SÍNTESE DE CHALCONAS COM SUBSTITUINTES METOXI E HIDROXILA PARA AVALIAÇÃO DO POTENCIAL ANTIOXIDANTE

Layse Kobilarz Netto (PIBIC/FA), Raphaela Guaringue, Barbara Celânia Fiorin (Orientador), e-mail: bcfiorin@uepg.br
Departamento de Química, Universidade Estadual de Ponta Grossa

1.06.00.00-0 Química, 1.06.01.00-7 Química Orgânica, 1.06.01.02-3 Síntese Orgânica.
Palavras-Chave: *Chalcona, Acetovanilona, Claisen-Schmidt, RMN, Atividade antioxidante.*

Resumo

O objetivo deste trabalho foi sintetizar e caracterizar chalconas contendo grupos metoxila e hidroxila, avaliando sua influência no potencial antioxidante. Duas chalconas foram obtidas por condensação de Claisen–Schmidt. A (2E)-1-(4-hidroxi-3-metoxifenil)-3-(4-metoxifenil)prop-2-en-1-ona (Chal 1), com rendimento de 39,8%, apresentou maior estabilidade cristalina (PF 132,3 °C) e melhor desempenho nos ensaios antioxidantes (DPPH, FRAP e TBARS), atribuído à presença de grupos metoxila que favorecem a estabilização de radicais. Já a (2E)-1-(4-hidroxi-3-metoxifenil)-3-fenilprop-2-en-1-ona (Chal 2), com rendimento de 35,7%, mostrou menor estabilidade (PF 31,2 °C) e atividade antioxidante reduzida. Os resultados indicam que pequenas variações estruturais impactam significativamente a bioatividade, destacando a Chal 1 como composto promissor na prevenção de danos oxidativos.

Introdução

Chalconas são flavonoides com estrutura básica da 1,3-difenil-2-propen-1-ona, conhecidas por suas atividades antioxidante, anti-inflamatória e anticancerígena. Geralmente sintetizadas pela condensação de Claisen–Schmidt e caracterizadas por técnicas espectroscópicas, despertam interesse devido ao seu potencial contra o estresse oxidativo. [1]

Esse potencial é avaliado por ensaios como DPPH, FRAP e TBARS, que medem a capacidade de neutralizar radicais livres e inibir a peroxidação lipídica. Grupos funcionais como metoxila e hidroxila influenciam diretamente essa atividade, tornando pequenas alterações estruturais decisivas para a bioatividade das chalconas e suas possíveis aplicações farmacológicas e cosméticas como o retardamento do envelhecimento precoce. [2]

Materiais e Métodos

As chalconas foram sintetizadas pelo método de condensação aldólica de Claisen–Schmidt, utilizando em ambas, aldeído e cetona em meio básico, seguidos de precipitação, filtração e recristalização em etanol para obtenção de material puro. A caracterização foi realizada por ponto de fusão, RMN (^{1}H, ^{13}C e bidimensional), UV-Vis e FT-IR. O potencial antioxidante das chalconas foi avaliado pelos ensaios DPPH, FRAP e TBARS, que mensuram a capacidade de sequestrar radicais livres, reduzir íons metálicos e inibir a peroxidação lipídica. As leituras espectrofotométricas foram feitas a 517, 593 e 532 nm, respectivamente, permitindo comparar a eficiência antioxidante das diferentes moléculas frente a controles padrão. [3]

Resultados e Discussão

Após a síntese, os produtos foram caracterizados por Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Os sinais observados foram: Chal 1: α = 7,44 (d, J_{HH}= 15,5 Hz, 1H) e β = 7,78 (d, J_{HH}= 15,6 Hz, 1H); Chal 2: α= 7,55 (d, J_{HH} = 15,5 Hz, 1H) e β = 7,81 (d, J_{HH}= 15,6 Hz, 1H). Esses resultados confirmam a formação das chalconas desejadas, com acoplamento trans característico do sistema alqueno conjugado.

A atividade antioxidante foi avaliada pelo método do DPPH. Os valores obtidos foram: Chal 1: Inibição= 79,30%; IC_{50}= 10,06 mmol/mL; Chal 2: Inibição= 72,29%; IC_{50}= 23,73 mmol/mL; Ácido Ascórbico (controle positivo): Inibição= 100%; IC_{50}= 1,78 mmol/mL. A comparação indica que a Chal 1 apresenta maior eficiência antioxidante do que a Chal 2, embora ambas sejam inferiores ao padrão ácido ascórbico.

No ensaio FRAP, os resultados foram: Chal 1: 33,76 mmol eq Fe^{2+}/mmol; Chal 2: 19,34 mmol eq Fe^{2+}/mmol. Esses valores demonstram que a Chal 1 possui maior capacidade redutora, atribuída à presença de grupos metoxila adicionais, que favorecem a doação de elétrons e a redução de Fe^{3+} para Fe^{2+}.

Na análise da peroxidação lipídica (método TBARS), os valores observados foram: Chal 1: 26% de formação de TBARS; Chal 2: 44% de formação de TBARS; Controle: 100% de peroxidação. Os dados confirmam que a Chal 1 apresenta maior eficácia na prevenção da peroxidação lipídica.

De forma geral, os resultados obtidos mostram que a Chal 1 apresenta desempenho superior em todos os ensaios antioxidantes realizados, o que reforça a influência positiva dos grupos metoxila adicionais na atividade antioxidante das chalconas. Assim, a Chal 1 se destaca como candidata promissora para aplicações em formulações com potencial protetor contra o estresse oxidativo.

Conclusão ou Conclusões

Os espectros de RMN confirmaram a formação e pureza das chalconas obtidas. A análise sugere que os dois grupos metoxila (-OCH_3) aumentam a eficácia antioxidante da Chal 1, destacando seu potencial bioativo em relação a Chal 2.

Agradecimentos

UEPG, LEsCaM, C-LabMu, CNPq e Fundação Araucária.

[1] Ferreira, M. K. A.; et. al. *Revista Virtual de Química*, 2018, 10, 5.
[2] Hijova, E.. Bratislavske lekarske listy, 2006, 107, 3, 80-84.
[3] Sachett, A. *et al*. **Antioxidant activity by DPPH assay: in vitro protocol.** *Protocols.io*, 2020. DOI: dx.doi.org/10.17504/protocols.io.btbpnimn. Disponível em: https://www.protocols.io/view/antioxi dant-activity-by-dpph-assay-in-vitroprotoc-q26g783n9lwz/v1. Acesso em: 12 ago. 2025.