DISCIPLINARUM SCIENTIA *Disciplinarum Scientia.* **Série: Naturais e Tecnológicas**
Santa Maria, v. 27, n. 3, p. 107-121, 2026
Recebido em: 12.04.2026. Aprovado em: 12.06.2026.
ISSN 2176-462X | DOI: doi.org/10.37779/nt.v27i3.5794

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE ÉSTERES BIDENTADOS VIA METODOLOGIA VERDE[1]

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF BIDENTATE ESTERS BY GREEN METHODOLOGY

Edjarme do Livramento Almeida Junior[2], Andrew Matheus Frederico Rozada[3], George Barbosa da Silva[4], Claudemir Batalini[5]

RESUMO

A síntese de compostos orgânicos por rotas ambientalmente mais seguras constitui um dos principais desafios atuais da Química, em razão do elevado impacto associado ao uso de solventes tóxicos e condições reacionais severas. Nesse contexto, o presente trabalho teve como foco a síntese de ésteres aromáticos derivados da fenolftaleína e α-naftolftaleína, empregando o método de Schotten-Baumann. Partiu-se do questionamento acerca da viabilidade da obtenção desses ésteres aromáticos por uma rota sintética mais sustentável, bem como da influência da modificação estrutural dos materiais de partida sobre as características dos produtos formados. Assim, o objetivo geral foi sintetizar e caracterizar o dibenzoato de fenolftaleinila (EL1) e o dibenzoato de α-naftolftaleinila (EL2), empregando meio aquoso, temperatura ambiente e ausência de solventes orgânicos. Especificamente, buscou-se obter os compostos a partir da reação com cloreto de benzoíla, comparar os produtos aos materiais de partida, elucidar suas estruturas. O trabalho fundamentou-se nos princípios da Química Verde e utilizou como procedimento metodológico para as caracterizações as técnicas de ponto de fusão, cromatografia em camada delgada (CCD), espectroscopia no infravermelho (IV), ressonância magnética nuclear de hidrogênio e carbono-13 (RMN^{1}H e RMN^{13}C). Os resultados indicam êxito na formação dos compostos desejados, sendo EL2 de estrutura inédita, com rendimentos percentuais satisfatórios. A técnica utilizada revela-se simples, de baixo custo e perfeitamente alinhada a vários dos princípios da Química Verde.

Palavras-chave: Síntese Orgânica; Schotten-Baumann; Química Verde.

ABSTRACT

The synthesis of organic compounds through environmentally safer routes constitutes one of the main current challenges in Chemistry, due to the significant impact associated with the use of toxic solvents and harsh reaction conditions. In this context, the present work focused on the synthesis of aromatic esters derived from phenolphthalein and α-naphtholphthalein, employing the Schotten-Baumann method. The study was based on the question of the feasibility of obtaining these aromatic esters through a more sustainable synthetic route, as well as the influence of structural modification of the starting materials on the characteristics of the products formed. Thus, the general objective was to synthesize and characterize phenolphthalein dibenzoate

1 Trabalho de Dissertação de Mestrado - PPGMAT/UFMT/CUA.

2 Mestrando em Ciência de Materiais - Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT/CUA. E-mail: edjarmejr@outlook.com. ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8297-1163

3 Professor doutor - Curso de Química Licenciatura - Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT/CUA. E-mail: andrew.rozada@ufmt.br. ORCID: https://orcid.org/0000-0001-8151-7949

4 Professor doutor - Curso de Licenciatura em Física - Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT/CUA. E-mail: george.silva@ufmt.br. ORCID: https://orcid.org/0009-0001-9878-0134

5 Professor doutor (orientador) - Curso de Química Licenciatura - Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT/CUA. E-mail: claudemirbatalini@hotmail.com. ORCID: https://orcid.org/0000-0002-5915-0850

(EL1) and α-naphtholphthalein dibenzoate (EL2), using aqueous medium, room temperature, and the absence of organic solvents. Specifically, the aim was to obtain the compounds through reaction with benzoyl chloride, compare the products with the starting materials, and elucidate their structures. The work was grounded in the principles of Green Chemistry and employed, as methodological procedures for characterization, melting point determination, thin-layer chromatography (TLC), infrared spectroscopy (IR), and proton and carbon-13 nuclear magnetic resonance spectroscopy (^{1}H NMR and ^{13}C NMR). The results indicate successful formation of the desired compounds, with EL2 presenting a novel structure and satisfactory yields. The technique proved to be simple, low-cost, and fully aligned with several principles of Green Chemistry.

Keywords: *Organic Synthesis; Schotten-Baumann; Green Chemistry.*

1 INTRODUÇÃO

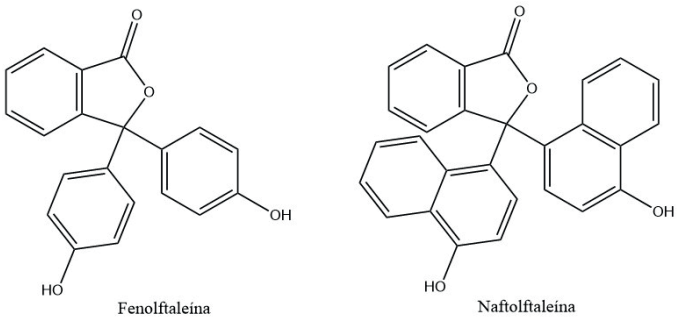
A busca por rotas sintéticas mais seguras e mais amigáveis ao meio ambiente constitui um dos principais desafios atuais observados nas áreas de Química, especialmente devido ao impacto associado ao uso de solventes tóxicos, reagentes agressivos e condições reacionais severas. Nesse contexto, os princípios da Química Verde têm sido amplamente empregados no desenvolvimento de metodologias capazes de reduzir a geração de resíduos e o consumo de energia, sem comprometer a eficiência sintética (ANASTAS; WARNER, 1998; ANASTAS; KIRCHHOFF, 2002; CAREY *et al.*, 2023; RAMCHURAN *et al.*, 2023; PIRES; LIMA, 2024).

