



UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

SÍNTESE DE REGULADORES DE CRESCIMENTO DE PLANTAS DERIVADOS DE NAFTALENO



Autor: Zimila, Hercílio Eduardo

Maputo, Dezembro de 2011



UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

SÍNTESE DE REGULADORES DE CRESCIMENTO DE PLANTAS DERIVADOS DE NAFTALENO



Autor: Zimila, Hercílio Eduardo

Supervisor: Professor Doutor Victor Skripets

Co-supervisor: dr. Bonifácio Maússe

Maputo, Dezembro de 2011

DEDICATÓRIA

Dedico este Trabalho à minha família, especialmente aos meus pais
Eduardo Xavier Zimila e Ana Armando Matavele Zimila
que vem me acompanhando, tanto em questões acadêmicas quanto sociais,
desde o meu primeiro dia de vida até hoje.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradecer a Deus pela contínua vida e saúde que me concede.

Um sincero e precioso agradecimento aos meus supervisores Prof. Doutor Victor Skripets e dr. Bonifácio Maússe pela grandeza do trabalho que tem desenvolvido, especialmente pelo extraordinário esforço e paciência que tiveram de me orientar aquando da execução deste trabalho.

Um agradecimento especial aos meus pais, Eduardo e Ana, que embora não soubessem das razões de tanto sofrimento, sempre se sacrificaram e acreditaram em mim e aos meus sonhos.

Aos meus tios Ricardo Gil Macufa, Deolinda Armando Matavele e Adérito Matavele vai o meu muito obrigado pela força e apoio que me concederam desde o primeiro dia da minha estadia na cidade de Maputo até hoje.

Aos meus irmãos, Carla Zimila e Reginaldo Zimila, meus tios Armando Zimila, Adérito Matavele, e meus avós Azarias Matavele, Carolina Dava e Marta Noé que sempre estiveram do meu lado e apoiaram-me moral e financeiramente vai o meu muito obrigado.

Aos meus colegas e amigos Isac Abdulgani, Feniassa Chitaca, Osório Mucanze, Dércia Ernesto, Gil Chibantão e Anastância Foliche agradeço bastante pela companhia que me fizeram durante a execução do curso.

À dr^a. Noor Jehan Gulamussen que me permitiu o uso do banho de areia vai o meu muito obrigado.

DECLARAÇÃO DE HONRA

Declaro por minha honra que este trabalho foi da minha autoria e foi elaborado com base nos recursos a que ao longo do texto se faz referência.

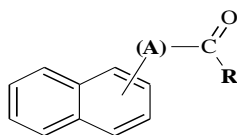
O autor

Hercílio Eduardo Zimila

RESUMO

Os Reguladores de Crescimento de Plantas (PGRs) são compostos químicos envolvidos em diversos processos de crescimento e desenvolvimento de plantas em geral, e culturas alimentares em particular. São, portanto, agentes químicos de grande importância agrícola, porém, pouco utilizados em Moçambique. Estes compostos estimulam o crescimento das plantas, quer por inibição como por intensificação de certas actividades biológicas exercidas pelas hormonas vegetais que a planta produz durante o ciclo normal da sua vida. São classicamente conhecidos 5 grupos de PGRs: as auxinas, giberelinas, citocininas, ácido abscísico e etileno.

O presente trabalho tem como objectivo central estudar a síntese e analisar as propriedades químicas dos reguladores de crescimento de plantas (PGRs) derivados de naftaleno de fórmula geral **1**; onde onde **A** pode ser grupo metileno (-CH₂-), ou éter (-O-CH₂-) enquanto **R** pode ser o grupo oxidrilo (-OH), amino (-NH₂) ou éter (-O-CH₃ ou -O-C₂H₅). Estes foram seleccionados das restantes classes de PGRs por possuírem actividades biológicas de grande interesse para o melhoramento da agricultura moçambicana, por possuírem estruturas relativamente simples, e por existirem técnicas de síntese relativamente simples e menos dispendiosas.



Como resultado, foi preparado o ácido α -naftilacético (**A**=CH₂, **R**=OH e a cadeia ligada ao carbono 1 do naftaleno) através de duas vias clássicas (a) reacção do naftaleno com ácido cloroacético e b) a reacção de Grignard), seleccionadas com base na disponibilidade do material e reagentes. Os rendimentos obtidos por estas vias são: 1.5 % pela reacção do naftaleno com o ácido cloroacético e 59.4% pela reacção de Grignard. Preparou-se também o ácido 2-naftoxiacético (**A**= -O-CH₂- e **R** = -OH) e o seu derivado, 2-naftoxiacetato de potássio (**A**= -O-CH₂- e **R**= -O⁻K⁺), pela síntese de Williamson, utilizando como reagentes o β -naftol e o ácido cloroacético na presença de hidróxido de potássio; tendo se obtido cerca de 59.4 % de rendimento.

Os produtos das reacções foram purificados através da técnica de recristalização e a sua pureza foi controlada através de cromatografia em camada fina (CCF). A confirmação estrutural foi feita através de espectroscopia de ressonância magnética nuclear do protão (RMN-¹H) e espectroscopia de infravermelho (IV).

GLOSSÁRIO DE ABREVIATURAS

PGRs – reguladores de crescimento de plantas

AIA – ácido indol-3-acético

IIAM – Instituto de Investigação Agrária de Moçambique

ZmABP1 – Zea mays Auxin-Binding Protein 1

CCF – cromatografia em camada fina

RMN – espectroscopia de ressonância magnética nuclear

RMN-¹H – espectroscopia de ressonância magnética nuclear de próton

RMN-¹³C – espectroscopia de ressonância magnética nuclear de carbono 13

UV – radiação ultravioleta

UV/Vis – espectroscopia de ultravioleta e visível

IV – espectroscopia de infravermelho

CTF – catálise de transferência de fase

DMSO – dimetilsulfóxido

ppm – partes por milhão

TMS – tetrametilsilano

NOMES DOS COMPOSTOS ENUMERADOS

- I.** Naftalen-1-ilacetoneitrilo
- II.** 2-(naftalen-1-il) acetamida
- III.** Ácido naftalen-1-ilacético (ou ácido α -naftilacético)
- IV.** Naftalen-1-ilacetato de potássio
- V.** Ácido naftaleno-1-carboxílico (ou ácido 1-naftóico)
- VI.** Cloreto de naftaleno-1-carbonilo
- VII.** 2-diazo-1-(naftalen-1-il)etanona
- VIII.** Naftalen-1-ilacetato de etilo
- IX.** Cloreto de Naftalen-1-ilacetilo
- X.** Anidrido naftalen-1-ilacético
- XI.** Naftaleno-1-carbaldeído
- XII.** 1-(clorometil)naftaleno
- XIII.** 2-(naftalen-1-il)etanol
- XIV.** Naftalen-1-ilacetato de metilo
- XV.** 2-(naftalen-1-il)propanoato de metilo
- XVI.** Ácido 2-(naftalen-1-il)propanóico
- XVII.** Ácido bromo(naftalen-1-il)acético
- XVIII.** Ácido (4-halonaftalen-1-il)acético
- XIX.** Ácido (4-nitronaftalen-1-il)acético
- XX.** Ácido (naftalen-2-iloxi)acético (ou ácido 2-naftoxiacético ou ácido β -naftoxiacético)
- XXI.** (Naftalen-2-iloxi)acetato de potássio
- XXII.** (Naftalen-2-iloxi)acetato de etilo
- XXIII.** Cloreto de (naftalen-2-iloxi)acetilo
- XXIV.** Anidrido de (naftalen-2-iloxi)acético
- XXV.** Ácido clorosulfónico
- XXVI.** Ácido {[1-(clorosulfonil)naftalen-2-il]oxi}acético
- XXVII.** Naftalen-2-ol (ou 2-naftol)
- XXVIII.** Naftalen-2-amina
- XXIX.** Ácido cloroacético
- XXX.** Ácidos cloroacetilpoliglicólicos

- XXXI.** Carbocatião resultante da decomposição dos ácidos cloroacetilpoliglicólicos
- XXXII.** Naftaleno
- XXXIII.** Formaldeído
- XXXIV.** 1-(clorometil)naftaleno
- XXXV.** Cloreto de naftalen-1-ilmetilmagnésio
- XXXVI.** Naftalen-2-olato de potássio
- XXXVII.** Cloroacetato de potássio

