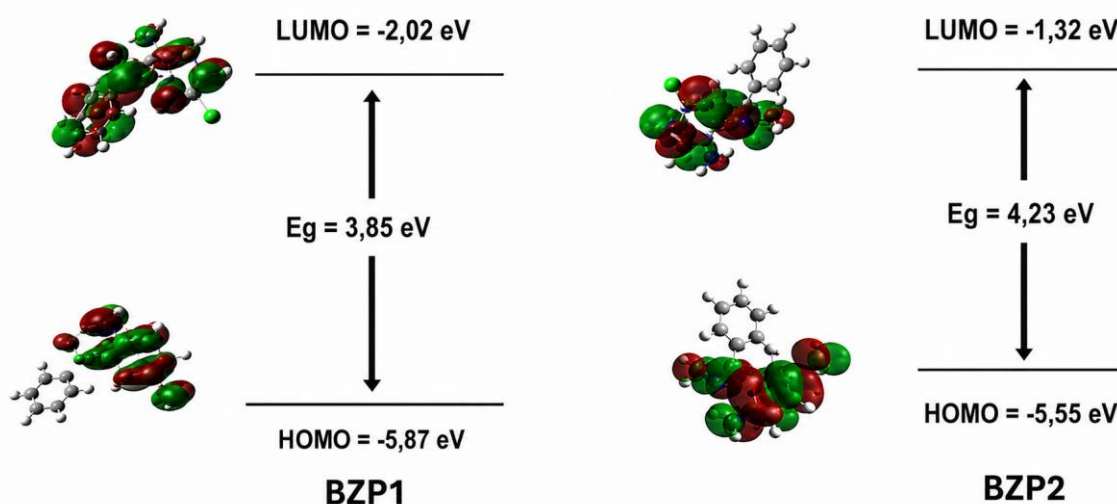


Figure II.3. Représentation des orbitales moléculaires frontières de BZP1 et BZP2

Les indices globaux de réactivité, comme illustre le tableau II.1, comprennent le potentiel d'ionisation (IP), l'affinité électronique (EA), l'électronégativité (χ), le potentiel chimique (μ), la dureté (η), la mollesse (S) et l'indice d'électrophilicité (ω). Les relations utilisées pour déterminer ces indices sont données par les équations (II.1) à (II.7) [6].

$$IP = -E_{HOMO} \quad (II.1)$$

$$EA = -E_{LUMO} \quad (II.2)$$

$$\chi = \frac{1}{2} (IP + EA) \quad (II.3)$$

$$\mu = -\frac{1}{2} (IP + EA) \quad (II.4)$$

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (\text{II.5})$$

$$\eta = \frac{1}{2} (PI - EA) \quad (\text{II.6})$$

$$\xi = \frac{1}{2} (PI - EA) \quad (\text{II.7})$$

Tableau II.1. Indices globaux de réactivité des molécules BZP1 et BZP2

	IP (eV)	EA (eV)	χ (eV)	μ (eV)	η (eV)	ξ (eV)	ω (eV)
BZP1	5,87	2,02	3,94	-3,94	1,92	0,26	4,04
BZP2	5,55	1,32	3,43	-3,43	2,11	0,24	2,79

L'analyse des résultats du tableau II.1 montre que BZP1 présente une électronégativité de 3,94 eV et un potentiel chimique de -3,94 eV, avec une dureté globale de 1,92 eV et une mollesse de 0,26 eV. L'indice d'électrophilicité atteint 4,04 eV. Pour BZP2, l'électronégativité est de 3,43 eV, le potentiel chimique de -3,43 eV, la dureté de 2,11 eV et la mollesse de 0,24 eV, avec un indice d'électrophilicité de 2,79 eV. Le gap énergétique est de 3,85 eV pour BZP1 contre 4,23 eV pour BZP2.

Ces indices globaux de réactivité montrent que le composé BZP1 possède une électronégativité ($\chi = 3,94$ eV) et une électrophilicité ($\omega = 4,04$ eV) plus élevées que celles de BZP2 ($\chi = 3,43$ eV ; $\omega = 2,79$ eV). En revanche, BZP2 présente une dureté ($\eta = 2,11$ eV) supérieure à celle de BZP1 ($\eta = 1,92$ eV), ce qui indique une réactivité chimique plus faible et une stabilité électronique plus importante.