Entre as diferentes classes de compostos orgânicos, os ésteres aromáticos destacam-se por suas numerosas aplicações como intermediários sintéticos, componentes de materiais, moléculas biologicamente ativas e potenciais ligantes para complexos metálicos. Os ésteres são funções carboniladas, que comumente são definidos como derivados do ácido carboxílico e um álcool, no qual os grupos hidroxilas (-OH) são substituídos por uma ramificação orgânica (alquila ou arila). Quando associados a sistemas aromáticos, esses compostos podem apresentar maior conjugação eletrônica, estabilidade e possibilidade de interação intermolecular, características que ampliam seu interesse químico e tecnológico (OLIVEIRA *et al.*, 2014; MIKOVSKI *et al.*, 2019; BARREIRO; FRAGA, 2021; FERNINE *et al.*, 2022; SHAREEF *et al.*, 2024).

Tradicionalmente, a obtenção de ésteres ocorre por meio da esterificação de Fischer, reação entre ácidos carboxílicos e álcoois em meio ácido. Apesar de amplamente utilizada, essa metodologia geralmente requer aquecimento, uso de ácidos fortes e solventes orgânicos, gerando maior consumo energético e resíduos potencialmente nocivos. Em contrapartida, a reação de Schotten-Baumann apresenta-se como uma alternativa eficiente para a obtenção de ésteres aromáticos. Essa metodologia baseia-se na reação entre cloretos de ácidos aromáticos e compostos fenólicos ou amínicos, podendo ser conduzida em meio aquoso e sob condições brandas de temperatura, o que reduz o uso de solventes orgânicos e favorece maiores seletividades reacionais (SCHOTTEN, 1884; BAUMANN, 1886; SILVA; JUNIOR; BATALINI, 2021; REZENDE *et al.*, 2021; CINTRA *et al.*, 2022; IJIRI *et al.*, 2024).

A aplicação dessa metodologia torna-se particularmente relevante para compostos contendo grupos fenólicos, como a fenolftaleína e a α-naftolftaleína (figura 1) utilizados neste trabalho. Essas substâncias apresentam dois grupos hidroxila fenólicos passíveis de funcionalização, permitindo a obtenção de derivados aromáticos mais complexos. Do ponto de vista estrutural, a presença de um sistema aromático conjugado pode promover deslocalização eletrônica, afetando parâmetros como estabilidade, polaridade e reatividade química.

Figura 1 - Estruturas químicas da Fenfolftaleina e α-naftolftaleinila, ésteres aromáticos



Fonte: Construção do Autor.

Essa conjugação também pode modificar características espectroscópicas e a interação dessas moléculas com radicais livres ou outros reagentes químicos. Por essa razão, muitos ésteres aromáticos apresentam propriedades diferenciadas quando comparados a ésteres alifáticos, incluindo maior estabilidade térmica e diferentes perfis de atividade biológica (ANASTAS; KIRCHHOFF, 2002; MCMURRY, 2011; SYKES, 2017; CAREY *et al.*, 2023).

Essa abordagem foi aplicada à síntese de ésteres aromáticos derivados de sistemas ftaleínicos, resultando aqui na obtenção do dibenzoato de fenolftaleinila (EL1) e dibenzoato de naftolftaleinila (EL2) (Figura 1) a partir da reação entre fenolftaleína e α-naftolftaleína e cloreto de benzoíla, empregando a metodologia de Schotten-Baumann em meio aquoso e à temperatura ambiente.

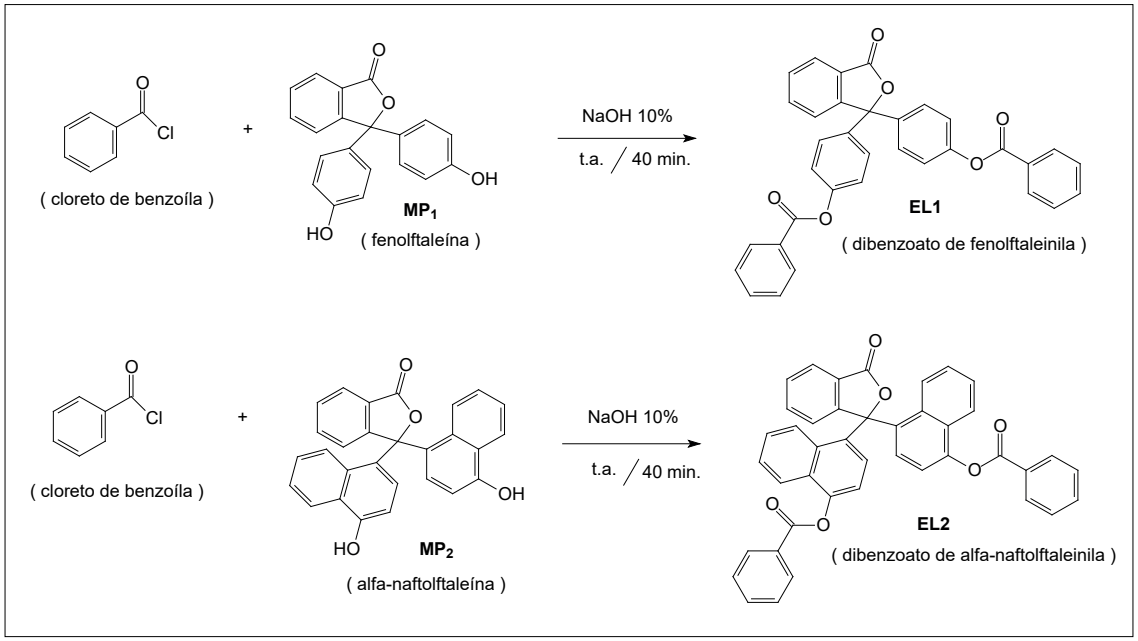
2 MATERIAL E METÓDOS

SÍNTESE DOS ÉSTERES AROMÁTICOS

As sínteses foram conduzidas nas dependências do LAPQUÍM/UFMT/Unidade I - CUA em Pontal do Araguaia (MT) e feitas em duplicata. Os dois ésteres aromáticos foram sintetizados através da clássica síntese de Schotten-Baumann, tomando por base algumas referências (SCHOTTEN, 1884; BAUMANN, 1886; REZENDE *et al.*, 2021; CINTRA *et al.*, 2022). A Figura 2 realça a rota sintética seguida para as duas sínteses. As reações foram realizadas suspendendo-se inicialmente 12,0 mmols dos fenóis aromáticos fenolftaleína (MP1) (3,82 g) e alfa-naftolftaleína (MP2) (5,02 g), separadamente,