ÍNDICE

DEDICATÓRIA	III
AGRADECIMENTOS	IV
DECLARAÇÃO DE HONRA	V
RESUMO	VI
GLOSSÁRIO DE ABREVIATURAS	VII
NOMES DOS COMPOSTOS ENUMERADOS	VIII
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. <i>CONSIDERAÇÕES GERAIS</i>	1
1.2. <i>IMPORTÂNCIA DO TRABALHO</i>	2
1.3. <i>OBJECTIVOS DO TRABALHO</i>	3
3.1.1. <i>Geral</i>	3
3.1.2. <i>Específicos</i>	3
1.4. <i>METODOLOGIA APLICADA</i>	4
3.1.3. <i>Pesquisa bibliográfica</i>	4
3.1.4. <i>Recolha de dados</i>	4
3.1.5. <i>Parte experimental</i>	4
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1. <i>REGULADORES DE CRESCIMENTO DE PLANTAS</i>	5
2.1.1. <i>Auxinas</i>	5
2.1.1.1. <i>Descoberta</i>	5
2.1.1.2. <i>Estrutura e propriedades físicas gerais das auxinas</i>	6
2.1.1.3. <i>Principais actividades fisiológicas das auxinas</i>	7
2.1.1.4. <i>Mecanismo de acção das auxinas</i>	7
2.2. <i>MÉTODOS DE SÍNTESE DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO</i>	8
2.2.1. <i>Ácido α-naftilacético</i>	8
2.2.1.1. <i>Hidrólise dos nitrilos</i>	8
2.2.1.2. <i>Síntese de Arndt–Eistert</i>	9

2.2.1.3. Hidrólise dos ésteres, amidas primárias, cloretos de ácidos e anidridos de ácidos carboxílicos-----	10
2.2.1.4. A partir do naftaldeído-----	11
2.3. PROPRIEDADES QUÍMICAS DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO -----	12
2.3.1. Ácido α -naftilacético -----	12
2.3.1.1. Desprotonação -----	12
2.3.1.2. Esterificação ou reacção com álcoois -----	13
2.3.1.3. Formação de cloreto de acilo -----	13
2.3.1.4. Redução-----	13
2.3.1.5. Formação de anidridos de ácidos carboxílicos-----	13
2.3.1.6. Reacção de substituição α -----	14
2.3.1.7. Substituições no anel aromático-----	14
2.3.2. Ácido 2-naftoxiacético-----	15
2.3.2.1. Formação de sais -----	15
2.3.2.2. Esterificação ou reacção com álcoois -----	15
2.3.2.3. Formação de cloreto de acilo -----	15
2.3.2.4. Formação de anidridos de ácidos carboxílicos-----	15
2.3.2.5. Clorossulfonação -----	16
2.3.2.6. Reacção com sulfureto de amónio -----	16
2.4. MÉTODOS DE PURIFICAÇÃO E DETERMINAÇÃO DO GRAU DE PUREZA DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO -----	16
2.4.1. Recristalização -----	16
2.4.2. Cromatografia-----	17
2.4.2.1. Cromatografia em camada fina-----	17
2.4.2.2. Ponto de fusão -----	19
2.5. MÉTODOS DE CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO-----	20
2.5.1. Espectroscopia de infravermelho -----	20
2.5.2. Espectroscopia de ressonância magnética nuclear -----	21
3. PARTE EXPERIMENTAL -----	23
3.1. PREPARAÇÃO DOS REAGENTES PARA AS SÍNTESES -----	23

3.1.1.	Preparação do óxido de ferro (III) -----	23
3.1.2.	Determinação de peróxido em éter dietílico -----	24
3.1.3.	Secagem do éter dietílico -----	24
3.2.	SÍNTESE DO ÁCIDO A-NAFTILACÉTICO PELA REACÇÃO DE NAFTALENO COM O ÁCIDO CLOROACÉTICO-----	24
3.3.	SÍNTESE DO ÁCIDO A-NAFTILACÉTICO PELO MÉTODO DE GRIGNARD-----	26
3.4.	SÍNTESE DO ÁCIDO 2-NAFTOXIACÉTICO -----	27
3.5.	ANÁLISE CROMATOGRÁFICA -----	28
3.6.	ANÁLISE DOS ESPECTROS INFRAVERMELHO DOS COMPOSTOS SINTETIZADOS-----	29
3.7.	ANÁLISE DO ESPECTRO DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÃO DO ÁCIDO A-NAFTILACÉTICO-----	30
4.	ANÁLISE E INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS -----	31
4.1.	ÁCIDO A-NAFTILACÉTICO -----	31
4.2.	ÁCIDO 2-NAFTOXIACÉTICO E 2-NAFTOXIACETATO DE POTÁSSIO-----	32
5.	CONCLUSÃO-----	34
6.	RECOMENDAÇÕES-----	35
7.	BIBLIOGRAFIA -----	36
6.2.	PATENTES -----	38
6.3.	JORNAIS CIENTÍFICOS-----	39
6.4.	ARTIGOS DA INTERNET-----	40
ANEXOS -----		1

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Reagentes utilizados e os respectivos graus de pureza -----	23
Tabela 2. Compostos sintetizados e os respectivos valores dos índices de retenção-----	29
Tabela 3. Dados do espectro IV do ácido α -naftilacético -----	29
Tabela 4. Deslocamentos químicos de RMN- ¹ H do ácido α -naftilacético -----	30

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1. Estrutura do ácido indol-3-acético-----	6
Fig. 2. Representação esquemática da distância de separação entre os grupos carboxílicos e o anel aromático nas auxinas-----	6
Fig.3. Representação esquemática das ligações pontes de hidrogénio estabelecidas entre as moléculas de água e os grupos carboxílicos dos PGRs derivados de naftaleno-----	7
Fig. 4. Aparelho para a determinação do ponto de fusão equipado de um termómetro de mercúrio-----	19

ÍNDICE DE ANEXOS

Anexo I: Tabela 1. Principais auxinas disponíveis no mercado internacional -----	2
Anexo II: Tabela 2. Principais citocininas disponíveis no mercado internacional -----	7
Anexo III: Tabela 3. Principais giberelinas detectadas e isoladas dos tecidos vegetais -----	9
Anexo IV: Tabela 4. Principais libertadores de etileno disponíveis no mercado internacional -----	11
Anexo V: Tabela 5. Principais brassinosteróides disponíveis no mercado internacional -----	12
Anexo VI: Tabela 6. Principais jasmonatos detectados e isolados das plantas -----	12
Anexo VII: Tabela 7. Principais poliamidas com actividades reguladores de crescimento de plantas--	13
Anexo VIII: Tabela 8. Outros estimulantes de crescimento de plantas disponíveis no mercado internacional -----	14
Anexo IX: Tabela 9. Principais inibidores de crescimento de plantas disponíveis no mercado internacional -----	15
Anexo X: Tabela 10. Reguladores de crescimento de plantas não classificados -----	19
Anexo XI: Fig. 1. Espectro de infravermelho do ácido α -naftilacético -----	24
Anexo XII: Fig. 2. Espectro de ressonância magnética nuclear de próton do ácido α -naftilacético -----	25

1. INTRODUÇÃO

1.1. CONSIDERAÇÕES GERAIS

Desde os tempos remotos as plantas foram e continuam sendo o factor crucial para a sobrevivência do Homem na Terra. Isto deve-se ao facto destas possuírem a habilidade de libertar o oxigénio que permite a sua (Homem) respiração, fornecerem-lho alimentos, medicamentos, abrigo, vestuário e, com a civilização industrial, há uma exigência adicional destes produtos para a produção de energia (Meyer et al. 1965).

Sua germinação, crescimento e desenvolvimento são resultados de processos relativamente complexos governados por diversos factores, dos quais as *hormonas¹ vegetais ou fitohormonas* são de maior destaque (Meyer et al. 1965 e Devlin 1976).

Do ponto de vista académico, as *fitohormonas* constituem uma vasta gama de compostos orgânicos, não nutrientes (isto é, não fornecem energia nem minerais), produzidos em uma parte e translocados para outra parte da planta onde, em minúsculas concentrações (frequentemente <1 µM), desencadeiam respostas fisiológicas específicas (incluindo o desenvolvimento, o crescimento e a diferenciação celular, a floração, o amadurecimento dos frutos, entre outros) – podendo portanto ser designados de sistema nervoso da planta (Lessenger 2006).

Quase todas as plantas superiores têm a capacidade de sintetizar as fitohormonas endogenamente, porém, devido às condições climáticas e ambientais adversas, estas não sintetizam suficientes quantidades para o seu crescimento e desenvolvimento óptimos (Arshad et al. 2002). Há necessidade, nestas situações, de se aplicar exogenamente agentes químicos com actividades fisiológicas similares às das fitohormonas. Tais compostos exógenos são denominados *reguladores de crescimento de plantas (PGRs)*.