La comparaison des résultats met en évidence des différences importantes dans la réactivité des deux composés. Le gap énergétique plus élevé de BZP2 confirme sa plus grande stabilité chimique et sa moindre réactivité par rapport à BZP1. De plus, la valeur plus faible de l'indice d'électrophilicité de BZP2 suggère une capacité plus limitée à accepter des électrons, traduisant ainsi une réactivité chimique réduite. À l'inverse, BZP1 apparaît légèrement plus réactif, ce qui peut influencer son comportement électronique sous excitation UV.

II.4. Evaluation de la protection contre les rayons UV des structures BZP

II.4.1. Propriétés optiques

Les spectres d'absorption UV-Visible des composés BZP1 et BZP2 ont été déterminés à l'aide de la méthode TD-DFT afin d'analyser leurs propriétés optiques. Les spectres calculés, présentés dans la figure II.4, montrent que les deux composés possèdent deux bandes d'absorption principales localisées dans la région ultraviolette. Ces résultats mettent en évidence leur aptitude à absorber efficacement les rayonnements UV.

Pour le composé BZP1, les maxima d'absorption sont observés à 233,52 nm et 381,81 nm, tandis que pour BZP2, les bandes d'absorption apparaissent à 248,02 nm et 366,48 nm. Les bandes situées dans la région UV proche de 230–250 nm sont attribuées aux transitions électroniques de type $\pi \rightarrow \pi^*$ au sein du système aromatique conjugué des molécules. Les bandes observées entre 360 et 390 nm sont associées aux transitions $n \rightarrow \pi^*$ impliquant les doublets non liants des atomes d'oxygène et d'azote présents dans les molécules.

Les résultats montrent également que BZP2 présente une intensité d'absorption plus élevée dans la région UV par rapport à BZP1, indiquant une meilleure capacité d'absorption des rayonnements UV. De plus, les longueurs d'onde d'absorption des deux composés couvrent une partie importante des domaines UVA et UVB, ce qui est recherché pour les filtres UV utilisés dans les formulations solaires.

La différence des propriétés optiques entre BZP1 et BZP2 peut être expliquée par leurs structures moléculaires. Les deux composés possèdent un système aromatique conjugué favorisant les transitions électroniques $\pi \rightarrow \pi^*$ responsables de l'absorption dans le domaine UV. Cependant, la structure BZP2 contient un groupement oxime ($C=N-OH$) en plus du groupement amine et de l'atome de chlore, contrairement à BZP1 qui possède une fonction carbonyle ($C=O$). La présence du groupement oxime augmente la délocalisation électronique dans la molécule et modifie la distribution de la densité électronique, ce qui influence les transitions électroniques et les longueurs d'onde d'absorption.

Cette différence structurale explique également la meilleure stabilité électronique de BZP2, mise en évidence par son gap énergétique plus élevé et sa plus grande dureté globale. De plus, l'intensité d'absorption plus importante observée pour BZP2 dans le domaine UV indique une meilleure capacité à absorber les rayonnements ultraviolets.