em 100 mL de solução aquosa de hidróxido de sódio (NaOH) a 10% (m/v), à temperatura ambiente, sob agitação com barra magnética, e após 20 minutos, 60,0 mmols de cloreto de benzoíla (6,9 mL) foram adicionados à solução. As reações foram mantidas sob agitação à temperatura ambiente por 40 minutos. Em seguida os sólidos obtidos foram filtrados em um funil de Büchner e os cristais foram lavados com água destilada por diversas vezes. Os produtos foram secos em estufa mantendo-se a temperatura entre 313,15-323,15 K. Após a secagem, os produtos brutos foram purificados por recristalização com álcool isoamílico, secos novamente conforme procedimento anterior e calculado o peso seco real para o cálculo do rendimento da reação.

Figura 2 - Rota sintética verde de Schotten-Baumann empregada para a síntese dos ésteres aromáticos EL1 e EL2.



Fonte: Construção do autor.

CARACTERIZAÇÃO DAS SUBSTÂNCIAS

Os valores de ponto de fusão foram obtidos manualmente, fazendo o uso de um tubo de ensaio de 30 cm de altura, 3 cm de diâmetro, preenchido com óleo de silicone, acoplado a um termômetro. Para aquecimento usou-se chama de um botijão de gás acoplado a um bico de Bunsen. Os valores foram expressos em uma faixa de temperatura de fusão, em graus Celsius.

As análises por cromatografia em camada delgada (CCD) foram feitas utilizando como fase estacionária placas prontas de sílica gel G 60 ALUGRAM® (Macherey-Nagel) de sílica gel UV 254 de 5,0 cm x 10,0 cm, hexano e acetato de etila numa proporção 7:3 (v/v) como fase móvel. As manchas formadas que caracterizam as substâncias foram observadas dentro de uma câmara escura contendo lâmpada de ultravioleta-visível (ROBARDS; RYAN, 2022) e expressas em valor de Fator de Retenção (FR), calculados pela seguinte fórmula:

$$FR = DOC/DOF \quad (1)$$

Onde FR = Fator de Retenção; DOC = distância da origem da placa até o centro da mancha exibida pela substância e DOF = distância da origem da placa até o final da corrida do solvente (fase móvel). Os valores de FR não tem unidade. Ambas as análises de pontos de fusão e CCD foram realizadas nas dependências do LAPQUÍM/UFMT/CUA - Unidade I - Pontal do Araguaia (MT).

Os espectros de Infravermelho (IV) foram obtidos em espectrofotômetro com transformada de Fourier, modelo Perkin Elmer Spectrometer 100, resolução de 4 cm^{-1}, na região compreendida entre 4000-600 cm^{-1} (PAVIA *et al.*, 2015), usando cristal de germânio sem solubilização em solvente. O aparelho utilizado encontra-se no CPMUA/UFMT/CUA - Unidade II - Barra do Garças (MT).

Os Espectros de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN ^{1}H) foram obtidos em aparelho Bruker Avance III HD 500 MHz (utilizando clorofórmio deuterado como solvente) e os espectros de Ressonância Magnética Nuclear de Carbono 13 (RMN ^{13}C) foram obtidos em aparelho Bruker Avance III HD 126 MHz (utilizando clorofórmio deuterado como solvente) (PAVIA *et al.*, 2015). O aparelho encontra-se na UFMT/Central Analítica - Cuiabá (MT). Todos os reagentes e solventes usados neste trabalho encontravam-se na sua forma comercial P.A., sem nenhuma purificação adicional.

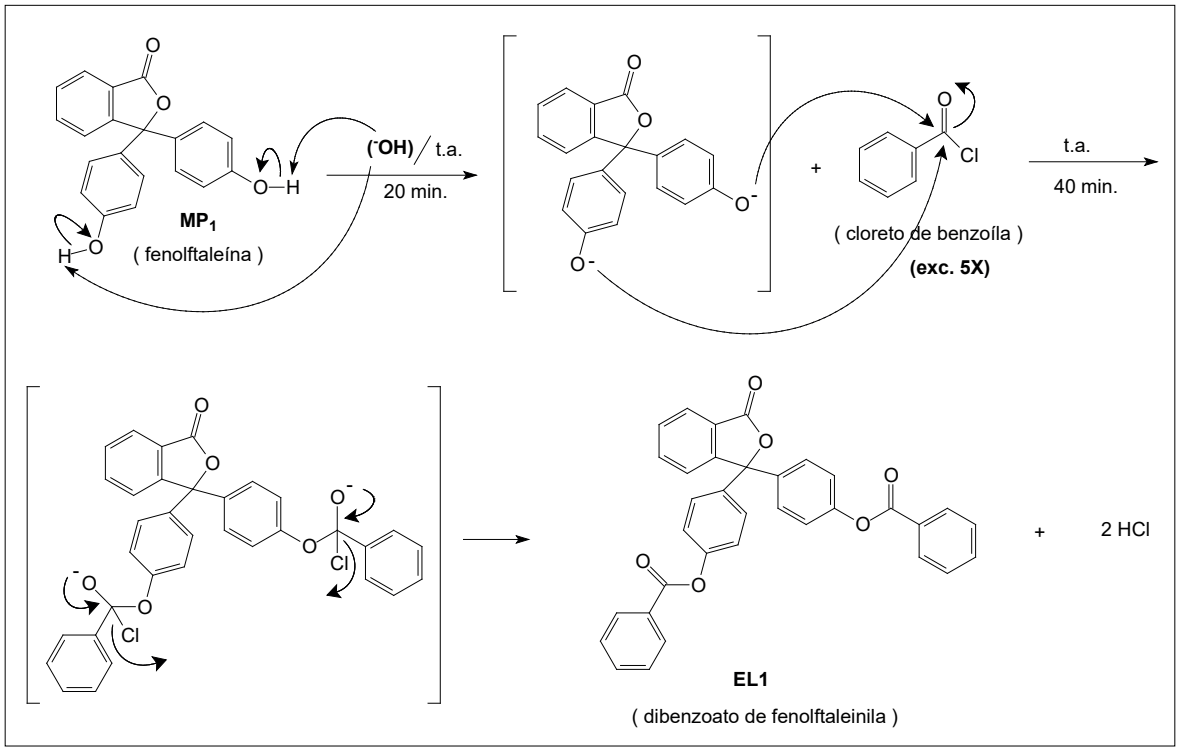
3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Aspectos mecanísticos das sínteses:

Com relação ao mecanismo de reação envolvido nas sínteses, ambas apresentam o mesmo padrão de reações de substituição nucleofílica bimolecular (SN2). A Figura 3 demonstra o mecanismo de reação proposto para a síntese do éster EL1 e que pode-se considerar semelhante para o produto EL2, enquanto a Figura 4, mostra as estruturas obtidas através da síntese.

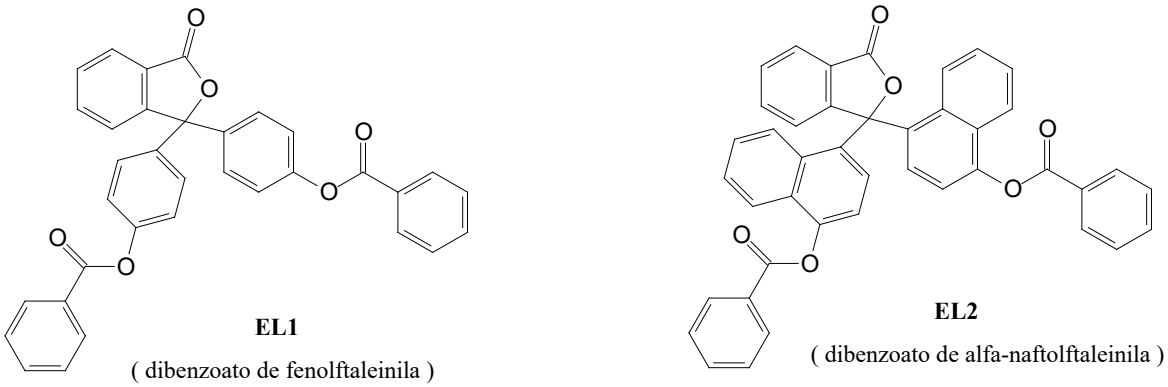
Na primeira etapa verifica-se que o meio básico, pela ação do reagente aquoso básico hidróxido de sódio (NaOH) 10%, favorece a desprotonação das hidroxilas fenólicas, gerando um intermediário diânion fenóxi. Seguindo mecanismo de reação SN2, o diânion fenóxi é fortemente básico para atacar a carbonila do cloreto de benzoíla em excesso de cinco vezes em mmols, na segunda etapa, formando um intermediário dianiônico com os dois carbonos atacados assumindo uma geometria momentaneamente tetraédrica (carbonos de hibridização sp^3). Na terceira e última etapa observa-se o reestabelecimento das duas carbonilas, com o retorno dos dois átomos de carbono à hibridização sp2, levando à formação dos dois grupamentos éster aromáticos. (SYKES, 2017).

Figura 3 - Mecanismo de reação proposto para as sínteses do éster aromático EL1 (que é semelhante para o éster aromático EL2).



Fonte: Construção do autor.

Figura 4 - Estruturas químicas do dibenzoato de fenolftaleinila (EL1) e dibenzoato de naftolftaleinila (EL2) sintetizados por meio da reação verde de Schotten-Baumann.



Fonte: Construção do Autor.

Do ponto de vista mecanístico, a reação de Schotten-Baumann ocorre por substituição nucleofílica acílica e difere da esterificação de Fischer principalmente pela maior reatividade dos cloretos de acila. Enquanto a esterificação de Fischer depende de catálise ácida, aquecimento e deslocamento do equilíbrio reacional, a metodologia de Schotten-Baumann permite a formação do éster em condições mais brandas e, geralmente, com rendimentos satisfatórios. Além disso, a possibilidade de conduzir a reação em meio aquoso e à temperatura ambiente torna essa metodologia mais compatível com os princípios da Química Verde, ao reduzir o consumo energético e o uso de solventes orgânicos.

CARACTERIZAÇÃO DAS SUBSTÂNCIAS POR PONTO DE FUSÃO E CROMATOGRAFIA EM CAMADA DELGADA (CCD)

A metodologia empregada de Schotten-Baumann levou à geração dos dois ésteres aromáticos EL1 e EL2, com um rendimento médio para dibenzoato de fenolftaleinila (EL1) (58,4%) e rendimento baixo para dibenzoato de alfa-naftolftaleinila (EL2) (23,6%), como destacados na Tabela 1. Apesar de realizadas as sínteses em duplicata, os rendimentos permaneceram nesta faixa. Perdas de material durante a recristalização podem estar relacionados com esse fator.

Tabela 1 - Caracterizações por ponto de fusão e CCD dos materiais de partida (MP1 e MP2) e dos produtos (EL1 e EL2).

Substâncias	**Pontos de Fusão (ºC)**			**Rendimento (%)**		**Coloração**
	Experimental	**Literatura**	**Erro Percentual (%)**		**FR[3]**	
Fenolftaleína **(MP1)**	260-262	262,5 [1]	0,57		0,27	levemente amarelo
Dibenzoato de fenolftaleinila **(EL1)**	167-169	169 [2]	0,59	58,4	0,56	Branco
Naftolftaleína **(MP2)**	280-282	288 [1]	2,43		0,25	Marrom-arroxeado
Dibenzoato de naftolftaleinila **(EL2)**	247-250	---	---	23,6	0,56	Marrom

[1] Sigma-Aldrich - Catálogo de reagentes químicos. 2014; [2] https://scifinder.cas.org; [3] **FR** = Fator de retenção na CCD.
Fonte: Construção do autor.