Embora as pesquisas envolvendo os PGRs tenham iniciado na década de 1930, somente nos últimos 30 anos é que estes compostos têm demonstrado a sua habilidade de diminuir os custos de produção, mas garantindo maiores e melhores rendimentos das culturas. Neste contexto, alguns derivados de naftaleno (nomeadamente os ácidos α -naftilacético e β -naftoxiacético bem como os

¹ A palavra hormona provém do grego «hormon» que significa «estimular»

alguns dos seus derivados, tais como o α -naftilacetamida, α -naftilacetatos de metilo e de potássio, β -naftoxiacetamida, β -naftoxiacetatos de potássio e de etilo) são PGRs utilizados principalmente para:

1. Prevenir a abscisão prematura de folhas, flores e frutos em arroz, trigo, mangueiras, soja e videiras;
2. Induzir a partenocarpia em tomate, bananas e citrinos
3. Inibir a brotação de batatas armazenadas;
4. Aumentar a qualidade e tamanho de batatas e uvas;
5. Estimular o início do enraizamento das estacas caulinares de plantas medicinais; e
6. Estimular o crescimento de algas que são utilizadas para a produção de biocombustíveis.

Face a estes impressionantes aspectos, esta tese tem como pano de fundo reunir conhecimentos suficientes para proceder com a síntese de alguns reguladores de crescimento de plantas contendo o núcleo de naftaleno cujas actividades fisiológicas são similares às das auxinas naturalmente produzidas pelas plantas.

1.2. IMPORTÂNCIA DO TRABALHO

Moçambique é um país em desenvolvimento onde cerca de 71 % da população é afectada pela pobreza absoluta. Os índices de pobreza são relativamente altos nas regiões rurais, onde a maior parte da população tem como base de sobrevivência a agricultura de subsistência; na qual os factores físicos ou naturais (clima, relevo e o tipo de solo) é que definem o rendimento das culturas (Unicef 2009). Por esta razão, o crescimento económico rápido, generalizado e sustentável, bem como a erradicação da pobreza absoluta e da miséria no país podem ser alcançados induzindo a produção e a produtividade tanto dos pequenos como dos grandes produtores (Muendane 2009).

Os reguladores de crescimento de plantas derivados de naftaleno constituem um grupo de agentes químicos de protecção e promoção de crescimento de plantas. Por isso, o seu uso adequado, especialmente em plantas comestíveis, contribui consideravelmente na garantia de maiores e melhores rendimentos destas culturas – e, portanto, maior oferta de alimentos – mesmo em condições ambientais adversas. Ora, os PGRs derivados de naftaleno possuem também a habilidade de promoverem o crescimento de várias outras espécies de plantas que além de libertam o oxigénio – o

elemento chave para a vida do Homem – fornecem-lho medicamentos, abrigo, vestuário e produtos essenciais para o fornecimento de energia.

Desta forma, os PGRs derivados de naftaleno vêm sendo considerados uma das melhores estratégias para o melhoramento da agricultura, medicina, horticultura, entre outras áreas de extrema importância para o desenvolvimento da economia mundial; e, portanto, uma das melhores alternativas de auxílio para a erradicação da pobreza absoluta em Moçambique.

Todavia, as vantagens oferecidas por estes compostos são parcialmente ou totalmente inexploradas em Moçambique, provavelmente pela sua escassez no mercado nacional; devido as dificuldades de aquisição. Portanto, obter os PGRs em laboratórios nacionais é uma tarefa fascinante pois responder-se-á desta forma a demanda destes agroquímicos por parte dos agrónomos, engenheiros florestais e técnicos agrários nacionais e internacionais – contribuindo, entretanto, directa ou indirectamente, para o desenvolvimento económico do nosso país.

1.3. OBJECTIVOS DO TRABALHO

1.3.1. Geral

→ Estudar a preparação dos reguladores de crescimento de plantas, agroquímicos de grande importância para o desenvolvimento de sector agrário mundial e moçambicano em particular.

1.3.2. Específicos

→ Realizar uma pesquisa bibliográfica sobre os reguladores de crescimento de plantas e dos principais critérios da sua classificação;

→ Adaptar e elaborar técnicas de síntese dos ácidos α -naftilacético e β -naftoxiacético bem como dos seus derivados;

→ Submeter as substâncias assim sintetizadas ao Laboratório de Fisiologia Vegetal do Departamento de Biologia e, posteriormente, à Faculdade de Agronomia e Engenharia Florestal da Universidade em apressa para a testagem das suas actividades biológicas em plantas.

1.4. METODOLOGIA APLICADA

1.4.1. Pesquisa bibliográfica

A pesquisa bibliográfica consistiu da recolha de informação relacionada com os principais reguladores de crescimento de plantas disponíveis no mercado mundial, e os derivados de naftaleno em particular. Consistiu ainda da recolha de informação concernente as actividades fisiológicas, mecanismo de acção, propriedades físico-químicas, métodos e técnicas de síntese, purificação e caracterização estrutural dos reguladores de crescimento de plantas derivados de naftaleno.

1.4.2. Recolha de dados

Consistiu numa carta dirigida ao Instituto de Investigação Agrária de Moçambique (IIAM) que visava obter informações relacionadas com os reguladores de crescimento de plantas em uso no País.

1.4.3. Parte experimental

Consistiu da síntese dos reguladores de crescimento de plantas derivados de naftaleno, sua purificação bem como a determinação do seu grau de pureza. Consistiu ainda da confirmação das suas estruturas através de métodos espectroscópicos e da análise e discussão dos resultados assim obtidos.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. REGULADORES DE CRESCIMENTO DE PLANTAS

Após a descoberta das fitohormonas e das impressionantes actividades por elas desencadeadas em plantas, os cientistas desenvolveram técnicas de síntese e/ou de extracção de agentes químicos que induzem respostas fisiológicas similares. Tais compostos são denominados *reguladores de crescimento de plantas (PGRs)* e, do ponto de vista académico, são compostos químicos – de origem tanto natural (extractos de fontes naturais quaisquer) como sintética (sintetizados em laboratórios) – necessários para a planta em pequeníssimas quantidades para promover, inibir ou modificar de alguma forma os processos fisiológicos da planta (Devlin 1976, Basra 2000 e Pessarakli 2001).

Do ponto de vista agrícola, os PGRs são agentes químicos que controlam e/ou melhoram os processos de crescimento natural das plantas (desde a germinação até a maturação e a conservação pós-colheita dos frutos) ou impedem o seu crescimento temporário; sem afectar consideravelmente a saúde e bem-estar, tanto das plantas e dos humanos, na dose aplicada (Lessenger 2006). São frequentemente aplicados em culturas de plantas comestíveis e ornamentais para melhorar o seu rendimento e qualidade.

Com base nas características químicas e/ou nos efeitos que exercem nas plantas, os reguladores de crescimento de plantas e/ou fitohormonas são classicamente agrupados em cinco principais categorias, a saber: as giberelinas, citocininas, auxinas, etileno e o ácido abscísico (Alt et al. 1976, Basra 2000, Pessarakli 2001 e Lessenger 2006). Actualmente inclui-se no grupo de PGRs e/ou fitohormonas o ácido salicílico, os jasmonatos, brassinosteróides, as oligossacarinas e outros que não fazem parte dos grupos supracitados. É de notar que quase todos os PGRs derivados de naftaleno pertencem à classe da auxinas.

2.1.1. Auxinas

2.1.1.1. Descoberta

As auxinas² foram detectadas pela primeira vez no reino vegetal em 1881 por Charles Darwin e seu filho Francis Darwin quando estudavam os fenómenos de crescimento vegetal envolvendo os

² A palavra *auxina* deriva do grego «*auxein*» que significa «*crescer*»

tropismos (Taiz e Zeiger 2006, Da Silva e Sasson 2007). Estes demonstraram que se qualquer ponta de coleóptilo for submetida a iluminação unilateral dobra-se em direção à luz. Por outro lado, se a ponta do coleóptilo for coberta por um pedaço de papel opaco a planta deixa de curvar. Actualmente acredita-se que estes efeitos são devido ao alongamento celular diferencial resultante da redistribuição das auxinas devido à luz (Devlin 1976, Ferri 1985, Da Silva e Sasson 2007).

O ácido indol-3-acético (AIA ou IAA em inglês) foi a primeira e é a principal auxina de ocorrência natural isolada e descrita em 1934 por Kögl (Atwell *et al.* 1999). É por essa razão que o termo auxina é genericamente aplicado para designar substâncias orgânicas naturais ou sintéticas com actividades biológicas similares às do ácido indol-3-acético em plantas, incluindo a capacidade de promover o alongamento e a divisão celular (Taiz e Zeiger 2006).

