



## 16º Congresso Nacional de Iniciação Científica

**TÍTULO:** DESENVOLVIMENTO E CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DE CHALCONAS BIOATIVAS

**CATEGORIA:** EM ANDAMENTO

**ÁREA:** CIÊNCIAS BIOLÓGICAS E SAÚDE

**SUBÁREA:** MEDICINA

**INSTITUIÇÃO:** FACULDADE MINEIRENSE

**AUTOR(ES):** JOACI CORREA MOTA JÚNIOR, ÉRICA MOLESSANI APELDORN, JÉSSICA GOMES ALVES DA COSTA, MIRELLA COSTA ATAÍDES, NATHÁLIA CARDOSO VIEIRA, RAFAELA APARECIDA RODRIGUES, RAÍSSA GOMES ALVES DA COSTA

**ORIENTADOR(ES):** DANIEL DIAS SANTOS FERES, PAULO CELSO PARDI, REGINALDO PEREIRA SANTOS

**COLABORADOR(ES):** DAIANA SGANZELLA FERNANDES, HELENA CÂNDIDA SILVA, MORGANA POTRICH

Realização:



Apoio:



## 1. RESUMO

Este trabalho descreve a síntese de duas chalconas por condensação alcoólica e por reação ácido base de Lewis respectivamente. O composto II é inédito na literatura mundial, e o fato de ser um fenolato, o torna solúvel em água, facilitando sua administração. A caracterização estrutural foi possível mediante a técnica de espectrometria de Massa. Testes complementares serão realizados para finalizar a caracterização estrutural do composto.

## 2. INTRODUÇÃO

As chalconas são conhecidas como materiais de partida ou intermediários valiosos para a síntese de uma série de compostos heterocíclicos<sup>1</sup>. Quimicamente, as chalconas são cetonas  $\alpha,\beta$ -insaturadas que apresentam o núcleo 1,3-diarilprop-2-en-1-ona<sup>2</sup>. São de grande interesse químico e farmacológico, uma vez que inúmeros trabalhos relatam suas atividades biológicas, entre elas antibacterianas, anti-protozoários, antitumorais e anti-inflamatórias. Chalconas trimetoxiladas são relatadas como agentes com potencial citotoxicidade para células cancerígenas<sup>3</sup>.

## 3. OBJETIVOS

Síntese da 1-(4-Bromo-fenil)-3-(4-hidroxi-3-metoxi-fenil)-propenona **(composto I)**.

Síntese do 4-[3-(4-bromo-fenil)-3-oxo-propenil]-2-metoxi-fenolato de sódio **(composto II)**.

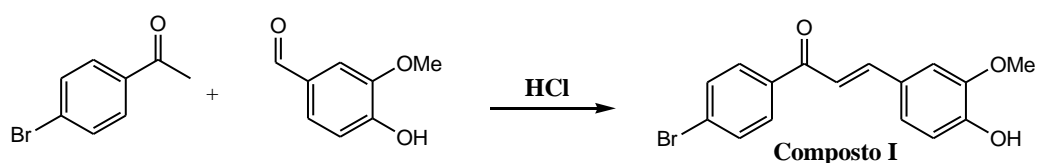
Determinação da conformação estrutural mediante técnicas espectroscópicas e físico-químicas dos compostos obtidos.

## 4. METODOLOGIA

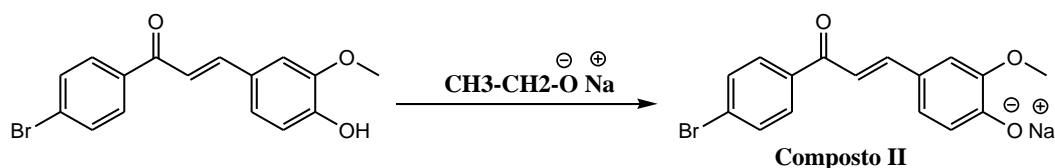
**Síntese da 1-(4-Bromo-fenil)-3-(4-hidroxi-3-metoxi-fenil)-propenona (composto I)**. Em um balão de uma boca de 100 ml, mistura-se (0,30g; 0,0018 mol) de p-nitroacetofenona com (0,2736g; 0,0018 mol) de vanilina e 3mL de HCl, deixa-se a reação sob agitação constante à temperatura ambiente por 3 (três) horas. Extração verte-se o produto em uma mistura de H<sub>2</sub>O / gelo, forma-se um precipitado amarelo filtra-se e lava-se com H<sub>2</sub>O. Purificação com o auxílio de uma coluna cromatográfica com a seguinte fase móvel: Touleno: Clorofórmio: Etanol na proporção 20: 1: 1.