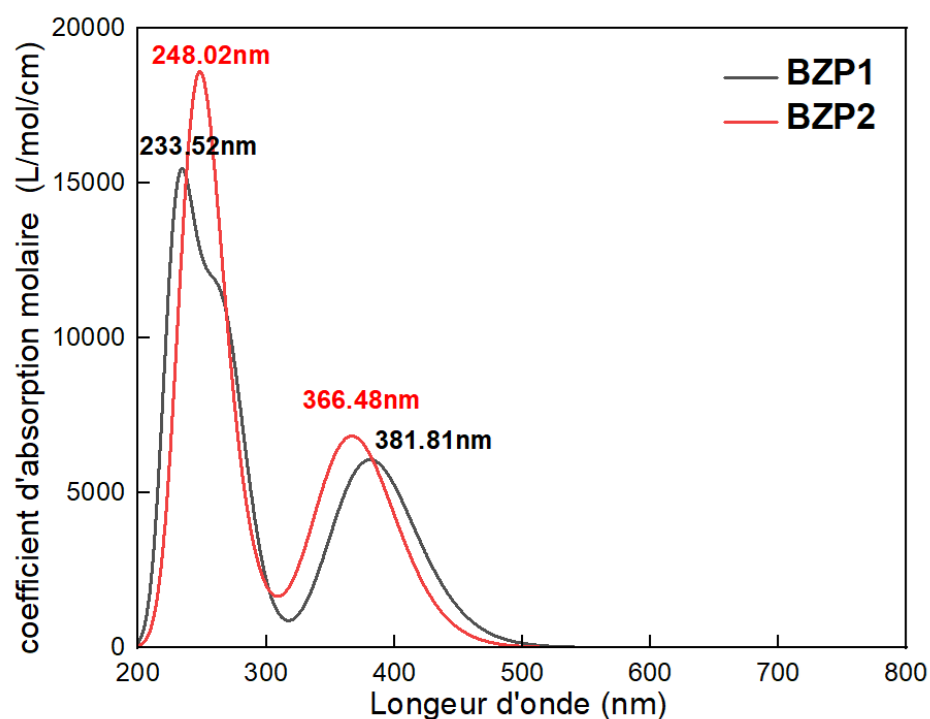


Figure II.4. Spectres UV Visible des structures BZP1 et BZP2
en utilisant l'éthanol comme solvant

II.4.2. Propriétés pharmacocinétiques

L'étude des propriétés pharmacocinétiques constitue une étape importante dans l'évaluation des molécules utilisées comme filtres UV. Ces propriétés permettent de prédire le comportement des composés au niveau biologique, notamment leur solubilité, leur capacité de pénétration cutanée ainsi que leur sécurité d'utilisation dans les formulations cosmétiques [10]. Dans ce travail, les paramètres pharmacocinétiques des composés BZP1 et BZP2 ont été déterminés à l'aide de l'outil pkCSM. Parmi les paramètres étudiés, la solubilité dans l'eau ($\log S$) et la perméabilité cutanée ($\log K_p$) ont été analysées afin d'évaluer le potentiel des deux

molécules comme filtres UV. Les résultats obtenus, représentés dans le tableau II.2, montrent que les composés BZP1 et BZP2 présentent des valeurs de solubilité proches, avec $\log S = -3,731$ pour BZP1 et $\log S = -3,718$ pour BZP2. Ces valeurs indiquent une faible solubilité dans l'eau, caractéristique généralement observée pour les filtres UV organiques utilisés dans les crèmes solaires, en raison de leur caractère hydrophobe. Cette faible solubilité favorise leur stabilité dans les formulations cosmétiques et améliore leur résistance au lavage par l'eau.

Concernant la perméabilité cutanée, les valeurs obtenues sont de $\log K_p = -2,642$ pour BZP1 et $\log K_p = -3,084$ pour BZP2. Une valeur plus négative de $\log K_p$ correspond à une plus faible pénétration à travers la peau. Ainsi, BZP2 présente une perméabilité cutanée plus faible que BZP1, ce qui constitue un avantage important pour un filtre UV destiné à une application topique. En effet, une faible pénétration cutanée réduit le risque d'absorption systémique et améliore la sécurité d'utilisation du composé dans les produits solaires.

La comparaison avec certains filtres UV commerciaux de la famille des benzophénones, tels que l'oxybenzone (benzophénone-3), montre que ces composés présentent également une faible solubilité aqueuse et une capacité de pénétration cutanée non négligeable. Plusieurs études rapportent que l'oxybenzone peut traverser la peau et être détecté dans le plasma sanguin après application répétée de crème solaire. Ainsi, la plus faible perméabilité cutanée observée pour BZP2 suggère un profil pharmacocinétique plus favorable et une meilleure sécurité potentielle comme filtre UV [11].

Ces résultats sont en accord avec les propriétés physicochimiques obtenues précédemment, où BZP2 présentait une plus grande stabilité électronique et une réactivité chimique plus faible. L'ensemble de ces caractéristiques indique que BZP2 pourrait représenter comme un candidat plus prometteur pour des applications comme filtre UV dans les formulations cosmétiques.

Tableau II.2. Paramètres pharmacocinétiques prédits de BZP1 et BZP2 par l'outil pkCSM

	Solubilité dans l'eau	Perméabilité cutanée
	Log S	Log K _p
BZP1	-3,731	-2,642
BZP2	-3,718	-3,084

II.4.3. Propriétés toxicologiques

L'évaluation des propriétés toxicologiques constitue une étape essentielle dans le développement de nouveaux filtres UV destinés aux applications cosmétiques et dermatologiques. Parmi les paramètres les plus importants, la sensibilisation cutanée permet d'estimer la capacité d'un composé à provoquer des réactions allergiques ou des irritations après une exposition répétée sur la peau. Dans ce travail, la prédiction de la sensibilisation cutanée des composés BZP1 et BZP2 a été réalisée à l'aide de l'outil pkCSM.