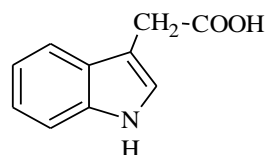


Fig. 1. Estrutura do ácido indol-3-acético

2.1.1.2. Estrutura e propriedades físicas gerais das auxinas (George *et al.* 2008)

→ São ácidos monocarboxílicos (ou derivados) de baixo peso molecular contendo, nas suas estruturas, um anel aromático (Ar) a uma distância de cerca de 5.5 nm do grupo carboxílico;

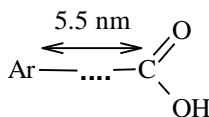


Fig. 2. Representação esquemática da distância de separação entre os grupos carboxílicos e o anel aromático nas auxinas

→ São sólidos cristalinos ligeiramente solúveis em água (graças às ligações de hidrogénio que o grupo carboxílico pode estabelecer com as moléculas de água), mas altamente solúveis em solventes orgânicos (etanol, metanol, acetona, éter dietílico e dietil sulfóxido).

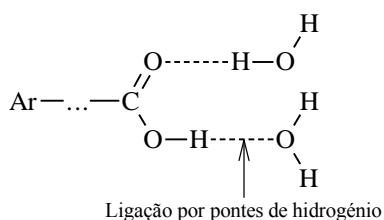


Fig.3. Representação esquemática das ligações pontes de hidrogênio estabelecidas entre as moléculas de água e os grupos carboxílicos dos PGRs derivados de naftaleno

→ Ácido indol-3-acético é menos estável que o ácido 1-naftilacético e é especialmente sensível a luz (principalmente UV) e a oxidantes.

2.1.1.3. Principais actividades fisiológicas das auxinas

As auxinas estão envolvidas em curvaturas trópicas (fototropismo e gravitropismo), enraizamento de estacas, dominância apical, acção herbicida, alongamento celular, na prevenção da abscisão prematura dos frutos, folhas e flores e no amadurecimento e partenocarpia dos frutos (Vieira et al. 2010).

2.1.1.4. Mecanismo de acção das auxinas

O mecanismo pelo qual as auxinas desencadeiam as diversas respostas fisiológicas não está ainda devidamente esclarecido. Não obstante, alguns estudos mostram que a etapa inicial de acção de qualquer fitohormona consiste da sua interacção com moléculas específicas de natureza proteica presentes nas membranas plasmáticas das células vegetais, capazes de detectar os sinais hormonais, denominadas *receptores*. Para o caso das auxinas, existe uma vasta gama de receptores, dos quais o ZmABP1 (**Zea mays Auxin-Binding Protein 1**), existente em células dos tecidos da planta de milho, é o de maior destaque (George et al. 2008).

Uma das principais actividades biológicas das auxinas é a estimulação do alongamento das células dos tecidos em desenvolvimento. São várias hipóteses propostas para explicar o mecanismo pelo qual as auxinas causam esta resposta. Contudo, a mais aceite é a hipótese do *crescimento ácido*, segundo a qual uma vez ligadas aos seus respectivos receptores, as auxinas causam a abertura dos canais de iões cálcio (Ca^{2+}) na membrana plasmática da célula. Os iões cálcio assim libertados, activam as proteínas quinase (mais conhecidas por *expansinas* que possuem a habilidade induzir a

extensão das paredes celulares vegetais) que, por sua vez, activam as ATPases presentes na membrana. Estas enzimas (as ATPases) promovem a secreção dos iões hidrogénio (H^+) para parede celular, provocando a queda de pH da membrana, de 6.5-7 até cerca de 3.5-4.5. Este pH é óptimo para a actividade da enzima *endo-trans*-glicosilase (que são inactivas a pH alto), responsável pela quebra e reorganização das ligações de hidrogénio e algumas ligações iónicas entre os polímeros da parede celular. Como resultado, a parede celular torna-se mais suave e permite maior influxo da água e, conseqüentemente, o alongamento celular (Atwell *et al.* 1999, George *et al.* 2008 e Vieira *et al.* 2010).

2.2. MÉTODOS DE SÍNTESE DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO

2.2.1. Ácido α -naftilacético

O ácido α -naftilacético (III) é um ácido carboxílico e, portanto, os principais métodos da sua síntese são os comuns para a preparação dos ácidos carboxílicos. Tais métodos são:

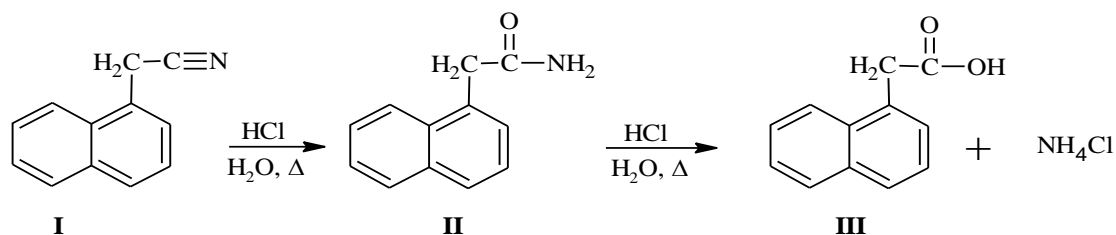
2.2.1.1. Hidrólise dos nitrilos

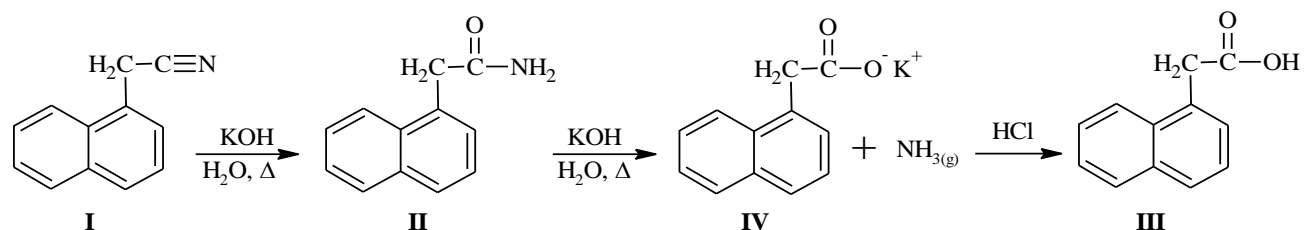
Designam-se nitrilos àqueles compostos orgânicos que contêm nas suas estruturas o grupo ciano ($-C\equiv N$) unido a uma cadeia hidrocarbónica (R) (Sarker *et al.* 2007).



Quando aquecidos e agitados com soluções aquosas de ácido ou base fortes, os nitrilos hidrolisam-se a amidas primárias estáveis e, posteriormente, a ácidos carboxílicos. Se a reacção for realizada em condições suaves, forma-se apenas a amida (Wade 2003 e Sarker *et al.* 2007).

Hidrólise ácida



Hidrólise alcalina

A hidrólise de α -naftilacetoneitrilo é usualmente feita refluxando-o com excesso ácido hidroclórico concentrado a temperaturas de 60-70°C com agitação durante 10 horas (ou até a formação da solução), pelas seguintes razões (Wenner *et al.* 1949):

- A hidrólise alcalina não é satisfatória;
- O ácido hidroclórico diluído não reage;
- O ácido sulfúrico concentrado não é conveniente pelo facto de poderem ocorrer reacções violentas;
- O ácido sulfúrico diluído não dissolve o 1-naftilacetoneitrilo, havendo a necessidade de adicionar-se o ácido acético (solubilizante) e aquecer a mistura a temperaturas acima de 100 °C por um longo período de tempo para ocorrer a hidrólise. Estas condições influem negativamente na pureza do produto desejado e, além disso, este procedimento necessita de etapas adicionais para a recuperação do ácido acético.

