

ISABELLA SILVA DE RESENDE SANTOS

**SÍNTESE DE ÉSTERES A PARTIR DO ÁCIDO
FENOXIACÉTICO E DE FENÓIS NATURAIS VIA
ESTERIFICAÇÃO DE STEGLICH**

Monografia apresentada ao Departamento de
Química da Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências para a conclusão do
Curso de Bacharelado em Química.

Orientadora: Profa . Dra . Patrícia Fontes
Pinheiro

**VIÇOSA – MINAS GERAIS
2022**

Dedico esta monografia a Deus primeiramente que me deu força nesta jornada, em segundo a minha família que sempre acreditou em mim.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por ter estado ao meu lado em todos os momentos, de onde eu sinto que vem minha força em sempre continuar meus projetos.

À meu pai Robson que sempre acreditou em mim, e não mediu esforços para que esse meu sonho, que se tornou nosso fosse realizado. Obrigada por ser a luz nos momentos em que eu estava na escuridão.

À minha mãe Adriana, ao segundo pai Carlos, ao irmão Matheus pelo incentivo e me mostrarem que eu sempre serei capaz de realizar meus sonhos.

Às minhas avós Francisca e Margarida, pelas orações, acolhimento e palavras de paz em toda essa trajetória.

Às minhas tias Silvana e Graça que me acolheram quando decidi mudar de cidade e ir para Teixeiras MG.

À minha prima Danielle pelas incontáveis caronas, e pelos conselhos que me fizeram acreditar que tudo era possível.

Às minhas amigas Rosilene, Maria Fernanda e Iare, obrigada por todo o apoio, carinho, e pelos momentos inesquecíveis que me fizeram uma pessoa melhor.

“Pesquisar é acordar para o mundo.” (Marcelo Lamy).

RESUMO

SILVA DE RESENDE SANTOS, Isabella, monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, agosto de 2022. **Síntese de ésteres a partir do ácido fenoxiacético e de fenóis naturais via esterificação de Steglich.** Orientador: Profa . Dra . Patrícia Fontes Pinheiro.

Os herbicidas são os agrotóxicos mais utilizados no campo, pois são de grande importância no controle de plantas daninhas. Devido ao uso frequente e indiscriminado de herbicidas ao longo dos anos, sérios problemas vêm sendo relatados, tais como: o aumento de espécies daninhas resistentes aos herbicidas convencionais, o que pode vir a inviabilizar o uso de diversos herbicidas comerciais. Existe uma grande demanda por parte das indústrias de agroquímicos no desenvolvimento de compostos que tenham ação herbicida, que sejam ainda mais eficientes no controle das espécies de plantas daninhas e que causem menor impacto ambiental. Esses compostos devem possuir sítios de ação específicos, ter curta meia-vida no ambiente, deixando menos resíduos no solo, na água ou na planta. Compostos naturais e seus derivados têm atraído grande interesse de pesquisa, sendo uma alternativa e podem servir de inspiração na obtenção de novos herbicidas. Os fenóis representam uma classe que tem grande potencial ação fitotóxica, muitos desses são encontrados em óleos essenciais de plantas e podem ser adquiridos comercialmente na forma pura, tais como: timol, carvacrol, eugenol e guaiacol. A partir destes fenóis naturais é possível obter derivados semissintéticos, como por exemplo podem ser usados na síntese de ésteres, que podem apresentar melhor atividade herbicida do que os fenóis supracitados. Dessa forma, objetivou-se neste trabalho sintetizar ésteres com potencial herbicida, utilizando como o ácido fenoxiacético, DCC (N,N'-dicicloexilcarbodiimida) e DMAP (N,N-dimetilpiridin-4-amina), na presença de fenóis naturais, sendo eles o eugenol, guaiacol, carvacrol e timol, via esterificação de Steglich. Os ésteres produzidos foram: 2-fenoxiacetato de 4-álil-2-metoxifenila, 2-fenoxiacetato de 2-metoxifenila, 2-fenoxiacetato de 5-isopropil-2-metilfenila e o 2-fenoxiacetato de 2-isopropil-5-metilfenila. Para caracterizar os produtos sintetizados foram realizadas análises dos espectros no infravermelho, espectros de massas e análises por Ressonância Magnética Nuclear de ^1H e ^{13}C . Os compostos obtidos podem ser úteis na obtenção de novos herbicidas, devido a testes fitotóxicos realizados anteriormente.

Palavras-chaves: herbicidas, fenóis naturais, esterificação de Steglich.

ABSTRACT

SILVA DE RESENDE SANTOS, Isabella, Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry, Universidade Federal de Viçosa, August, 2022. **Synthesis of esters from phenoxyacetic acid and natural phenols via Steglich esterification.** Advisor: Patrícia Fontes Pinheiro.

Herbicides are the most used pesticides in the field, as they are of great importance in controlling weeds. Due to the frequent and indiscriminate use of herbicides over the years, serious problems have been reported, such as: the increase in weed species resistant to conventional herbicides, which may make the use of several commercial herbicides unfeasible. There is a great demand on the part of the agrochemical industries in the development of compounds that have herbicidal action, what are more efficient in controlling weed species and may cause less environmental impact. These compounds must have specific sites of action, and a short half-life in the environment, leaving less residue to the soil, water plants. Natural compounds and their derivatives have attracted great research interest, being an alternative for can serve as inspiration in obtaining new herbicides. Phenols represent a class that has great potential phytotoxic action, many of which are found in essential plant oils and can be purchased commercially in pure form, such as: thymol, carvacrol, eugenol and guaiacol. From these natural phenols it is possible to obtain semi-synthetic derivatives, for example they can be used in the synthesis of esters, which may have better herbicidal activity than the aforementioned phenols. Thus, the objective of this work is to synthesize esters with herbicidal potential, using as phenoxyacetic acid, DCC (N,N'-dicyclohexylcarbodiimide) and DMAP (N,N-dimethylpyridin-4-amine), in the presence of natural phenols, being they eugenol, guaiacol, carvacrol and thymol, via Steglich esterification. It is envisaged to obtain the respective esters: 4-allyl-2-methoxyphenyl 2-phenoxyacetate, 2-methoxyphenyl 2-phenoxyacetate, 5-isopropyl-2-methylphenyl 2-phenoxyacetate and 2-isopropyl-5-2-phenoxyacetate -methylphenyl. To characterize the synthesized products, analysis of infrared spectra, mass spectra and ^1H and ^{13}C Nuclear Magnetic Resonance will be performed.

Keywords: herbicides, natural phenols, Steglich esterification.