

# Ftalazinas: síntese mediada por irradiação de micro-ondas e caracterização estrutural por difração de raios-X

Cleiton M. da Silva (PQ)<sup>1\*</sup>, Yuri F. Rego (IC)<sup>1</sup>, Jeferson G. da Silva (PQ)<sup>2</sup>, Daniel L. da Silva (PG)<sup>1</sup>, Ângelo de Fátima (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Estudos em Química Orgânica e Biológica (GEQOB), Departamento de Química, ICEx, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil. Email: cleitonms@ufmg.br

<sup>2</sup>Departamento de Farmácia, UFJF, Campus Governador Valadares, MG, Brasil.

Palavras Chave: síntese, ftalazinas, caracterização estrutural.

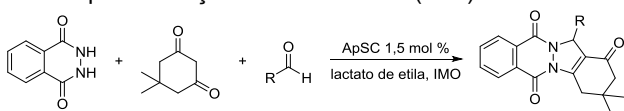
## Introdução

Ftalazinas e seus derivados têm recebido crescente atenção em virtude de suas propriedades farmacológicas e aplicações clínicas. Essas substâncias mostram possuir atividades anticonvulsante, cardiotônica, vasorrelaxante, anti-inflamatória e antimicrobiana<sup>1,2</sup>. Tais propriedades têm motivado a busca por novas metodologias de síntese para a sua obtenção. Nos últimos anos, a irradiação de micro-ondas (IMO) tem se destacado como uma importante ferramenta para a promoção de reações orgânicas, possibilitando a obtenção dos produtos de interesse em elevados rendimentos, seletividade e menores períodos de reação<sup>3</sup>. Nesse contexto, este trabalho apresenta a síntese de onze 1*H*-indazolo[1,2-*b*]ftalazina-trionas mediada por IMO. A estrutura cristalográfica de um dos compostos sintetizados também é elucidada.

## Resultados e Discussão

As ftalazina-trionas **1-11** (Tabela 1) foram obtidas por meio da irradiação por micro-ondas (IMO) de soluções contendo ftalidrazida (1,0 mmol), dimedona (1,2 mmol) e aldeído (1,5 mmol), em 1 mL de lactato de etila. Ácido *p*-sulfônico calix[4]areno (ApSC) (1,5 mol %) foi usado como catalisador. As soluções foram irradiadas em reator Discover CEM<sup>®</sup> por um período de 10 minutos, a 130 °C, e os produtos foram isolados por recristalização.

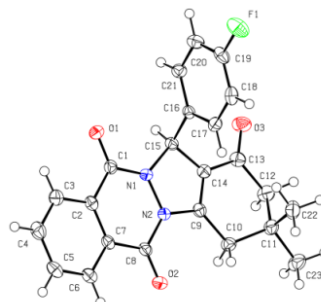
**Tabela 1.** Estruturas e rendimentos das ftalazina-trionas obtidas por irradiação de micro-ondas (IMO)



Composto	R	Rendimento (%)
1	fenil	81
2	3,4-OCH <sub>2</sub> O-fenil	51
3	4-Cl-fenil	85
4	4-F-fenil	83
5	4-NO <sub>2</sub> -fenil	83
6	3-OH-fenil	67
7	4-CN-fenil	87
8	3-OCH <sub>3</sub> -fenil	75
9	3,5-OCH <sub>3</sub> -4-OH-fenil	61
10	4-SCH <sub>3</sub> -fenil	31
11	4-CF <sub>3</sub> -fenil	94

Os compostos **1-11** foram obtidos em rendimentos que variaram de moderados a excelentes (31-94 %) e foram devidamente caracterizados por espectroscopia no IV, RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C e espectrometria de massas de alta resolução.

Cristais do composto **4** foram obtidos a partir da evaporação lenta de uma solução etanólica do mesmo, e analisados por difração de raios-X de monocristal. O referido composto cristalizou-se no sistema monoclinico, com uma molécula independente por unidade assimétrica (Figura 1). O grupo espacial desse cristal é centrossimétrico (P21/n), indicando que a ftalazina-triona **4** encontra-se na forma de uma mistura racêmica.



**Figura 1.** Diagrama ORTEP da ftalazina-triona **4** com elipsoides térmicos representados a um nível de probabilidade de 50%.

## Conclusões

O uso de irradiação de micro-ondas por 10 minutos, associado às propriedades catalíticas do ácido *p*-sulfônico calix[4]areno (ApSC) permitiram a obtenção, em rendimentos moderados a bons, de 11 ftalazina-trionas de interesse biológico.

## Agradecimentos

À FAPEMIG, ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro, à PRPq/UFMG pela concessão da bolsa de IC de Yuri F. Rego e ao LabCri-UFMG, pela disponibilização do difratômetro de Raios-X.

<sup>1</sup> Berber, N.; Arslan, M.; Yavuz, E.; Bilen, C.; Gencer, N. *J. Chem.* **2013**, *2013*, 8, Article ID 742178.

<sup>2</sup> Khurana, J.M.; Magoo, D. *Tetrahedron Lett.* **2009**, *50*, 7300.

<sup>3</sup> Gopalakrishnan, M.; Sureshkumar, P.; Kanagarajan, V.; Thanusu, J. *Res. Chem. Intermed.* **2007**, *33*, 541.