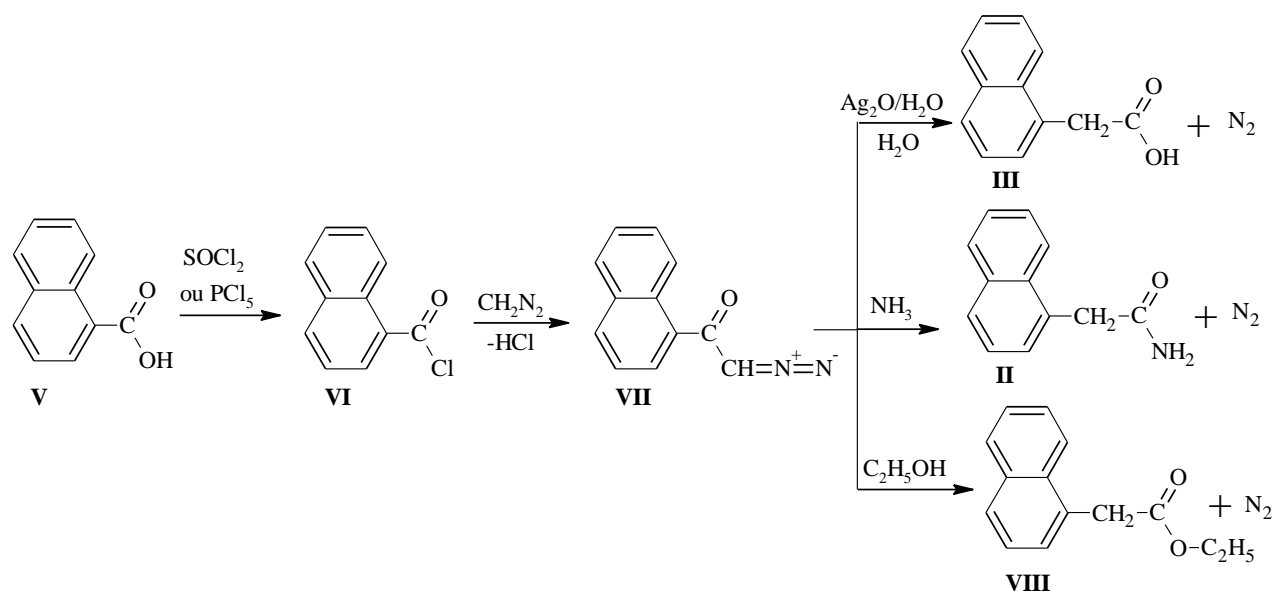
Tanto os cianetos como os nitrilos são reagentes de elevada toxicidade e, portanto, esta constitui a principal limitação da aplicação deste método para a obtenção do ácido α -naftilacético.

2.2.1.2. Síntese de Arndt-Eistert

A síntese de Arndt-Eistert é um procedimento que permite o alongamento de cadeia dos ácidos carboxílicos por um grupo metileno. Este procedimento permite a conversão de um ácido carboxílico em seu ácido homólogo (ou em derivados do ácido homólogo, tais como ésteres e amidas) com um átomo de carbono a mais utilizando diazometano como reagente (Bachmann e Struve 2004, Laue e Plagens 2005).

A síntese, a qual é aplicável tanto em ácidos aromáticos como alifáticos, envolve três principais operações, a saber: a formação do cloreto de ácido; reacção do cloreto de ácido com diazometano

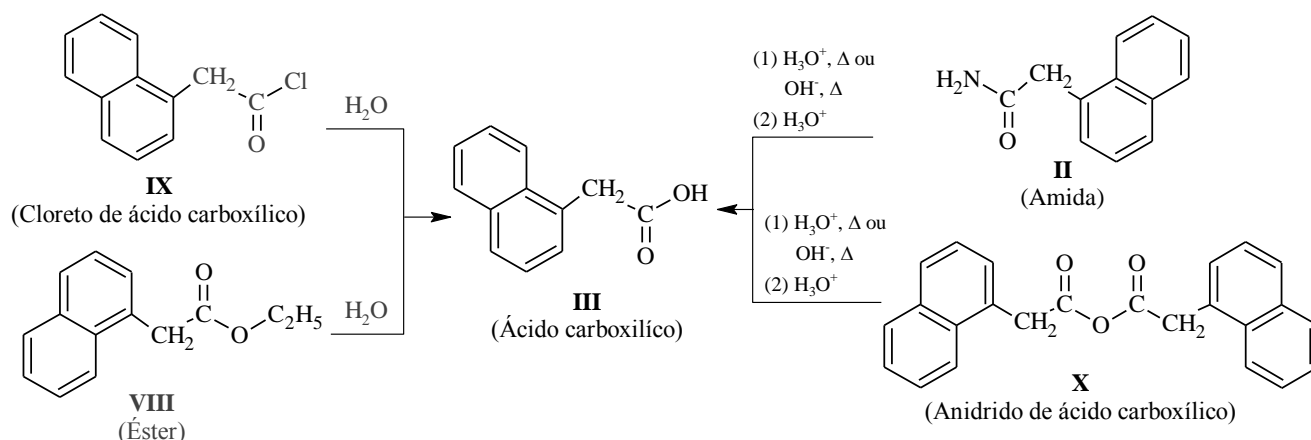
formando a diazocetona; e o rearranjo da diazocetona na presença de reagentes suaves e um catalisador (tal como prata coloidal, platina ou cobre). O ácido é formado na presença de água, o éster é produzido na presença de álcool enquanto a amida resulta do uso de amônia ou amina (Bachmann e Struve 2004).



Este é um procedimento largamente utilizado em diversas sínteses orgânicas, porém com muitas limitações que resultam principalmente da toxicidade, instabilidade e carácter explosivo do diazometano (Katritzky *et al.* 2000, Cesar e Dolenc 2001).

2.2.1.3. Hidrólise dos ésteres, amidas primárias, cloretos de ácidos e anidridos de ácidos carboxílicos

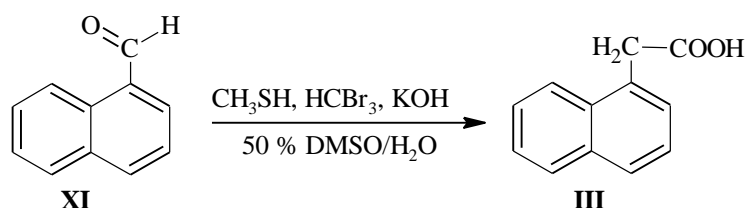
Tanto os ésteres (RCOOR'), amidas primárias (RCONH_2), cloretos de ácidos carboxílicos (RCOCl), quanto os anidridos de ácidos carboxílicos ($\text{RCOOCOR}'$), quando submetidos à hidrólise convertem-se a ácidos carboxílicos correspondentes (Sarker e Nahar 2007 e Wade 2003).



Estes métodos são relativamente simples e fáceis de executá-los. Contudo, os custos de aquisição dos reagentes de partida (os compostos IX, VIII, II e X) são iguais ou superiores aos da aquisição do produto desejado (o ácido α -naftilacético), esta que constitui a maior limitação destes métodos.

2.2.1.4. A partir do naftaldeído

O ácido α -naftilacético pode ser preparado pela reacção do naftaldeído com a combinação do tribromometano e metanotiol, na presença de uma hidróxido de potássio dissolvido em mistura de água e dimetilsulfóxido (DMSO) (Kondo *et al.* 1981).

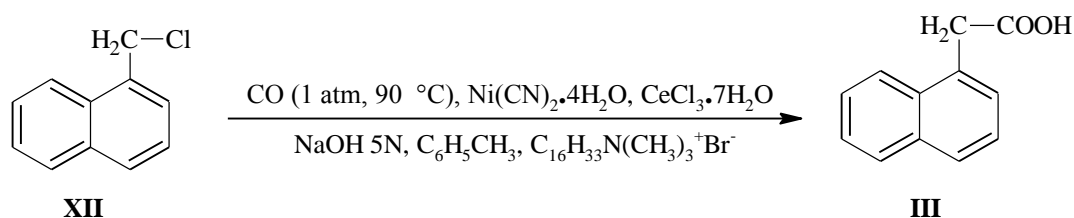


2.2.1.5. Carbonilação de 1-(clorometil)naftaleno sob condições de transferência de fase

A catálise de transferência de fase (CTF) é um método de aumento da velocidade de reacções entre espécies químicas situadas em fases distintas de uma mistura de líquidos imiscíveis ou sólido e líquido que são inibidas devido à inabilidade dos reagentes de entrarem em contacto (Allinger *et al.* 1971, Solomons e Fryhle 2005). Este objectivo é alcançado adicionando um sal de amónio quaternário com um ou mais grupos alquila de cadeia larga ($\text{R}_4\text{N}^+\text{X}^-$) – catalisador de transferência de fase – que, graças as suas propriedades anfifílicas, transfere um dos reagentes, através da interface, de

uma fase para outra, permitindo assim que a reacção se inicie (Allinger *et al* 1971, Costa 2005 e Solomons e Fryhle 2005).

Pela exposição de 1-(clorometil)naftaleno ao monóxido de carbono em hidróxido de sódio 5 N e tolueno, na presença de quantidades catalíticas de brometo de hexadeciltrimetilamónio, cloreto de cério (III) e cloreto de níquel hidratado, a 90 °C e 1 atm, por sete horas, resulta em cerca de 70 % de ácido α -naftilacético (Amer e Alper 1989).



A principal limitação deste método é o uso do monóxido de carbono, um reagente gasoso muito tóxico.

