

**RHAYSSA STHEFANY SILVA PINHEIRO**

**SÍNTESE E AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE FITOTÓXICA DE ÉSTERES  
DERIVADOS DO CARVACROL EM REAÇÕES CATALISADAS POR ÁCIDOS  
DE LEWIS**

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

Orientador: Patrícia Fontes Pinheiro

VIÇOSA – MINAS GERAIS  
2023

*Dedico esse trabalho a Deus por estar sempre comigo e a minha família pelo apoio incondicional...*

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de começar esse texto agradecendo a todas as pessoas que tornaram essa jornada acadêmica inesquecível.

Primeiramente gostaria de agradecer a minha orientadora Patrícia. Seu apoio, sabedoria e paciência foram fundamentais. Não tenho palavras para agradecer pela sua orientação e por acreditar no meu potencial, não poderia ter tido uma orientadora melhor.

À minha família por sempre terem acreditado em mim e sempre me apoiado. Obrigada por estarem sempre ao meu lado e serem meu alicerce. Queria colocar um agradecimento especial a minha mãe, a mulher mais guerreira que eu conheci, sem você seria impossível eu ter chegado onde cheguei.

Aos meus amigos por tornarem cada momento dessa jornada especial. Todos os momentos, desde as risadas até os choros, todos valeram a pena por ter vocês ao meu lado.

As minhas companheiras de república por estarem comigo nessa caminhada. Vocês se tornaram parte da minha família, sem vocês os dias teriam sido horríveis. Agradeço por cada risada, por cada momento compartilhado. Sou muito mais feliz por ter vocês ao meu lado.

Aos meus amigos do LabCat por terem me ajudado e me ensinado tanto no período que estive por lá. Foi meu primeiro contato na área de pesquisa e eu não teria conseguido escrever esse trabalho sem a experiência que adquiri. Desta forma também gostaria de agradecer ao professor Márcio por ter acreditado em mim e me dado a oportunidade de aprender.

Aos professores, que durante a graduação sempre me apoiaram e me ajudaram a não desistir.

Por fim, agradeço à Deus por ter me sustentado e nunca ter deixado a minha fé ser abalada, até nos momentos em que quis desistir, você estava lá me dizendo que eu era capaz.

Obrigada a todos que fizeram parte dessa jornada. Este trabalho é o resultado de muito esforço e apoio incrível que recebi ao longo do caminho.

## RESUMO

PINHEIRO, RHAYSSA, monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, setembro, 2023. Síntese e Avaliação da Atividade Fitotóxica de ésteres derivados do carvacrol em reações catalisadas por Ácido de Lewis. Orientador: Patrícia Fontes Pinheiro.

Os ésteres podem ser sintetizados por reações entre ácidos carboxílicos e álcoois, usando catálise ácida. Alguns ésteres são usados na agricultura como herbicidas, para o controle de plantas daninhas, tendo como exemplo o 2,4-D isooctil éster. Dessa forma, o objetivo deste trabalho foi usar o carvacrol (fenol natural) na síntese do ácido carvacroxiacético (AC), que tem estrutura similar à do 2,4-D (ácido 2,4-diclorofenoxiacético), para obter novos ésteres e realizar ensaio biológico para determinar o potencial fitotóxico (herbicida) das novas moléculas. Para isso, resolveu-se desenvolver uma metodologia inédita para a síntese dos ésteres carvacroxiacetato de alquilas, usando o AC e os respectivos álcoois: metanol, etanol, propano-1-ol e butano-1-ol, iniciando pela escolha do catalisador (ácido de Lewis). Os catalisadores testados na reação do AC com metanol foram:  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{AlCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , todas as reações foram realizadas usando 10 mol% de  $\text{Fe}^{3+}$  ou de  $\text{Al}^{3+}$  em relação ao AC. Alíquotas dessas reações foram analisadas por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (CG-EM) para determinar qual catalisador foi o mais promissor. A reação que apresentou os melhores resultados, onde foi observada a conversão total do AC com metanol no éster carvacroxiacetato de metila, em temperatura ambiente, em 2 horas, foi a usando como catalisador o  $\text{AlCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Assim, os outros ésteres foram sintetizados por essa metodologia inédita e foram caracterizados por espectroscopia no infravermelho (IV), espectrometria de massas, por ressonância magnética de hidrogênio e de carbono 13. Suspensões contendo os ésteres sintetizados, a  $3 \text{ mmol L}^{-1}$ , foram preparadas em Tween 80 a 1% ( $\text{m m}^{-1}$ ), que foram usadas em um ensaio fitotóxico, *in vitro*, usando sementes de alface e de sorgo. Os quatro ésteres inibiram 100% a germinação e o crescimento radicular de alface e inibiram quase totalmente as raízes de sorgo. Essas moléculas poderão servir de modelo para a obtenção de novos herbicidas, tendo como grande vantagem a utilização do carvacrol como precursor desses compostos.

*Palavras-chaves: esterificação, semissintéticos, fitotoxicidade, catálise, plantas*