Les résultats obtenus montrent que le composé BZP1 présente un risque de sensibilisation cutanée, contrairement au composé BZP2, qui ne présente aucun potentiel de sensibilisation. Cette différence met en évidence un meilleur profil toxicologique pour BZP2, ce qui représente un avantage important pour une utilisation dans les formulations de protection solaire. En effet, un filtre UV destiné à une application topique doit posséder une bonne stabilité chimique tout en minimisant les risques d'irritation ou de réactions allergiques après contact avec la peau.

La présence d'une sensibilisation cutanée potentielle pour BZP1 peut être liée à sa réactivité chimique plus élevée, déjà mise en évidence par les résultats des propriétés physicochimiques, notamment sa plus faible dureté globale et son indice d'électrophilicité plus important. Une molécule plus réactive peut interagir plus facilement avec certaines protéines cutanées, favorisant ainsi l'apparition de réactions allergiques. À l'inverse, la plus grande stabilité électronique de BZP2 ainsi que sa faible perméabilité cutanée contribuent probablement à réduire les interactions avec les tissus biologiques, expliquant ainsi l'absence de sensibilisation prédite pour cette molécule.

Ces résultats suggèrent donc que BZP2 possède un profil toxicologique plus favorable que BZP1 et pourrait constituer un meilleur candidat pour des applications comme filtre UV dans les produits cosmétiques et dermatologiques.

Références bibliographiques

- [1] Diffey, B. L. (2001). Sunscreens and UVA protection: a major issue of minor importance. *Photochemical & Photobiological Sciences*, 1(1), 9–14.
- [2] Shaath, N. A. (2010). Ultraviolet filters. *Photochemical & Photobiological Sciences*, 9(4), 464–469.
- [3] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Verden, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, D. J. Fox, Gaussian 09, Revision D.01 (Computer Software), Gaussian, Inc., Wallingford, CT, United States. 2013.
- [4] R. Dennington, T. Keith et J. Millam, GaussView, Version 6.1.1. Shawnee Mission, KS: Semichem Inc, 2016.
- [5] Ajmala Shireen, P. et al. (2017). Theoretical insights on flavanones as antioxidants and UV filters: A TDDFT and NLMO study.
- [6] N. Belkafouf, Analyse structurale et spectroscopique de nouveaux matériaux fonctionnels, Thèse de doctorat, Université de Mostaganem, 2019.
- [7] Pires, D. E. V., Blundell, T. L., & Ascher, D. B. (2015). pkCSM: Predicting small-molecule pharmacokinetic and toxicity properties using graph-based signatures. *Journal of Medicinal Chemistry*, 58(9), 4066–4072.
- [8] Javed, S., et al. (2016). 2-Amino-5-chlorobenzophenone.
- [9] Geetha, D., et al. (2021). Crystal structure and Hirshfeld-surface analysis of a monoclinic polymorph of 2-amino-5-chlorobenzophenone oxime at 90 K.

[10] Lipinski, C. A et al. (2001). Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 46(1–3), 3–25.

[11] Manuela Gertrudis García-Márquez et al. (2024). Effects of the sunscreen ultraviolet filter oxybenzone (benzophenone-3) on the seagrass *Posidonia oceanica* (L.) Delile and its associated N₂ fixers.

Conclusion générale et perspectives

Dans ce travail, une étude théorique de deux composés dérivés de la benzophénone, notés BZP1 et BZP2, a été réalisée à l'aide des méthodes de modélisation moléculaire basées sur la DFT et la TD-DFT. L'objectif principal de ce travail était d'évaluer leurs propriétés géométriques, physicochimiques, optiques, pharmacocinétiques et toxicologiques afin d'analyser leur potentiel comme filtres UV pour des applications cosmétiques et dermatologiques.

Les résultats des optimisations géométriques ont montré un bon accord entre les paramètres calculés et les données expérimentales obtenues par diffraction des rayons X, confirmant la fiabilité de la méthode théorique utilisée. L'étude des propriétés physicochimiques a permis de mettre en évidence des différences de réactivité entre les deux molécules. Le composé BZP2 présente un gap énergétique plus élevé ainsi qu'une plus grande dureté globale, indiquant une meilleure stabilité électronique et une réactivité chimique plus faible que BZP1.