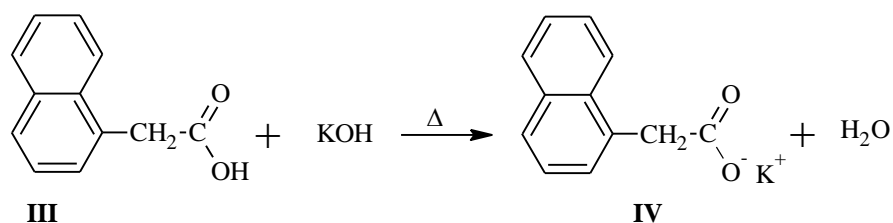
2.3. PROPRIEDADES QUÍMICAS DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO

2.3.1. Ácido α -naftilacético

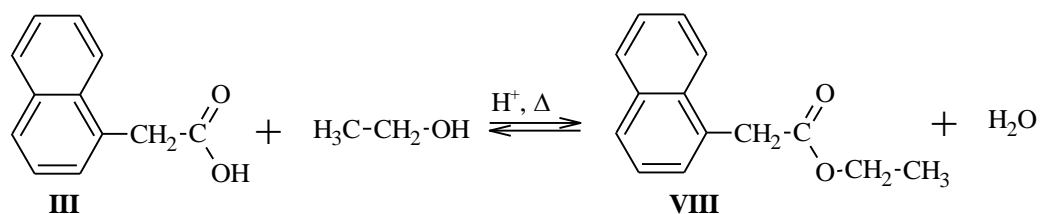
Sendo um ácido carboxílico, o ácido α -naftilacético possui propriedades químicas gerais dos ácidos carboxílicos, incluindo (McMurry 2008 e Wade 2003):

2.3.1.1. Desprotonação

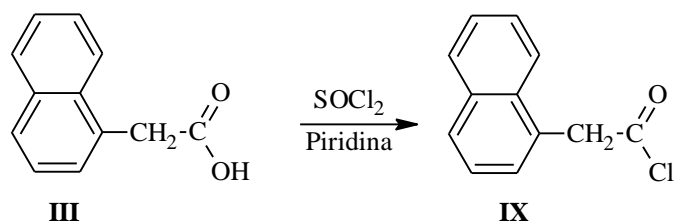
Quando tratado com bases orgânicas ou inorgânicas fortes, o ácido α -naftilacético sofre desprotonação formando os respectivos sais solúveis em água.



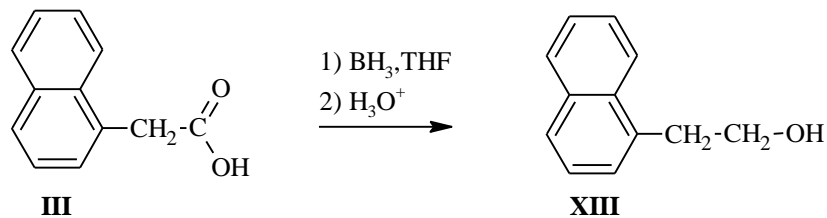
2.3.1.2. Esterificação ou reacção com álcoois



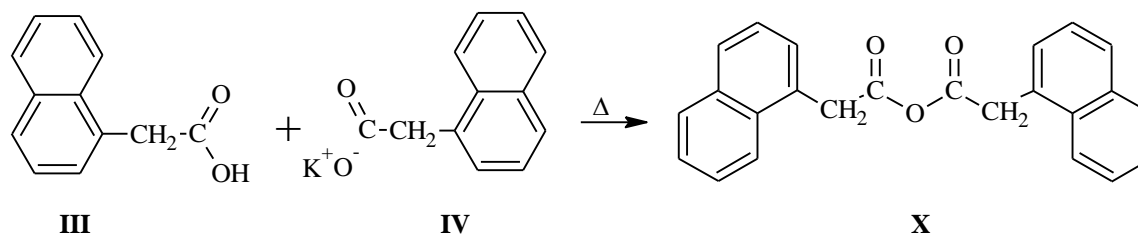
2.3.1.3. Formação de cloreto de acilo



2.3.1.4. Redução



2.3.1.5. Formação de anidridos de ácidos carboxílicos

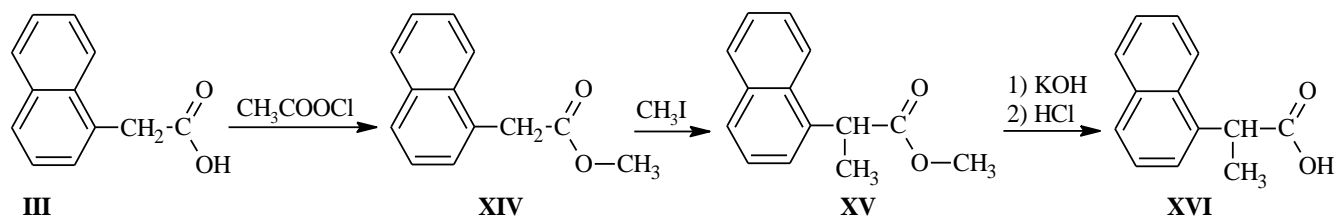


Para além das reacções do grupo carboxilo, o ácido α -naftilacético pode sofrer outro tipo de reacções, tais como:

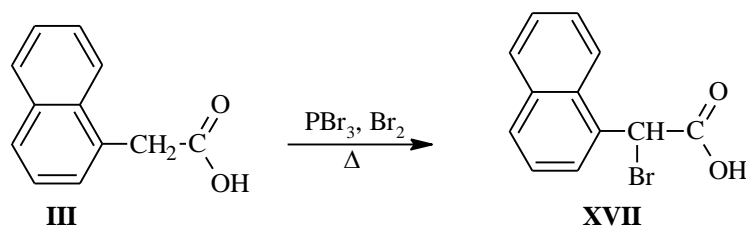
2.3.1.6. Reacção de substituição α

a) Alquilação (Godfroid *et al.* 1980)

O ácido α -naftilacético reage, após a protecção da carboxila, com haletos de alquila (geralmente iodeto) para formar o ácido carboxílico de cadeia mais longa, após a hidrólise.

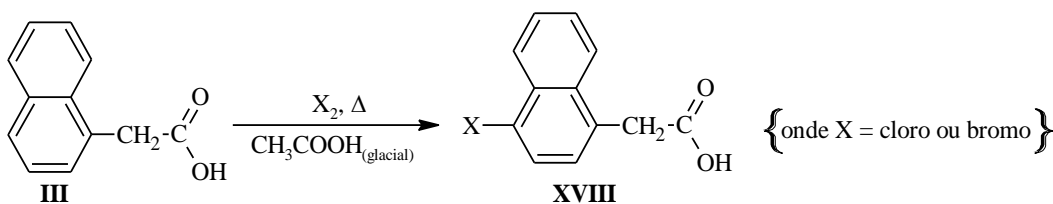


b) Halogenação ou reacção de Hell-Volhard-Zelinskii (Laue e Plagens 2005)

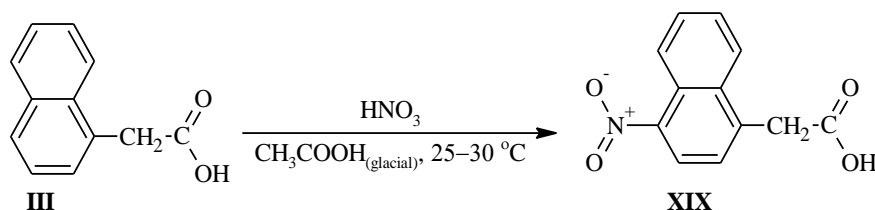


2.3.1.7. Substituições no anel aromático (Ogata *et al.* 1951)

a) Halogenação



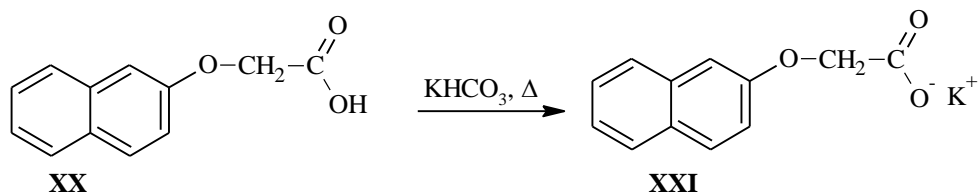
b) Nitração



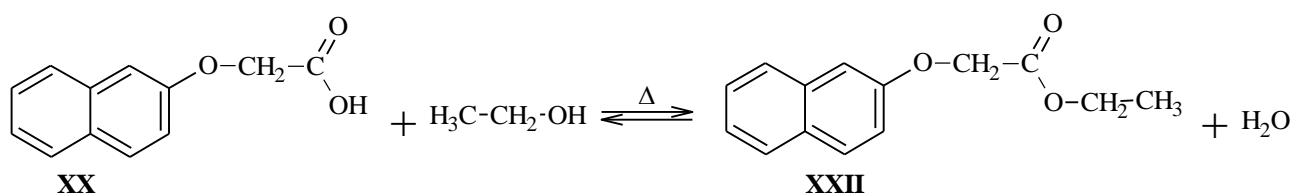
2.3.2. Ácido 2-naftoxiacético

O ácido 2-naftoxiacético possui propriedades químicas gerais dos ácidos carboxílicos e similares às do ácido α -naftilacético, incluindo:

