

## SÍNTSE DE DERIVADOS DE FLAVONOIDES CATALISADA POR $\text{BF}_3\cdot\text{OEt}_2$ E AVALIAÇÃO DO POTENCIAL DE INIBIÇÃO DE ACETILCOLINESTERASE

**Brunielle S. De Jesus<sup>1\*</sup>, Ricardo C. Nascimento<sup>1</sup>, Geovana S. De Melo<sup>1</sup>, Rafael S. Guimarães<sup>1</sup>, Janine F. de Souza<sup>2</sup>, Géssica O. Mendes<sup>2</sup>, Franco Henrique A. Leite<sup>2</sup>, Leonardo O. Aquiari<sup>1\*</sup>**

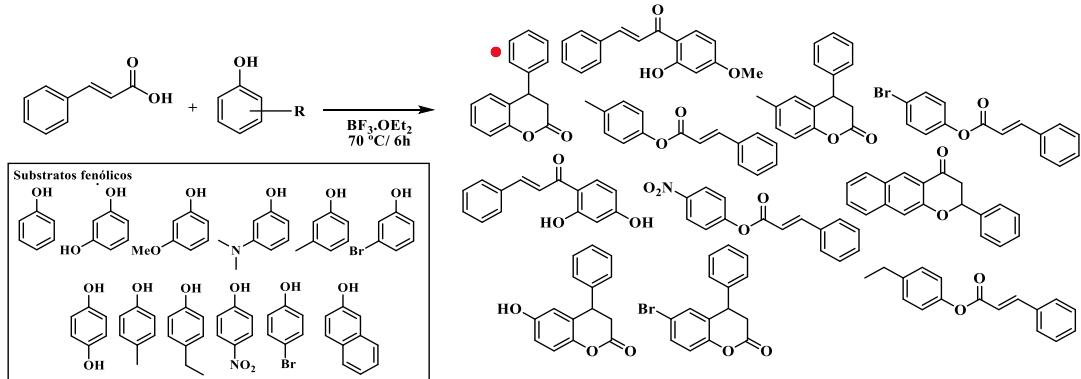
<sup>1</sup> Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, DCT/Departamento de Ciências e Tecnologia, Jequié, Bahia, Brasil, 45205-490.

<sup>2</sup> Universidade Estadual de Feira de Santana, DSAU/Departamento de Saúde, Feira de Santana, Bahia, Brasil, 44.036-900.

\*brunielledejesus5@gmail.com / \*leonardo.aguiar@uesb.edu.br

Flavonoides são metabólitos especializados presentes em diversas famílias vegetais, conhecidos por apresentar grande potencial farmacológico e grande versatilidade química para atuarem como blocos de construção na formação de novos derivados de interesse<sup>1</sup>. Por síntese química, flavonoides são comumente acessadas por condensação de Claisen-Schmidt<sup>2</sup>. Este estudo apresenta uma nova abordagem para a síntese de flavonoides, que mimetiza com mais fidelidade o processo de biossíntese. A síntese foi realizada a partir de ácido cinâmico, catalisada por trifluoreto de boro eterato ( $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ ), e ocorreu sob as condições de 70 °C por 6 horas. Os substratos foram fenóis substituídos com grupos funcionais distintos. Após purificação e caracterização por RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , os produtos foram obtidos com rendimentos que variaram entre 53 e 72%. A diferença no substituinte dos fenóis reagentes levou à obtenção de chalconas, flavanona e neoflavonoides. O acoplamento molecular foi utilizado para estimar a afinidade dos compostos frente a enzima acetilcolinesterase (PDB ID 4M0E), utilizando parâmetros padrões com auxílio do programa AutoDock Vina 1.1.2<sup>5</sup>. Os resultados sugerem que a flavanona (FL01 destacado na figura) foi o composto mais promissor, apresentando afinidade de ligação de -10,1 kcal/mol. Dessa forma, este estudo contribui para o desenvolvimento de métodos sintéticos inspirados em rotas naturais, oferecendo uma alternativa eficiente para a obtenção de flavonoides funcionalizados, com potencial aplicação em estudos farmacológicos.

### Esquema 1: Síntese de derivados de flavonoides



## Agradecimentos:

## Referências:

- [1]ALBOGAMI, A. S. et al. Simple and efficient one step synthesis of functionalized flavanones and chalcones. *Oriental Journal of Chemistry*, v. 28, n. 2, p. 619–626, 2012. [2]ALBUQUERQUE, H. et al. Chalcones as Versatile Synthons for the Synthesis of 5- and 6-membered Nitrogen Heterocycles. *Current Organic Chemistry*, v. 18, n. 21, p. 2750–2775, 2014. [3]FERREIRA, M. K. A.; et al. Potencial Farmacológico de Chalconas: Uma Breve Revisão. Rvq, v. 10, p. 1455, 2018. [4]SILVA, P. T. da.; et al. Cytotoxic and Antifungal Activity of Chalcones Synthesized from Natural Acetophenone Isolated from *Croton anisodontus*. Rvq, v. 12, p. 712, 2020. [5]TROTT, O.; OLSON, A. J. *AutoDock Vina*: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading, version 1.1.2, [S.1]: *Journal of Computational Chemistry*, 2010.