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

2'-AZACHALCONA: SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA E ATIVIDADE ANTIOXIDANTE

Gabrielle Schamne Fonseca (PROVIC), André Luis Kerek, Barbara Celânia Fiorin (Orientadora), e-mail: bcfiorin@uepg.br
Universidade Estadual de Ponta Grossa / Departamento de Química

Química, Síntese orgânica, Atividade antioxidante

Palavras-Chave: *chalcona, síntese, espectroscopia, atividade antioxidante.*

Resumo

A 2'-azachalcona é uma substância derivada da chalcona que apresenta variados efeitos bioativos. A caracterização espectroscópica permite a confirmar a formação da estrutura molecular, enquanto a avaliação da atividade antioxidante revela o seu potencial na redução de radicais livres. Este estudo contribui para a compreensão das propriedades e do potencial de aplicação da 2'-azachalcona nas áreas de farmacologia e de química medicinal.

Introdução

Possuindo o núcleo 1,3-difinenilprop-2-en-1-ona em sua estrutura, as chalconas estão presentes em diversas plantas, que derivam da família dos flavonoides (POLINSKY, 2008). Como relatado na literatura, estas substâncias são conhecidas por apresentarem atividades biológicas diversas, as quais são ativas pelo seu sistema α, β-carbonílico (GAONKAR, 2017). A 2'-azachalcona apresenta potencial para aplicações em áreas farmacológicas devido às suas propriedades bioativas promissoras. Tendo ciência disso, este trabalho de pesquisa teve como propósito realizar a síntese da 2'-azachalcona, um derivado não encontrado nas plantas.

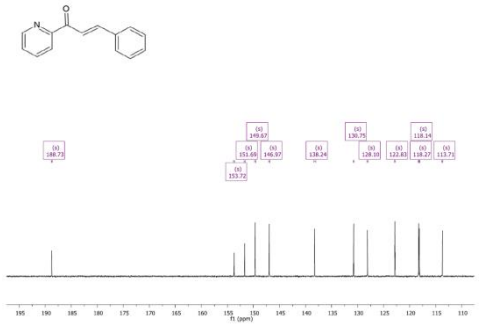
Materiais e Métodos

Para a síntese, adicionou-se à um balão reacional concentrações equimolares dos reagentes, os quais foram solubilizados em 100 mL de água destilada gelada. Foi utilizado KOH 10% como catalizador da reação. Para as análises espectroscópicas de Infravermelho com Transformada de Fourier (FT-IR) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN) utilizaram-se os aparelhos presentes nas dependências do C-LABMU, na UEPG. Para avaliar a atividade antioxidante foi adicionado 160 mL de solução DPPH 1,5 mM em uma microplaca, junto com 40 mL de soluções amostrais em concentrações variadas, seguido da medição da absorbância no comprimento de onda de 517 nm.

Resultados e Discussão

A síntese da 2'-azachalcona foi realizada pelo método de condensação aldólica de Claisen-Schmidt e como produto obteve-se um sólido branco-amarelado. A caracterização espectroscópica de FT-IR mostrou uma banda afastada na região de 3080 cm^{-1}, a qual se correlaciona com a presença do nitrogênio no anel aromático A, confirmando assim a formação do anel piridínico. Através do espectro obtido pela análise de RMN de ^{13}C (Figura 1) pôde-se confirmar a formação da 2'-azachalcona, onde todos os carbonos da estrutura conseguiram ser distribuídos nos sinais mostrados pelo espectro.

Figura 1: Espectro de RMN de ^{13}C da síntese da 2'-azachalcona (100 MHz; $CDCl_3$).



A atividade antioxidante foi avaliada observando a diminuição dos radicais DPPH pela diminuição da absorbância medida em 517 nm, permitindo estimar uma porcentagem de inibição. Esta chalcona não apresentou valores de IC50 para inibição do radical DPPH nas concentrações testadas, porém os resultados são promissores sendo necessário a avaliação de outras atividades antioxidantes.

Conclusão ou Conclusões

O método de condensação aldólica de Claisen-Schmidt e as espectroscopias por FT-IR e RMN são eficazes para a síntese e caracterização de chalconas e derivados. A 2'-azachalcona apresenta bons resultados quanto à atividade antioxidante, o que a torna um composto com potencial para futuros estudos farmacológicos.

Agradecimentos

À UEPG, ao Laboratório de Espectroscopia, Caracterização e Modelagem pelo suporte e ao C-LABMU pelas análises realizadas.

POLINSKY, A. Lead-likeness and drug-likeness. In: WERMUTH, C. G. (org.). **The Practice of Medicinal Chemistry**. cap. 12, p. 244-254, 2008.

GAONKAR, S. L.; VIGNESH, U. N. Synthesis and pharmacological properties of chalcones: a review. **Research on Chemical Intermediates**, v. 43, n. 11, p. 6043-6045, 2017.