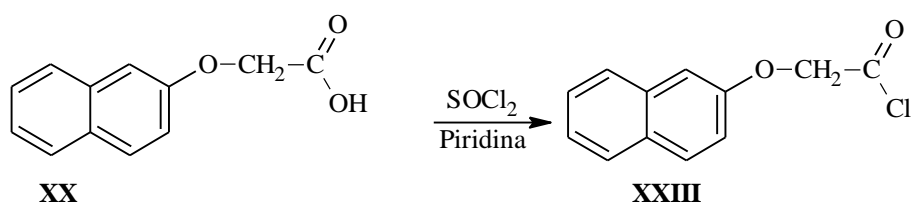
2.3.2.1. Formação de sais



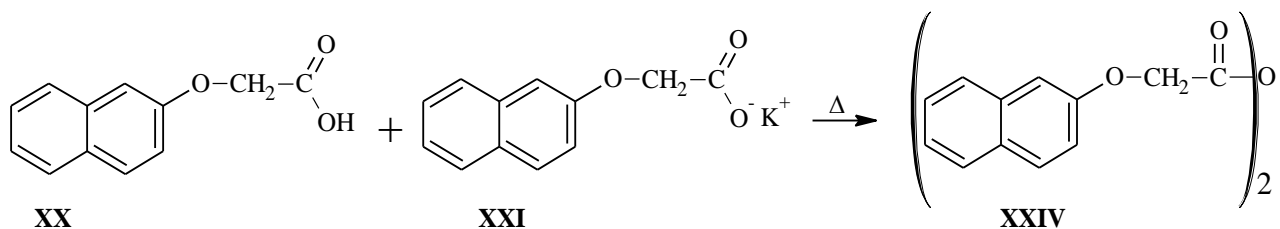
2.3.2.2. Esterificação ou reacção com álcoois



2.3.2.3. Formação de cloreto de acilo

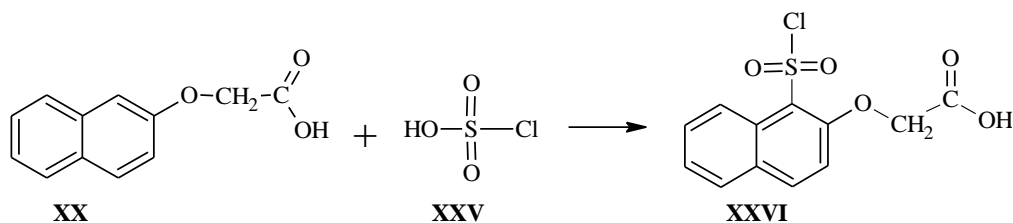


2.3.2.4. Formação de anidridos de ácidos carboxílicos

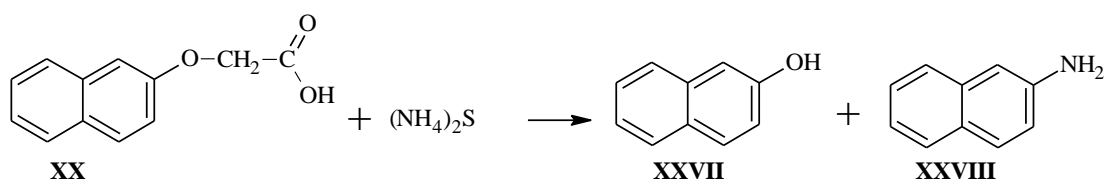


Além de possuir o grupo carboxilo em sua estrutura, o ácido 2-naftoxiacético possui um grupo éter que possui também suas reacções características, tais como:

2.3.2.5. Clorossulfonação



2.3.2.6. Reacção com sulfureto de amónio



2.4. MÉTODOS DE PURIFICAÇÃO E DETERMINAÇÃO DO GRAU DE PUREZA DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO

2.4.1. Recristalização

A recristalização é um método clássico de separação e purificação de substâncias sólidas cujo funcionamento baseia-se no facto de muitos compostos orgânicos sólidos a temperatura ambiente serem bem solúveis em solvente quente do que em solvente frio (Ahluwalia *et al.* 2005, Mittal 2007, Seager e Slabaugh 2010).

O processo de recristalização consiste principalmente das seguintes etapas (Ahluwalia *et al.* 2005, Mittal 2007, Seager e Slabaugh 2010):

- Preparação da solução saturada do composto impuro em um solvente específico próximo ou em ebulição;
- Filtração a quente para remover as impurezas insolúveis;
- Recristalização do sólido puro por arrefecimento da solução temperatura ambiente ou menos;
- Eliminação das impurezas por filtração a vácuo e secagem do sólido puro.

O isolamento do sólido puro é conseguido apenas se as impurezas permanecerem dissolvidas aquando da recristalização do analito e/ou se forem insolúveis no solvente quente (Ahluwalia *et al.* 2005, Mittal 2007, Seager e Slabaugh 2010).

O solvente ideal para a recristalização pode ser um composto puro ou mistura de solventes, a qual deve cumprir com as seguintes condições básicas (Ahluwalia *et al.* 2005, Mittal 2007, Seager e Slabaugh 2010):

- Não reagir quimicamente com o analito;
- Possuir uma alta solvência do analito a altas temperaturas e baixa solvência quando frio. Por outro lado, as impurezas devem ser insolúveis ao solvente a qualquer temperatura ou bem solúveis ao solvente a frio;
- Ser volátil e possuir uma temperatura de ebulição inferior à temperatura de fusão do analito.

2.4.2. Cromatografia

A **cromatografia** é um conjunto de técnicas físico-químicas de separação e identificação dos componentes de uma mistura, líquida ou gasosa, baseada na diferença de velocidades de arrastamento dos solutos por uma fase móvel líquida, gasosa ou um fluido supercrítico através de uma fase estacionária fixa (sólida ou líquida) em uma coluna ou numa superfície sólida (Skoog *et al.* 2006). Nestas técnicas, as moléculas fortemente retidas pela fase estacionária movem-se lentamente enquanto as fracamente retidas movem-se com mais rapidez com o fluxo da fase móvel. Devido a esta distinta mobilidade, os componentes da mistura vão se separando em bandas ou zonas discretas que podem ser analisadas quali e quantitativamente.

Existem várias técnicas cromatográficas que resultam principalmente do tipo de fases móvel e estacionária, dos equilíbrios envolvidos na transferência dos solutos entre as fases e do modo como estas são postas em contacto. Contudo, a mais aplicada é a cromatografia em camada fina por ser de fácil execução e barata.

2.4.3. Cromatografia em camada fina (CCF ou TLC em inglês)

A CCF baseia-se na adsorção dos analitos na fase estacionária quando são arrastados pela fase móvel, a qual consiste de um solvente ou mistura de solventes voláteis no estado líquido. A fase estacionária em CCF é uma camada fina de adsorvente sólido finamente dividido (geralmente

alumina, Al_2O_3 , ou sílica gel – $\text{SiO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$) impregnado na superfície de um material rígido e inerte (por exemplo, folha de alumínio, plástico ou placa de vidro). É uma técnica versátil, reprodutível, de fácil execução e permite a separação em um breve espaço de tempo (Vogel 1989, Skoog *et al.* 2006).

