UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM AGROQUÍMICA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS, NATURAIS E DA SAÚDE

GUSTAVO RODRIGUES DE SOUZA

SÍNTESE CATALÍTICA *ONE-POT* DE ACETANILIDAS BROMADAS E AVALIAÇÃO DO POTENCIAL FUNGICIDA FRENTE AO FUNGO *Botrytis Cinerea*

ALEGRE - ES

2023

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS, NATURAIS E DA SAÚDE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM AGROQUÍMICA

ATA Nº 42 DA SESSÃO PÚBLICA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO ALUNO GUSTAVO RODRIGUES DE SOUZA

Ata de Defesa pública da 42ª Dissertação de Mestrado em Agroquímica do Centro de Ciências Exatas, Naturais e da Saúde – CCENS da Universidade Federal do Espírito Santo, do aluno Gustavo Rodrigues de Souza, candidato ao grau de Mestre em Agroquímica. Às oito horas e trinta minutos do dia vinte de março de dois mil e vinte e três (20/03/2023), em ambiente virtual, o Presidente da Comissão Examinadora, Prof. Dr. Luciano Menini (PPGAQ), deu início à sessão apresentando a Comissão constituída, além dele próprio, Orientador do Mestrando, pelos professores Doutores: Mário Ferreira Conceição Santos (Examinador Interno – Ufes) e Patrícia Fontes Pinheiro (Examinador Externo ao Projeto - UFV). A seguir, o Presidente passou a palavra ao candidato que, em 30 minutos, apresentou a sua dissertação intitulada: **"Síntese Catalítica One-pot de Acetanilidas Bromadas e Avaliação do Potencial Fungicida frente ao Fungo *Botrytis Cinerea*"**. Finda a apresentação, iniciou-se a arguição. Finda a arguição, o Presidente da sessão solicitou que o aluno aguardasse fora do ambiente virtual para que a Comissão pudesse deliberar. Ao final das deliberações, o Presidente da sessão convocou o Mestrando e demais interessados para reingressarem no ambiente virtual. Com a palavra, o Presidente da Comissão leu a decisão da Banca que resultou na **aprovação** do aluno. Por fim, o Presidente da sessão alertou que o aprovado somente terá direito ao título de Mestre após a entrega da versão final de sua dissertação, em meio digital, à Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Agroquímica com as alterações recomendadas pela Comissão Examinadora. Nada mais havendo, foi encerrada a sessão da qual se lavra a presente Ata, que vai assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

gov.br Documento assinado digitalmente
LUCIANO MENINI
Data: 20/03/2023 11:13:07-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Dr. Luciano Menini (Orientador do Mestrando)

gov.br Documento assinado digitalmente
MARIO FERREIRA CONCEICAO SANTOS
Data: 20/03/2023 11:33:02-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Dr. Mário Ferreira Conceição Santos (Examinador Interno)

gov.br Documento assinado digitalmente
PATRICIA FONTES PINHEIRO
Data: 20/03/2023 11:40:26-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Drª Patrícia Fontes Pinheiro (Examinador Externo)

gov.br Documento assinado digitalmente
GUSTAVO RODRIGUES DE SOUZA
Data: 20/03/2023 11:54:47-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Gustavo Rodrigues de Souza (Mestrando)

RESUMO

A catálise é essencial para a indústria química, uma vez que, cerca de 90% dos produtos químicos industriais passam por sistemas catalíticos em pelo menos uma de suas etapas de produção. Os produtos sintetizados mediante aos processos catalíticos variam desde substâncias de estrutura simples a substâncias que apresentam estruturas químicas complexas. Dentre esses diversos produtos, pode destacar a síntese de defensivos agrícolas, no entanto, muitos dos agroquímicos já desenvolvidos são obtidos a partir de várias etapas de síntese, o que torna o processo mais oneroso e não é ambientalmente desejável, devido à quantidade de resíduos gerados e ao alto gasto energético. Sendo assim, desenvolver processos mais eficazes e que tenham um número reduzido de etapas para alcançar o produto final é desafiador e muito desejável. Uma das maneiras mais eficientes de alcançar esses objetivos é mediante a utilização de etapas catalíticas do tipo *one-pot*, que englobam todas as metodologias sintéticas com duas ou mais transformações sequenciais, quer estas sejam catalíticas ou estequiométricas, desde que realizadas no mesmo reator e envolvam uma única etapa de purificação. Visando esse cenário, o presente estudo realizou a síntese de novas moléculas através de reações de oxibromação e amidação via síntese catalítica *one-pot* e avaliou o potencial fungicida dos produtos sintetizados, frente ao fungo *Botrytis cinerea*. Os produtos etil-4-acetamida-3-bromobenzoato (P2), *N*-(4-bromofenil)acetamida (P4) e *N*-(2-bromo-4-butilfenil)acetamida (P6), foram obtidos com excelentes conversões e seletividade e as estruturas químicas foram confirmadas por análises via CG-EM e RMN de ^{1}H e ^{13}C. Os produtos P2, P4 e P6 não apresentaram atividade fitotóxica frente a sementes de alface. Já em relação à atividade fungicida, os produtos P2, P4 e P6 apresentaram um potencial promissor em inibição do crescimento micelial *in vitro*, frente ao fungo *Botrytis cinerea*.

Palavras-Chave: Aminas aromáticas. Catálise. *One-Pot*. Halogenação. Amidação.

ABSTRACT

Catalysis is essential for the chemical industry, since about 90% of industrial chemicals go through catalytic systems in at least one of their production stages. The products synthesized through catalytic processes range from substances with a simple structure to substances with complex chemical structures. Among these various products, we can highlight the synthesis of pesticides, however, many of the agrochemicals already developed are obtained from several stages of synthesis, which makes the process more expensive and is not environmentally desirable, due to the amount of waste generated. and high energy expenditure. Therefore, developing more effective processes that have a reduced number of steps to reach the final product is challenging and very desirable. One of the most efficient ways to achieve these objectives is through the use of one-pot catalytic steps, which encompass all synthetic methodologies with two or more sequential transformations, whether catalytic or stoichiometric, as long as they are carried out in the same reactor and involve a single purification step. Aiming at this scenario, the present study carried out the synthesis of new molecules through oxybromination and amidation reactions via one-pot catalytic synthesis and evaluated the fungicidal potential of the synthesized products against the *Botrytis cinerea* fungus. The products ethyl-4-acetamide-3-bromobenzoate (P2), N-(4-bromophenyl)acetamide (P4) and N-(2-bromo-4-butylphenyl)acetamide (P6) were obtained with excellent conversions and selectivity and chemical structures were confirmed by GC-MS and ^{1}H and ^{13}C NMR analyses. Products P2, P4 and P6 did not show phytotoxic activity against lettuce seeds. Regarding fungicidal activity, products P2, P4 and P6 showed a promising potential in inhibiting mycelial growth *in vitro* against the fungus *Botrytis cinerea*.

Keywords: Aromatic amines. Catalysis. One-Pot. Halogenation. Amidation.