A Tabela 1 apresenta a coloração dos cristais obtidos após lavagem, secagem e recristalização, bem como os valores de ponto de fusão e fator de retenção dos materiais de partida e dos produtos sintetizados.

As faixas de fusão obtidas para MP1, MP2 e EL1 mostraram-se concordantes com os valores descritos na literatura, apresentando erros percentuais inferiores a 5,0%, dentro do limite experimental aceitável (VOGEL, 1981). Para EL2, por se tratar de uma substância inédita, não foi possível realizar essa comparação.

Observou-se que os pontos de fusão de EL1 e EL2 foram inferiores aos de seus respectivos materiais de partida. Esse comportamento é atribuído à substituição das hidroxilas fenólicas por grupos éster benzoílicos, eliminando as ligações de hidrogênio intermoleculares presentes em MP1 e MP2. Nos produtos, predominam interações dipolo-dipolo, menos intensas, o que reduz a coesão do retículo cristalino e, consequentemente, a temperatura de fusão. Além disso, os intervalos estreitos de fusão observados para os compostos obtidos indicam grau de pureza satisfatório, uma vez que substâncias puras apresentam pequenas variações em sua faixa de fusão (VOGEL, 1981).

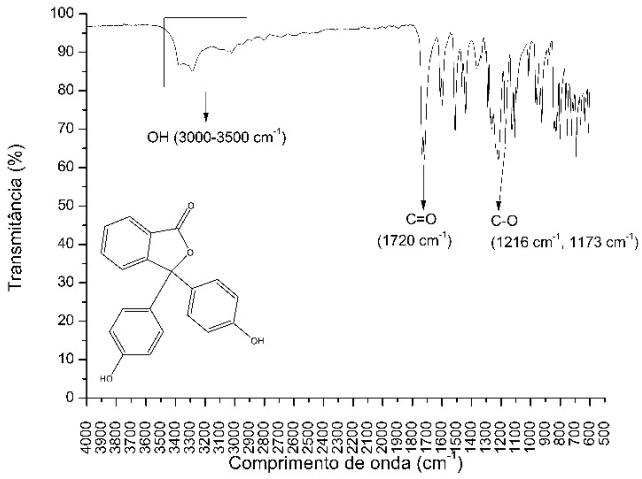
Segundo Amorim (2019), compostos diferentes apresentam distintos comportamentos cromatográficos em função de suas estruturas moleculares e das interações estabelecidas com as fases estacionária

e móvel. Os valores de fator de retenção obtidos por cromatografia em camada delgada foram maiores para EL1 e EL2 em relação aos materiais de partida. Esse resultado era esperado, uma vez que a esterificação reduz a polaridade das moléculas, diminuindo sua interação com a sílica gel da fase estacionária e favorecendo maior deslocamento na fase móvel hexano de etila (7:3 v/v). Dessa forma, os resultados de ponto de fusão e FR corroboram com a de novas substâncias após as reações de benzoilação.

CARACTERIZAÇÃO POR ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO

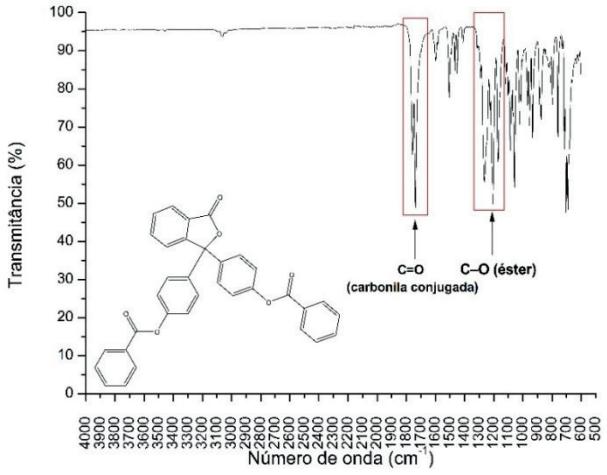
A espectroscopia no infravermelho constitui-se de grande valia quando se trata de caracterizar substâncias orgânicas. Os espectros de Infravermelho (IV) obtidos (Figuras 4 a 7) forneceram informações importantes para credenciamento dos materiais obtidos. Nesses espectros, comparando-se os materiais de partida com os produtos, observa-se mudanças esperadas e que ocorreram.

Figura 5 - Espectro de Infravermelho (IV) do material de partida MP1 (fenolftaleína).



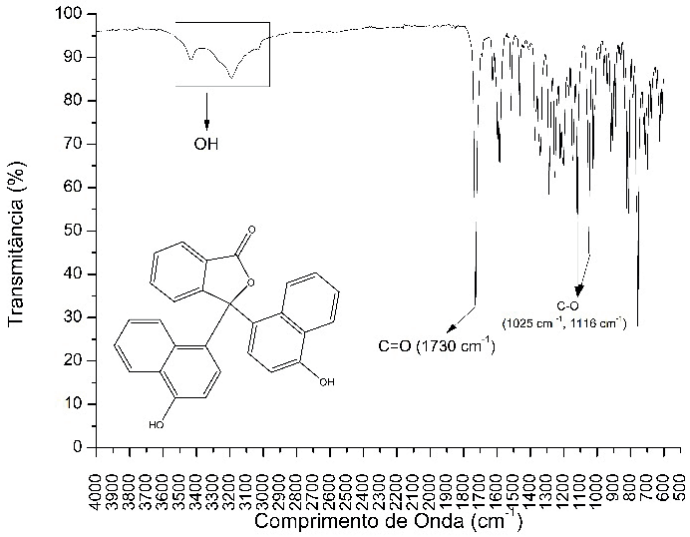
Fonte: Construção do Autor.

Figura 6 - Espectro de Infravermelho (IV) do éster aromático/produto EL1 (dibenzoato de fenolftaleinila).



