XXXII Encontro Anual de Iniciação Científica
IX Encontro Anual de Iniciação Científica Jr.
EAIC 2023

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DA 5-HIDROXIMETILFURFURAL PARA PRODUÇÃO DE FURANOCHALCONAS

Flavia Luciana dos Anjos (PIBIC/CNPq), Eduardo Protachevicz (PG), Barbara Celânia Fiorin (Orientadora)

e-mail: 22014141@uepg.br, bcfiorin@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/ Departamento de Ciências Farmacêuticas.

Química, Química orgânica

Palavras-Chave*: Tiofenochalcona, RMN, antioxidante.*

Resumo

Compostos com atividade antioxidante são de extrema importância, pois podem inibir ou prevenir doenças causadas pelos radicais livres. Visando a busca por novos agentes antioxidantes, optou-se por investigar uma tiofenochalcona, composto de estrutura semelhante ao da chalcona, mas com a presença do heterociclo tiofeno em sua molécula. Por conta disso, foi realizada a síntese, purificação, caracterização por RMN e ensaio de atividade antioxidante de tiofenochalconas, com a presença do grupo hidroxila em sua estrutura.

Introdução

Levando em consideração os relatos existentes na literatura acerca de ensaios biológicos tanto sobre chalconas como derivados com o grupo tiofeno, a simplicidade estrutural de ambos compostos, facilidade de obtenção das chalconas e o fato de ser uma síntese economicamente viável, optou-se por trabalhar com compostos análogos as chalconas, mas com o heterociclo tiofeno no lugar de um dos anéis aromáticos, comumente conhecida como tiofenochalconas.

Desta forma, o objetivo deste projeto foi sintetizar e caracterizar por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) a tiofenochalcona (Figura 1a) e a 2-hidroxitiofenochalcona (Figura 1b). Bem como, avaliar e comparar a atividade antioxidante destes compostos.

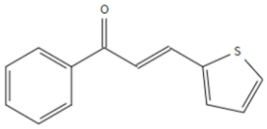


Figura 1a

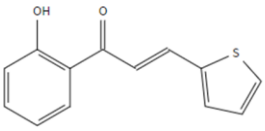


Figura 1b

Materiais e Métodos

A tiofenochalcona foi obtida por uma reação adólica cruzada, utilizando acetofenona e tiofeno-2-carboxialdéido. Para a realização da síntese utilizou-se 0,005 mol de ambos os reagentes, 20 mL de etanol e 10 mL de solução aquosa de NaOH 20%. Esse processo foi conduzido em uma sonda de ultrassom por 35 minutos. Após isso, utilizou-se HCl para neutralizar o meio e diclorometano para extração do produto. O mesmo processo foi realizado para a 2-hidroxitiofenochalcona, mas com a utilização da acetofenona e da 2-hidroxi-2-tiofenocarboxialdeído.

O poder antioxidante das tiofenochalconas foi avaliado através da atividade inibitória de radicais livres, usando o radical DPPH. Foram utilizadas amostras de diferentes concentrações das tiofenochalconas e a quercetina como controle positivo, a leitura foi realizada em uma microplaca em leitor de Elisa de 96 poços.

Resultados e Discussão

Foi realizada a caracterização por espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) de ambos os produtos. Analisando o espectro de RMN de ^{1}H da tiofenochalcona, após análise das integrais de área de cada sinal, observou-se a presença de dez hidrogênios pertencentes a molécula. Notou-se também, através do cálculo de constante de acoplamento que houve a formação da dupla ligação vinílica apresentando configuração *trans,* sendo essa a principal característica que houve a formação da tiofenochalcona.

Na análise da 2-hidroxitiofenochalcona notou-se as mesmas características, alterando apenas o valor das integrais onde aparecem onze hidrogênios, sendo o último pertencente a hidroxila da molécula, sendo representada no espectro como um sinal isolado das demais no deslocamento químico de 12,84 ppm.

Os dados da atividade antioxidante foram avaliados e os compostos apresentaram potenciais diferentes.

Conclusão ou Conclusões

Com a análise dos espectros de RMN ^{1}H de ambos os produtos, foi identificada a formação da tiofenochalcona e da 2-hidroxitiofenochalcona. Sendo que esta última apresentou uma atividade antioxidante mais elevada que a tiofenochalconas.

Agradecimentos

Agradeço a minha orientadora Barbara Celânia Fiorin e ao meu coorientador Eduardo Protachevicz por toda ajuda e apoio durante o desenvolvimento e execução desse projeto. Ao CNPq pelo apoio financeiro.

As AL-MAMARY, M.; AL-MIKHLAFI, S. A.; JAADAN, B. Synthesis and biological activities of some chalcone derivatives. **International Journal of Chemical and Pharmaceutical Sciences**, v.5, n.2, p. 61-68, 2014.

MISHRA, R.; JHA. KK.; KUMAR, S.; TOMER, I. Synthesis, properties and biological activity of thiophene: A review. **Der Pharma Chemica**, v.3, n.4, p. 38-54, 2011.