L'étude des propriétés optiques a montré que les deux composés absorbent efficacement les rayonnements UV grâce à leurs transitions électroniques de type $\pi \rightarrow \pi^*$ et $n \rightarrow \pi^*$. Les spectres UV-Visible simulés révèlent que BZP2 possède une intensité d'absorption plus importante dans le domaine UV, ce qui suggère une meilleure capacité de protection contre les rayonnements ultraviolets. Cette amélioration est liée à la présence du groupement oxime dans sa structure moléculaire, favorisant une meilleure délocalisation électronique.

Les propriétés pharmacocinétiques et toxicologiques prédites par l'outil pkCSM ont également montré des résultats favorables pour BZP2. Ce composé présente une plus faible perméabilité cutanée ainsi qu'une absence de sensibilisation cutanée, contrairement à BZP1. Ces caractéristiques indiquent un profil de sécurité plus intéressant pour une utilisation potentielle dans les formulations solaires.

Conclusion Générale et perspectives

L'ensemble des résultats obtenus montre que le composé BZP2 possède des propriétés plus favorables que BZP1 en termes de stabilité, d'absorption UV et de sécurité toxicologique. Ainsi, BZP2 apparaît comme un candidat prometteur pour le développement de nouveaux filtres UV organiques destinés aux applications cosmétiques et dermatologiques.

Les résultats obtenus dans ce travail permettent d'envisager des études expérimentales complémentaires, notamment l'évaluation réelle de l'efficacité photoprotectrice et de la stabilité des composés dans les formulations cosmétiques, à travers des investigations in vitro et in vivo, afin de contribuer au développement de nouveaux filtres UV organiques plus performants et plus sûrs pour la santé humaine et l'environnement.

Annexe

Paramètres géométriques de la structure BZP1 :

Tableau 1. Comparaison entre les distances interatomiques de la molécule BZP1 obtenues par la DRX et celles calculées par la DFT/B3LYP/6-311G (d, p) :

Distances Interatomiques (Å)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
Cl1-C18	1,732	1,764
O1-C52	1,230	1,230
N4-C22	1,358	1,362
C10-C19	1,397	1,401
C10-C44	1,389	1,401
C10-C52	1,491	1,503
C12-C18	1,368	1,379
C12-C17	1,403	1,408
C17-C22	1,408	1,429
C17-C52	1,471	1,482
C37-C38	1,359	1,380
C44-C51	1,358	1,389
C48-C51	1,363	1,395

Tableau 2. Comparaison entre les angles de valence de la molécule BZP1 obtenus par la DRX et ceux calculés par la DFT/B3LYP/6-311G (d, p)

Angles de valence (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C38-C37-C18	120,2	119,67
C12-C17-C22	118,9	118,84
C12-C17-C52	119,6	120,64
C22-C17-C52	121,3	120,45
C12-C18-C37	119,8	120,29
C12-C18-Cl1	120,1	120,10
C37-C18-Cl1	120,0	119,61
N4-C22-C38	119,1	119,80
N4-C22-C17	122,8	122,03
C38-C22-C17	118,0	118,14
O1-C52-C17	121,2	121,48
O1-C52-C10	117,4	117,87
C17-C52-C10	121,4	120,65
C51-C44-C10	120,5	32,30
C44-C51-C48	120,8	120,05

Tableau 3. Comparaison entre les angles dièdres de la molécule BZP1 obtenus par la DRX et ceux calculés par la DFT/B3LYP/6-311G (d, p)

Angle dièdres (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C44-C10-C52-O1	-47,5	35,74
C19-C10-C52-O1	128,3	-138,73
C44-C10-C52-C17	132,0	-144,34
C19-C10-C52-C17	-52,2	41,20
C18-C12-C17-C22	-1,5	1,97
C18-C12-C17-C52	-176,4	178,92
C17-C12-C18-C37	-0,1	0,35
C17-C12-C18-CL1	178,0	-179,40
C12-C17-C22-N4	-179,7	178,78
C52-C17-C22-N4	-4,5	1,82
C12-C17-C22-C38	2,7	-3,27
C52-C17-C22-C38	177,5	179,76
C12-C17-C52-O1	165,7	-159,56
C22-C17-C52-O1	-9,1	17,35
C12-C17-C52-C10	-13,9	20,52
C22-C17-C52-C10	17,13	-162,57
C12-C18-C37-C38	0,3	-1,30

