



SÍNTESE E ATIVIDADE BIOLÓGICA IN VITRO E IN SILICO DE CHALCONAS HETEROCICLICAS DERIVADAS DO FURANO

Daniele R. Souza¹ Thales U. da Costa Sobrinho.²; Gerusa G. Rizzi¹; Rogério Corrêa^{1,2}

¹NIQFAR/CCS, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil. *roger@univali.br

²Curso de Engenharia Química/CTTMar, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.

INTRODUÇÃO

Ao observar a estrutura dos fármacos que são hoje empregados na terapêutica, constata-se que cerca de 62% são heterocíclicos (TANTAWY et al., 2017; ZHANG, 2017). Anel furânico é um exemplo de heterociclo oxigenado, que possui comprovadas atividades sendo amplamente investigado por estar envolvido em várias atividades biológicas (ALCOLEA et al., 2016; SHEN, et al., 2017). Chalconas, se tornaram uma importante fonte para a obtenção de novas entidades moleculares com aplicabilidade terapêutica, devido à versatilidade sintética e à gama de atividades biológicas apresentadas (MING et al, 2017)

MATERIAL E MÉTODOS

A síntese e caracterização foram realizadas por FT-IR, RMN¹C, RMN¹³C e análise elementar. Os ensaios *in vitro* para a determinação da atividade inibitória para COX-1 e COX-2 COX (ovine) Inhibitor Screening Assay Kit (nº 560101, Cayman Chemical, Ann Arbor, MI, EUA). Os índices de seletividade foram calculados considerando o quociente: $CI_{50} \text{ COX-1} / CI_{50} \text{ COX-2}$. O *Docking* molecular foi realizado utilizando os softwares ArgusLab 4.0.1. e os softwares da Plataforma MAESTRO® (PPW, LigPrep, Glide).

RESULTADOS

Foram obtidos 19 compostos, pela variação dos aldeídos: furancarboxaldeído e furfuraldeído com rendimento entre 27, 3% à 91,3%. Dentre as chalconas mais seletivas, destaca-se o composto M10, IS=304,6; F10, IS=257,5, M7, com IS= 250,8; com seletividade superior ao fármaco referência no mesmo ensaio (Celecoxibe, IS=249). Foi realizado a avaliação do *docking* molecular com a COX-2, utilizando a ferramenta ARGUS-LAB e Plataforma MAESTRO, onde observou-se a melhor energia de *docking* com os compostos M10, M7, M4, M9; F10, F9, F7 e F3.

CONCLUSÕES

As chalconas furânicas apresentam um grande potencial de aplicabilidade biológica, especialmente, no que se refere à atividade anti-inflamatória, considerando o bom desempenho apresentado pelos compostos na inibição seletiva da COX-2.

AGRADECIMENTOS

Universidade do Vale do Itajaí e Fundo de Apoio à pesquisa; à FAPESC, CNPQ e CAPES; ao NIQFAR e ao Laboratório de Síntese Orgânica.