



## AVALIAÇÃO *IN SÍLICO*, SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE AMINOCHALCONAS HETEROCÍCLICAS PARA REPARO ÓSSEO

Merilyn Adrielly Lopes de Paulo<sup>1\*</sup>, Fátima de Campos Buzzi<sup>1,2</sup>.

<sup>1</sup>Curso de Farmácia, Escola de Ciências da Saúde, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.

<sup>2</sup>Programa de Pós-graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil. \*merilyn.depaulo@hotmail.com.

### **INTRODUÇÃO**

Entre as diversas moléculas estudadas pela química medicinal devido seu potencial biológico, encontram-se as chalconas (1,3-diaril-2-propen-1-onas), também conhecidas como cetonas  $\alpha$ - $\beta$  insaturadas. Ortolan *et al.*, 2014 e 2017 demonstraram o potencial osteogênico de chalconas avaliadas *in vivo* em calotas cranianas de ratos. Considerando os resultados encontrados, buscou-se uma série de chalconas com potencial antiinflamatório para a análise *in sílico*, síntese e posterior avaliação biológica para reparo periodontal e ósseo.

### **MATERIAL E MÉTODOS**

Foram selecionadas 9 aminochalconas com bons resultados preliminares para dor e inflamação *in vivo*, com objetivo de serem avaliadas posteriormente no reparo ósseo. As moléculas foram avaliadas *in sílico* através das ferramentas Swissadme e Osiris, quanto a predição de absorção e permeabilidade, toxicidade, farmacocinética e farmacodinâmica. Foram selecionadas as duas moléculas mais promissoras para a otimização da síntese a partir de uma mistura equimolar da aminoacetofenona com os aldeídos furfural e o tiofeno-carboxialdeído, dissolvidos com etanol na presença de NaOH sob agitação sem aquecimento. As reações foram monitoradas através de cromatografia em camada delgada e os produtos caracterizados por técnicas espectroscópicas.

### **RESULTADOS**

As chalconas apresentaram boa absorção intestinal e na sua maioria não apresentaram risco de tumorigenicidade, de serem irritantes e reprodução efetiva. Entre as moléculas selecionadas a aminochalcona tiofeno se apresentou melhor do que a aminochalcona furano pois não apresentou risco de mutagenicidade. Ademais, a molécula contendo o anel tiofeno, apresentou maior probabilidade de atingir a ciclooxigenase (COX). Os produtos apresentaram bons rendimentos reacionais, destacando a (2E)-1-(4-aminofenil)-3-(2-furano)prop-2-em-1-ona que apresentou maior rendimento em menor tempo reacional. As estruturas dos compostos foram confirmadas através das técnicas espectrométricas.

### **CONCLUSÃO**

Duas aminochalconas foram selecionadas a partir dos resultados *in sílico*, sintetizadas com bons rendimentos e caracterizadas. Estas moléculas foram incorporadas em base semissólida e encaminhadas para avaliação biológica *in vivo*.

### **APOIO**

Universidade do Vale do Itajaí e Artigo 171.

### **REFERÊNCIA**

Ortolan *et al.*, 2014, J Craniomaxillofac Surg.

Ortolan *et al.*, 2017, J. Oral res.