Angle dièdres (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
Cl1-C18-C37-C38	-177,8	178,45
C18-C37-C38-C22	1,1	-0,12
N4-C22-C38-C37	179,4	-179,60
C17-C22-C38-C37	-2,6	2,41
C19-C10-C44-C51	0,1	-1,94
C52-C10-C44-C51	176,1	-176,62

Paramètres géométriques de la structure BZP2 :

Tableau 4. Comparaison entre les distances interatomiques de la molécule BZP2 obtenues par la DRX et celles calculées par la DFT/B3LYP/6-311G (d, p) :

Distances Interatomiques (Å)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
Cl1—C4	1,741	1,764
O1—N2	1,414	1,399
N1—C1	1,389	1,367
N2—C7	1,281	1,291
C1—C2	1,402	1,409
C1—C6	1,406	1,429
C2—C3	1,377	1,382

Distances Interatomiques (Å)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C3—C4	1,383	1,393
C4—C5	1,383	1,381
C5—C6	1,392	1,408
C6—C7	1,490	1,477
C7—C8	1,487	1,500
C8—C13	1,393	1,397
C8—C9	1,394	1,397
C9—C10	1,387	1,393
C10—C11	1,386	1,393
C11—C12	1,385	1,393
C12—C13	1,391	1,393

Tableau 5. Comparaison entre les angles de valence de la molécule BZP2 obtenus par la DRX et ceux calculés par la DFT/B3LYP/6-311G (d, p)

Angles de valence (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C7—N2—O1	112,76	112,873
N1—C1—C2	120,65	119,171
N1—C1—C6	121,17	122,427
C2—C1—C6	118,03	118,380
C3—C2—C1	121,59	122,144
C1—C6—C7	123,03	123,616
N2—C7—C8	116,31	120,950
N2—C7—C6	125,78	119,463
C8—C7—C6	117,90	119,587
C13—C8—C9	119,48	119,424
C13—C8—C7	121,94	120,373
C9—C8—C7	118,58	120,196
C10—C9—C8	120,30	120,248
C2—C3—C4	119,53	119,103
C3—C4—C5	120,47	120,498

Angles de valence (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C3—C4—Cl1	119,77	119,692
C5—C4—Cl1	119,76	119,811
C4—C5—C6	120,23	121,611
C5—C6—C1	120,10	118,262
C5—C6—C7	116,75	118,120
C11—C10—C9	119,97	120,140
C12—C11—C10	120,11	119,795
C11—C12—C13	120,14	120,151
C12—C13—C8	119,98	120,240

Tableau 6. Comparaison entre les angles dièdres de la molécule BZP2 obtenus par la DRXP et ceux calculés par la DFT/B3LYP/6-311G (d, p)

Angle dièdres (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
N1—C1—C2—C3	176,07	178,03
C6—C1—C2—C3	0,50	0,34
C1—C2—C3—C4	1,50	0,03
C2—C3—C4—C5	−2,50	0,22
C2—C3—C4—Cl1	178,60	179,92

Angle dièdres (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C3—C4—C5—C6	1,4	0,027
Cl1—C4—C5—C6	−179,73	179,89
C4—C5—C6—C1	0,7	0,34
C4—C5—C6—C7	−175,41	179,14
N1—C1—C6—C5	−177,17	2,76
C2—C1—C6—C5	−1,63	0,52
N1—C1—C6—C7	−1,3	2,76
C2—C1—C6—C7	174,25	178,94
O1—N2—C7—C8	−178,54	0,171
O1—N2—C7—C6	0,5	17,68
C5—C6—C7—N2	−123,16	177,210
C1—C6—C7—N2	60,8	−2,238
C5—C6—C7—C8	55,87	−2,641
C1—C6—C7—C8	−120,15	177,91
N2—C7—C8—C13	39,36	−86,39
C6—C7—C8—C13	−139,76	93,46
N2—C7—C8—C9	−139,76	92,64
C6—C7—C8—C9	41,12	−87,51

Angle dièdres (°)	DRX	DFT 6-311G (d, p)
C13—C8—C9—C10	−1,7	-0,39
C7—C8—C9—C10	177,41	-179.43
C8—C9—C10—C11	1.0	0,073
C9—C10—C11—C12	0,4	0,143
C10—C11—C12—C13	−1,1	0,035
C11—C12—C13—C8	0,3	0,290
C9—C8—C13—C12	1,05	0,502
C7—C8—C13—C12	−178,07	179,54