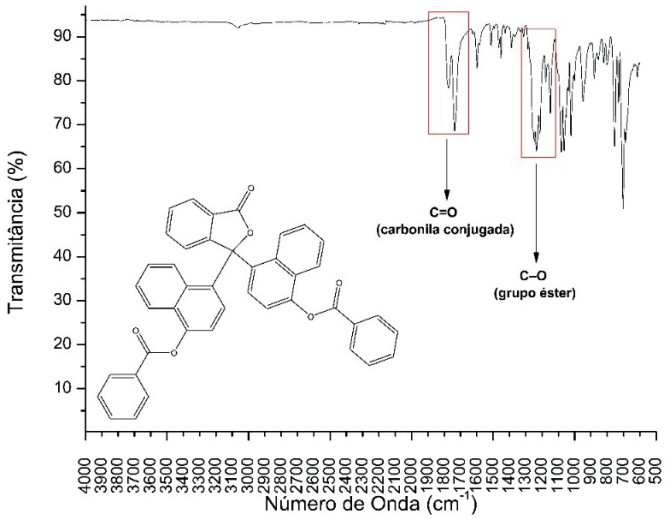
Fonte: Construção do Autor.

Figura 7 - Espectro de Infravermelho (IV) do material de partida MP2 (alfa-naftolftaleína).



Fonte: Construção do Autor.

Figura 8 - Espectro de Infravermelho (IV) do éster aromático/produto EL2 (dibenzoato de alfa-naftolftaleinila).



Fonte: Construção do Autor.

Podemos observar no espectro de MP1 (Figura 5) uma banda larga em torno de 3000-3500 cm^{-1}, típica da vibração de estiramento do grupo hidroxila (OH) fenólico. Essa banda é um indicativo de ligação hidrogênio e confirma a presença de grupos fenólicos livres. As moléculas precursoras já apresentam carbonila de lactona. O que evidencia a reação não é a ausência da banda, mas a modificação do perfil espectral na região de 1700 cm^{-1}, associada à introdução da carbonila do éster aromático. Já no espectro de EL1 (Figura 6), podemos observar nitidamente o desaparecimento da banda ampla por volta de 3200-3600 cm^{-1}, indicando que a esterificação foi concluída com sucesso. Em seu lugar, surge uma banda forte e estreita na região de ~1720 cm^{-1}, qual podemos atribuir ao estiramento da carbonila conjugada (C=O) típica de ésteres aromáticos. As bandas intensas na região de 1250-1050 cm^{-1} confirmam a presença da ligação C-O (PAVIA *et al.*, 2015).

O espectro de MP2 (Figura 7) exibe uma banda de estiramento larga de -OH na região de 3000-3500 cm $^{-1}$, confirmando a presença de grupos fenólicos livres. O espectro ainda nos mostra regiões características do sistema aromático, como estiramentos C=C dos anéis na região de 1600-1450 cm^{-1} e as deformações angulares fora do plano dos hidrogênios aromáticos entre aproximadamente 900 e 700 cm^{-1}. Ao observamos o espectro de EL2 (Figura 8), podemos notar alterações marcantes. A banda de carbonila C=O aparece fortemente em torno de ~1715 cm^{-1}, e as bandas de C-O na região de ~1150-1250 cm^{-1} tornam-se mais definidas. A ausência da banda da hidroxila em 3200-3600 cm^{-1}, assim como no espectro de EL1 (Figura 6), é um indicativo da benzoilação dos grupos do material de partida alfa-naftolftaleína (PAVIA *et al.*, 2015).

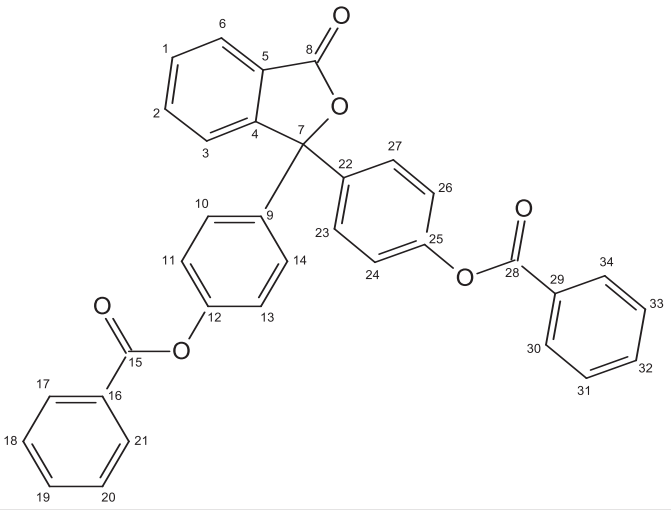
CARACTERIZAÇÃO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Tanto os produtos obtidos EL1 e EL2 quanto os materiais de partida MP1 e MP2 foram caracterizados utilizando a técnica de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN ^{1}H) e de Carbono 13 (RMN ^{13}C). Dados detalhados dos sinais obtidos de RMN ^{1}H e de Carbono 13 RMN ^{13}C para os produtos EL1 e EL2 encontram-se dispostos nas Tabelas 2 a 5.

Um ponto importante que precisa ser elencado quando se examina os seguintes espectros de RMN dos compostos é a simetria presente nas moléculas, fazendo com que ocorra uma incidência menor de sinais que podem ser avaliados. Essa característica estrutural está diretamente relacionada à equivalência química de determinados núcleos, o que reduz o número de sinais observados e está em concordância com as estruturas propostas para os compostos sintetizados. Foram realizadas predições sobre os sinais dos compostos sintetizados a fim de verificar a semelhança entre os sinais obtidos experimentalmente (PAVIA *et al.*, 2015).

Os deslocamentos químicos observados mostram-se consistentes com os valores descritos na literatura para sistemas aromáticos substituídos e ésteres aromáticos, reforçando a confiabilidade das atribuições realizadas. Nas Tabelas 2 e 3 encontram-se os dados dos espectros de RMN, tanto de hidrogênio como de carbono 13 dos produtos obtidos EL1 e EL2.

Tabela 2 - Dados obtidos de RMN[1]H e RMN[13]C do éster aromático/produto EL1 (dibenzoato de fenolftaleinila).