**Síntese 2-metoxi-4-[3-(4-nitro-fenil)-3-oxo-propenil]-fenolato de sódio (composto II).** Em um erlenmeyer de 200mL, prepara-se uma solução do composto I ( 0,001 mol em 10mL de etanol anidro), paralelamente, prepara-se uma solução de etóxido de sódio (23mg; 0,001 mol em 10 mililitros de etanol anidro). Verte-se lentamente a solução de etóxido de sódio na solução do composto I, deixa-se agitar a reação por 30 minutos. Após este período, rotoevapora-se o etanol.

## 5. DESENVOLVIMENTO



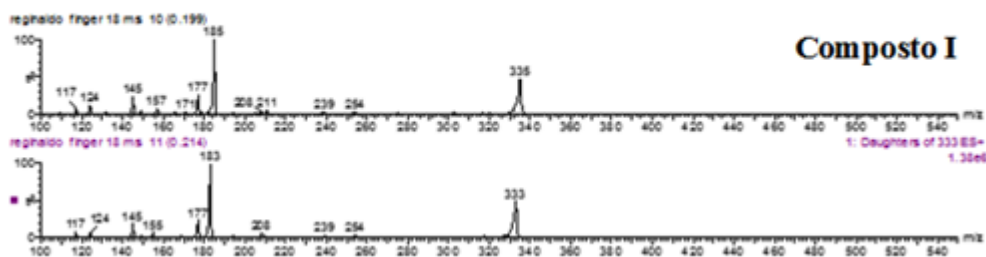
**Figura 1.** Esquema sintético da 1-(4-Bromo-fenil)-3-(4-hidroxi-3-metoxi-fenil)-propenona (**composto I**).



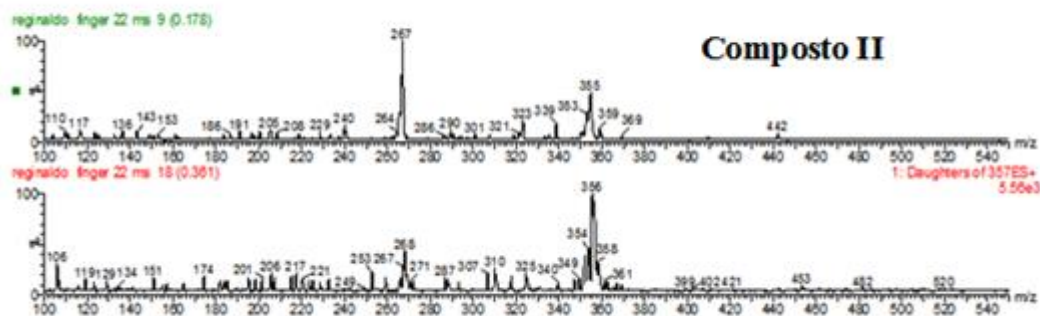
**Figura 2.** Esquema sintético do 4-[3-(4-bromo-fenil)-3-oxo-propenil]-2-metoxi-fenolato de sódio (**composto II**).

**6. RESULTADOS PRELIMINARES** Obteve-se um rendimento de 62,50% do **composto I**, cor amarelo claro, Confirmou-se o peso molecular do composto I por espectrometria de massas, tanto no modo positivo, quanto no modo negativo; assim como do composto II no modo positivo

### POSITIVO $m/z$ 333, 335



positivo  $m/z$  355, 357



Neste trabalho, desenvolveram-se duas chalconas, sendo que o composto II é inédito na literatura mundial, e que devido a formação do fenolato de sódio, este composto é muito mais solúvel em água, o que facilita sua administração. O espectro de Massas nos dá a caracterização parcial dos compostos, restando ainda a determinação por RMN protônico.

## 7. FONTES CONSULTADAS

1. LIU, F. et. al. **Facile Microwave-assisted Synthesis of 1,3,5-Trisubstituted Pyrazoline Derivatives Incorporating Sulfonyl Moiety**. Journal of the Chinese Chemical Society. Volume 63, pages 254–260. Disponível em:<<http://onlinelibrary.wiley.com/wo1/doi/10.1002/jccs.201500385/full>>. Acesso em: 27 de ago. 2016.
2. ROMAGNOLI, R. et al. **Hybrida-bromoacryloylamido chalcones. Design, synthesis and biological evaluation**. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. Volume 19, 1 April 2009, Pages 2022–2028. Disponível em:<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960894X09001929>>. Acesso em: 27 de ago. 2016.
3. GOLDSTEIN, B.J. **Protein-tyrosine phosphatase 1B (PTP1B): a novel therapeutic target for type 2 diabetes mellitus, obesity and related states of insulin resistance**. Volume 1, Number 3, 1 November 2001, pp. 265-275(11). Disponível em:<<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/12477292>>. Acesso em 27 de ago. 2016.