

# REAÇÕES DE ESTERIFICAÇÃO: UMA NOVA APLICAÇÃO PARA O REAGENTE PENTACLORETO DE NIÓBIO ( NbCl<sub>5</sub> )

Letícia G. Ferreira (IC), André R. Pinto(PG), José A. B. C. Junior(PG), Wesley de M. R. Barros(PG), Eduardo C. Freire(PG), Glaucia B. A. Slana(PQ), Jarí N. Cardoso (PQ), Rosângela S. C. Lopes\*(PQ), Claudio C. Lopes\*(PQ).

Departamento de Química Analítica - Instituto de Química (IQ), UFRJ, CT, Bloco A, sala 508, 21949-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

\* email: claudiosabbatini@uol.com.br

Palavras Chave: Pentacloreto de nióbio, Ácido carboxílico, Álcool, Esterificação.

## Introdução

O reagente pentacloreto de nióbio (NbCl<sub>5</sub>) tem sido utilizado em diversas reações em Química Orgânica Sintética, tais como: formação de tetraidropiranos, Diels-Alder, abertura de epóxidos, reações de condensação aldólica, acilações regioseletivas de Friedel-Crafts e síntese de carboxamidas<sup>1</sup>.

Neste trabalho estamos propondo uma nova aplicação para o pentacloreto de nióbio (NbCl<sub>5</sub>) nas reações de esterificações de ácidos carboxílicos.

## Resultados e Discussão

Inicialmente, a partir de dois álcoois distintos, isômeros entre si, 1-butanol e 2-butanol foram realizadas algumas reações com variados ácidos carboxílicos aromáticos.(Figura 1)

**Figura 1.** Reações de ácidos carboxílicos aromáticos com 1 e 2- butanol/NbCl<sub>5</sub>.



	1-BuOH	2-BuOH	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>
<b>1</b>	79%	58%	Me	H	H	H
<b>2</b>	95%	77%	H	Me	H	H
<b>3</b>	99%	80%	H	H	H	H
<b>4</b>	79%	66%	OH	H	H	H
<b>5</b>	87%	75%	H	OH	H	OH
<b>6</b>	88%	74%	H	H	OH	H
<b>7</b>	65%	57%	OH	H	H	SO <sub>3</sub> H
<b>8</b>	33%	20%	NH <sub>2</sub>	H	H	H
<b>9</b>	41%	35%	H	H	NH <sub>2</sub>	H
<b>10</b>	88%	77%	NH <sub>2</sub>	Cl	H	Cl
<b>11</b>	89%	78%	H	NO <sub>2</sub>	H	NO <sub>2</sub>

Pelos resultados demonstrados observa-se que o impedimento estérico é um fator importante a ser considerado com relação aos melhores rendimentos obtidos para os ésteres aromáticos utilizando o álcool 1-butanol em relação ao 2-butanol.

Quando se compara o éster do ácido *m*-toluico (**2**) com o éster do ácido benzóico (**3**), não se observou uma diferença significativa. Entretanto quando a metila encontra-se na posição *orto* em (**1**), o rendimento tem o seu valor reduzido o que poderia ser explicado pelo efeito estérico do grupo metila, tornando o carbono do ácido carboxílico menos nucleofílico para formar o niobato intermediário.

Outro fator de importância é a capacidade de coordenação do substituinte na posição *orto*, comparando-se os ésteres obtidos do ácido salicílico (**4**) e o ácido antranílico (**8**), observa-se um rendimento maior para **4**, devido a menor capacidade de coordenação da hidroxila, com relação ao grupamento amino, o qual dessa maneira fornece um niobato intermediário mais estável e portanto menos reativo para ser deslocado pelo álcool desejado fornecendo através destas reações ésteres com menores rendimentos. Os rendimentos obtidos para os ésteres nas substâncias (**10**) e (**11**) foram maiores comparativamente a **8** em função da presença de grupos retiradores de elétrons.

Outros ésteres dos álcoois 1-butanol e 2-butanol também foram preparados a partir de ácidos carboxílicos heteroaromáticos, alifáticos e aminoácidos. Os resultados destas reações também serão discutidos e apresentados neste trabalho na sessão de poster.

## Conclusões

Esta metodologia de síntese para a formação de ésteres butílicos requisita a presença de niobatos intermediários reativos e álcoois desimpedidos.

## Agradecimentos

Agradecimentos: CAPES, CNPq, FAPERJ e FUJB-UFRJ.

<sup>1</sup> Nery, M.S., Ribeiro, R.P., Lopes, C.C. e Lopes, R.S.C., Synthesis, 2003, 272.