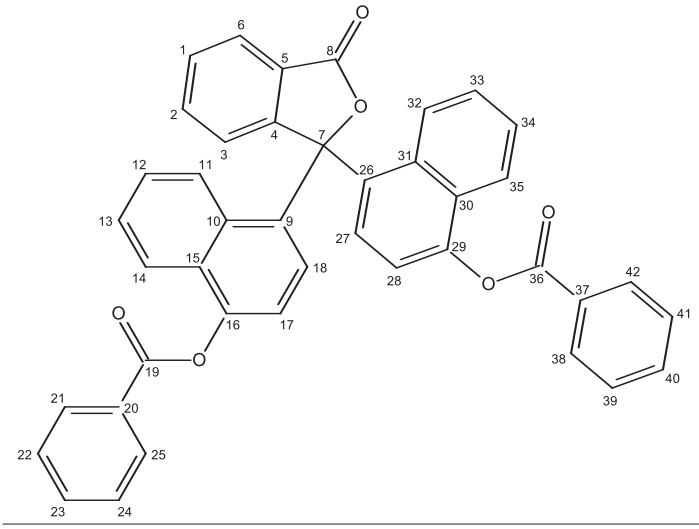
RMN ^{1}H	
	**RMN ^{1}H**
	7,98 (6, ddd); 7,61 (1-3 ddd); 7,74 (2 ddd); 7,44 (10,14,23,27 ddd); 7,22 (11,13,24,26 ddd); 8,19 (7,21,30,34 dddd); 7,51 (18,20,31,33 dddd); 7,64 (19,32 dddd)
	RMN ^{13}C
	169,6 (8); 165,1 (15,28); 151,8 (4); 151,28 (12,25); 130,36 (17,21,30,34); 128,8 (18,20,31,33); 128,7 (10,14,23,27); 122 (11,13,24,26); 91 (7)

Legendas: lê-se sinal, numeração, dd (duplo dupleto), ddd (duplo duplo dupleto), dddd (dupleto de dupleto de dupleto de dupleto); * sinal em ppm (partes por milhão),
Fonte: Construção do Autor.

Para o produto éster EL1, um dos indícios de confirmação da estrutura química é a ausência do sinal da hidroxila que faz parte dos materiais de partida e o aparecimento dos hidrogênios dos grupos benzoíla com δ 7,51, 7,64 e 8,19 ppm no espectro de RMN ^{1}H (dados na Tabela 2). A ausência desse sinal confirma a substituição dos grupos fenólicos, o que elimina a possibilidade de formação de ligações de hidrogênio e promove alterações no ambiente eletrônico da molécula. Os deslocamentos observados na região aromática podem ser atribuídos ao efeito retirador de elétrons dos grupos benzoíla, que promovem desblindagem dos hidrogênios adjacentes, resultando em sinais em regiões de maior deslocamento químico.

O espectro de RMN ^{13}C de EL1 (Tabela 2) mostra como sinais característicos e que comprovam a sua obtenção o sinal δ 165,1 ppm, correspondente às carbonilas de éster dos grupos benzoíla, e os carbonos dos aneis aromáticos do grupo benzoíla em δ 128,8 e 130,16 ppm. A presença desses sinais na região típica de carbonilas de éster (δ 165-175 ppm) confirma a formação da nova função orgânica, sendo um indicativo inequívoco da ocorrência da reação de benzoilação. A distribuição dos sinais aromáticos também está de acordo com a inserção dos grupos benzoíla na estrutura molecular.

Tabela 3 - Dados obtidos de RMN[1]H e RMN[13]C do éster aromático/produto EL2 (dibenzoato de alfa-naftolftaleinila).

RMN	
	**RMN [1]H**
	8,07 (6 ddd); 7,34 (28,17 dd); 8,32 (21,25,38,42 dddd); 7,58 (22,24,39,41 dddd); 7,41(23,40 dddd); 8,09 (14,35 dd); 7,29 (12,33 ddd); 7,98 (11,32 dddd); 7,58-7,69 (1,2,3,13,18,27,34)
	RMN [13]C
	169,9 (8); 165,0 (19,36); 152,7 (16,29); 130,4 (21,25,38,42); 128,9 (22,24,39,41)

Legendas: lê-se sinal, numeração, dd (duplo dupleto), ddd (duplo duplo dupleto), dddd (dupleto de dupleto de dupleto de dupleto); * sinal em ppm (partes por milhão).
Fonte: Construção do autor.

Analisando os espectros de RMN, existem indicativos que ambas as sínteses foram realizadas com sucesso. Comparativamente aos materiais de partida, observa-se uma reorganização significativa do perfil espectral, evidenciada principalmente pela modificação dos ambientes químicos dos hidrogênios e carbonos após a reação de esterificação.

Para o EL2, um dos indícios de confirmação estrutural é ausência do sinal da hidroxila que faz parte dos materiais de partida e o aparecimento dos hidrogênios dos grupos benzoíla em δ 7,41; 7,58; 8,32 ppm no espectro de RMN ^{1}H (Tabela 3). De maneira análoga ao observado para EL1, essa modificação estrutural evidencia a conversão dos grupos fenólicos em ésteres, com consequente alteração na distribuição eletrônica do sistema. A presença de múltiplos sinais na região aromática reflete a maior complexidade estrutural do sistema, especialmente devido à presença do núcleo naftalênico, que contribui para uma maior dispersão dos deslocamentos químicos.

O espectro de RMN ^{13}C de EL2 (Tabela 3) mostra como sinais característicos e que comprovam a sua obtenção o sinal δ 165,0 ppm, correspondente às carbonilas de éster do grupo benzoíla, e os carbonos dos aneis aromáticos do grupo benzoíla em δ 130,4 e 128,9 ppm. Assim como em EL1, esses sinais confirmam a formação dos grupos éster, sendo coerentes com os valores esperados para carbonilas conjugadas a sistemas aromáticos. Adicionalmente, a ausência de sinais inesperados nos espectros sugere elevada pureza dos compostos obtidos, indicando que o método sintético empregado foi eficiente na obtenção dos produtos desejados.

CONCLUSÕES

O desenvolvimento de rotas alternativas para a síntese de novos compostos é imprescindível para minimizar os impactos causados ao meio ambiente. A metodologia empregada neste trabalho contempla diversos princípios da Química Verde. Nesse contexto, a síntese de Schotten-Baumann mostrou-se uma alternativa viável, uma vez que foi realizada em meio aquoso, sem necessidade de aquecimento e com redução significativa no uso de solventes orgânicos nocivos.

Os resultados obtidos por meio das técnicas de caracterização indicam fortemente que os produtos foram formados com sucesso. Destaca-se que o dibenzoato de α-naftolftaleinila (EL2) se trata de um composto inédito. Alterações em propriedades como polaridade, ponto de fusão e nos sinais espectroscópicos, quando comparados os produtos finais aos materiais de partida, corroboram o êxito das sínteses realizadas. Adicionalmente, esses materiais apresentam potencial para aplicações futuras, como na formação de filmes de Langmuir-Blodgett e como ligantes bidentados em complexos metálicos.

REFERÊNCIAS

AMORIM, A. F. V. **Química - Métodos Cromatográficos**. 1 ed. Fortaleza: Editora da Universidade Estadual do Ceará, 2019.

ANASTAS, P. T.; KIRCHHOFF, M. M. Origins, current, status, and future challenges of Green Chemistry. **Accounts of Chemical Research**, v. 35, n. 9, p. 686-694, 2002.

ANASTAS, P. T.; WARNER, J. C. **Green Chemistry**: Theory and Practice. Oxford: Oxford University Press, 1998.

BARREIRO, E. J.; FRAGA, C. A. M**. Química Medicinal:** as Bases Moleculares da Ação dos Fármacos. 3 ed. Porto Alegre: Artmed, 2021.

BAUMANN, E. Ueber eine einfache methode der darstellung von benzoësäureäthern. **Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft**, v. 19, n. 2, p. 3218-3222, 1886.

CAREY, F. A.; GIULIANO R. M.; ALLISON, N. T.; BANE, S. L. **Organic Chemistry**. 9 ed. New York (EUA): McGraw-Hill Higher Education, 2023.

CINTRA, C. A.; SILVA, A.; JUNIOR, J. M.; BATALINI, C. Síntese de amidas poliaromáticas conduzidas por processo verde e investigações farmacológicas. **Revista Panorâmica Online**, v. 37, 2022.

FERNINE, Y; ARROUSSE, N; HALDHAR, RAJESH; RAORANE, CHAITANY JAYPRAKASH; KIM, SEONG-CHEOL; HAJJAJI, F EL; TOUHAMI, M EBN; BENIKEN, M; HABOUBI, K; TALEB, M; Synthesis and characterization of phenolphthalein derivatives, detailed theoretical DFT computation/molecular simulation, and prevention of AA2024-T3 corrosion in medium 3.5% NaCl. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 140, p. 104556, 2022.

IJIRI, J. S.; SANTOS, M. F. L.; JUNIOR, J. M.; SANTOS, W. B.; BATALINI, C. Síntese de ésteres aromáticos mono, bi e tridentados via metodologia verde e avaliações biológicas. **Disciplinarum Scientia - Ciências Naturais e Tecnológicas**, v. 25, n. 1, p. 37-51, 2024.

McMURRY, J. **Química Orgânica**, 7 ed., Cengage Learning: São Paulo, 2011.

MIKOVSKI, D; BASSO, J; DA SILVA, P; RIBAS, J. L. C. Química Medicinal e a sua importância no desenvolvimento de novos fármacos. **Revista Saúde e Desenvolvimento**, v. 12, n. 13, p. 29-43, 2019.

OLIVEIRA, C. A.; SOUZA, A. C. J.; SANTOS, A. P. B.; SILVA, B. V.; LACHTER, E. R.; Pinto, A. C. Síntese de ésteres de aromas de frutas: um experimento para cursos de graduação dentro de um dos princípios da Química Verde. **Revista Virtual de Química**, v. 6, n. 1, p. 152-167, 2014.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introduction to Spectroscopy**, 5 ed. Perlego.com, 2015.

PIRES, E. V.; LIMA, M. C. O ensino da química verde para a conscientização ambiental e incentivo a uma boa conduta na manipulação de produtos químicos. **Revista Brasileira de Educação Ambiental (RevBEA)**, v. 19, n. 3, p. 106-116, 2024.

RAMCHURAN, S. O.; O'BRIEN, F.; DUBE, N.; RAMDAS, V. An overview of green processes and technologies, biobased chemicals and products for industrial. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, v. 41, 100832, 2023.

REZENDE, D. V. A.; REZENDE, B. A.; OLIVEIRA, M. V. M. D.; BATALINI, C. Preparação e caracterização de ésteres e amidas aromáticas seguindo alguns dos princípios da Química Verde. **Disciplinarum Scientia - Ciências Naturais e Tecnológicas**, v. 22, n. 1, p. 55-66, 2021.

ROBARDS, K.; RYAN, D. **Principles and Practice of Modern Chromatographic Methods**. 2nd ed. Academic Press, 2022.

SCHOTTEN, C. Ueber die oxydation des piperidins. **Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft**, v. 17, n. 2, p. 2544-2547, 1884.

SHAREEF, U.; ALTAF, A.; AHMED, M.; AKHTAR, N.; ALMUHAYAWI, M. S.; AL JAONI, S. K.; SELIM, S.; ABDELGAWAD, M. A.; NAGSHABANDI, M. K. A comprehensive review of discovery and development of drugs discovered from 2020-2022. **Saudi Pharmaceutical Journal**, v. 32, n. 1, 101913, 2024.

SILVA, A. D.; JUNIOR, J. M.; BATALINI, C. Síntese e caracterização de derivados da l-fenilalanina e l-tirosina alinhada à "química verde" e avaliação da toxicidade. **Brazilian Journal of Development**, v. 7, n. 1, p. 1614-1631, 2021.

SYKES, P. **A Guidebook to Mechanism in Organic Chemistry**. 6 ed. Harlow: Pearson, 2017.

VOGEL, A. I. **Química Orgânica**, 6 ed., v. 1, 2 e 3. Rio de Janeiro (RJ): Ao Livro Técnico, 1981.