Uma CCF inclui as seguintes etapas principais:

a) Aplicação da amostra

Um pequeno volume da amostra é dissolvido em um solvente volátil (formando solução de 0,1 a 1.0%) e, posteriormente, a solução é aplicada, como uma mancha de 1-2 mm de diâmetro, a 1 cm da extremidade inferior da placa cromatográfica (Vogel 1989, Sequeira *et al.* 2003 e Skoog *et al.* 2006).

b) Desenvolvimento da placa

A extremidade da placa cromatográfica com a mancha da amostra é colocada em uma cuba saturada com o eluente, tomando cuidado do contacto directo da amostra com a fase móvel. A fase móvel percorre a fase estacionária, geralmente por capilaridade, arrastando consigo os analitos em diferentes graus; de acordo com (1) a sua solubilidade na fase móvel, (2) a interacção com a matriz e (3) com o grau de adsorção na fase estacionária. Quando o solvente estiver próximo da extremidade superior da placa, esta é removida e marca-se a distância por ele percorrido (Vogel 1989, Sequeira *et al.* 2003 e Skoog *et al.* 2006).

c) Localização das manchas

A localização dos analitos na placa cromatográfica pode ser feita a olho nu, se o(s) analito(s) for(em) colorido(s), ou através de luz ultravioleta ($\lambda = 254 \text{ nm}$) ou por aspensão com agentes químicos, tais como vapores de iodo e ácido sulfúrico (após o aquecimento da placa), que reagem com muitos compostos orgânicos formando produtos de cor amarela-escura (Vogel 1989, Sequeira *et al.* 2003 e Skoog *et al.* 2006). Caso se obtenha apenas uma mancha na placa cromatográfica, significa que o composto em solução é puro, excepto situações de terem havido inconvenientes.

d) Identificação dos analitos

O método comum para a identificação dos compostos por este método consiste em comparar os valores dos índices de retenção (R_f) obtidos durante a experiência com os índices de retenção de referência autenticados, obtidos nas condições similares de análise. Tais valores variam de 0 a 1 e são obtidos através da seguinte razão (Vogel 1989, Sequeira *et al.* 2003 e Skoog *et al.* 2006):

$$R_f = \frac{\text{distância percorrida pela mancha}}{\text{distância percorrida pelo solvente}}; \text{ onde: } R_f = \text{índice de retenção}$$

2.4.4. Ponto de fusão (p. f.)

O **ponto de fusão** é definido como sendo a mínima temperatura na qual os estados sólido e o líquido encontram-se em equilíbrio sob a pressão de uma atmosfera (Ahluwalia *et al.* 2005). O ponto de fusão de um sólido cristalino é a temperatura na qual este muda de estado sólido a líquido.

A **faixa de fusão** é o intervalo das temperaturas no qual o sólido desaba-se, funde-se e transforma-se completamente em líquido. A faixa de fusão aceitável para um composto orgânico puro é de 0-3 °C. Quanto mais pequena for a faixa de fusão, mais puro é o composto.

Cada composto orgânico puro possui um ponto de fusão ou uma faixa de fusão específica e constante e, por isso, são utilizados para a identificação das substâncias orgânicas (Ahluwalia *et al.* 2005). São também utilizados (o ponto de fusão e a faixa de fusão) como critérios importantes de pureza de um composto orgânico, visto que a presença de impurezas condiciona a diminuição da temperatura de fusão e o aumento a faixa de fusão (Ahluwalia *et al.* 2005).

O método geral para a determinação do ponto de fusão consiste em colocar uma pequena quantidade (aproximadamente 1 mg) do sólido seco previamente pulverizado em um tubo capilar e aquecê-lo lentamente em um aparelho de ponto de fusão (fig. 4.) equipado de um termómetro de mercúrio, o qual permite a leitura da temperatura do início da fusão e a temperatura na qual o sólido converte-se completamente em líquido.



Fig. 4. Aparelho para a determinação do ponto de fusão equipado de um termómetro de mercúrio

2.5. MÉTODOS DE CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DOS PGRs DERIVADOS DE NAFTALENO

Muitas das vezes, a caracterização estrutural dos compostos orgânicos no geral, e dos PGRs derivados de naftaleno em particular, é feita através de métodos espectroscópicos; desde que se disponha de quantidades suficientes da amostra para a análise. Os métodos aplicados para a confirmação das estruturas dos PGRs derivados de naftaleno sintetizados neste trabalho são:

2.5.1. Espectroscopia de infravermelho (IV ou IR em inglês)

A espectroscopia de infravermelho é uma ferramenta muito importante para detectar a presença ou ausência de grupos funcionais numa molécula por absorção da radiação infravermelha do espectro electromagnético. A região infravermelha do espectro electromagnético abrange o comprimento de 0.8 a 100 micrómetros (μm). Contudo, para estudos estruturais em química orgânica a região de interesse é de 2.5 a 25 μm (de 4 000 a 400 cm^{-1} quando expressa em número de onda ($\bar{\nu}$)) e a energia correspondente é de 11.5 a 4.8 kcal/mol (ou 48.0 a 4.8 kJ/mol) (Wade 2003 e McMurry 2008).

Todos os compostos orgânicos possuem uma certa quantidade de energia distribuída por toda a sua estrutura que é responsável pelos constantes movimentos vibracionais na molécula (tais como o estiramento e contracções das ligações) (Carey 2000 e McMurry 2008). Cada ligação vibra a uma frequência que é característica do tipo de átomos unidos e do tipo de ligação (simples, dupla ou tripla) que une tais átomos. Por esta razão, se uma molécula for irradiada pela energia infravermelha, cada ligação absorverá a radiação de frequência correspondente à frequência da sua vibração, aumentando assim a amplitude de vibração (Carey 2000 e Gokel 2004). Um espectrofotómetro de infravermelho regista a quantidade da luz assim absorvida na forma de um espectro de IV (isto é, um gráfico de absorvância (A) ou percentagem de transmitância (%T) versus número de onda – $\bar{\nu}$ - em cm^{-1}) que indica a presença e a natureza dos diversos grupos funcionais presentes no composto em estudo (Carey 2000, Bruice 2004, Gokel 2004, Moore e Langley 2010). Estes factos constituem a base da análise qualitativa em IV.

É importante notar que nem todas as vibrações resultam na absorção de energia infravermelha. Para que uma vibração ocorra com a absorção da radiação infravermelha, a vibração em questão deve implicar em variação o momento de dipolo da molécula (Solomons e Fryhle 2005).

Uma vez que os PGRs derivados de naftaleno são sólidos, na sua maioria, a técnica mais comum para o manuseio das suas amostras é o pastilhamento com brometo de potássio. Nesta técnica, cerca de 1 mg de amostra é misturada com cerca de 100 mg de brometo de potássio e prensada para formar um disco transparente, o qual é colocado no aparelho de infravermelho (Skoog et al. 2006).

A região de número de onda que se estende de 1400 a 400 cm^{-1} , denominada *impressão digital*, é constituída de muitos picos sobrepostos e de difícil interpretação. Nesta região, os picos diferem bastante de composto para composto; podendo, portanto, ser aplicada para distinguir moléculas estruturalmente idênticas (Carey 2000 e Moore e Langley 2010).

2.5.2. Espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN ou NMR em inglês)

Os átomos contendo números ímpares de prótons e/ou de neutrões, tais como o hidrogénio comum (^1H) e o carbono 13 (^{13}C), comportam-se como se fossem ímãs girando em torno de um eixo (Solomons e Fryhle 2005). Sob acção de um campo magnético externo forte (cerca de 1.4T a 7 T), estes núcleos orientam-se paralela (estado de energia mais baixo) ou antiparalelamente (estado de energia mais alto) ao campo magnético aplicado e começam a precessar (Solomons e Fryhle 2005). Aplicando uma radiação electromagnética de frequência de rádio (ou radiofrequência - RF) (60-700 MHz), os núcleos atômicos de hidrogénio (^1H) e carbono 13 (^{13}C) podem absorver a energia de frequência igual à do movimento de precessão passando do estado de energia mais baixa para o estado de energia mais elevada. Este processo de absorção resulta em picos observados em um espectro de RMN (Solomons e Fryhle 2005, Mcmurry 2008).

Um espectro de RMN é um gráfico de deslocamento químico (δ em partes por milhão - ppm) versus magnitude do sinal que oferece a informação sobre o número, natureza e o ambiente químico que rodeia cada próton (através da ressonância magnética nuclear do próton - RMN- ^1H) ou cada núcleo de carbono, se se tratar da ressonância magnética nuclear de carbono 13 (RMN- ^{13}C). O deslocamento químico de um núcleo, quer de ^1H como de ^{13}C , é determinado pelo ambiente electrónico que rodeia esse núcleo e quanto maior for o seu valor menor é o campo magnético aplicado (isto é, menor é a blindagem electrónica a volta do núcleo). Os deslocamentos químicos vão de 0-15 ppm na RMN- ^1H e de 0-200 ppm em RMN- ^{13}C (Moore e Langley 2010). Para definir a posição duma absorção, o espectro é geralmente calibrado com o tetrametilsilano (TMS), $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$, que, convencionalmente, tem um deslocamento químico igual a 0 ppm (Gokel 2004, Solomons e

Fryhle 2005). Nestes casos, usualmente utiliza-se o clorofórmio deuterado, CDCl_3 , ou tetracloreto de carbono, CCl_4 , como solventes (Gokel 2004).

As principais técnicas de RMN aplicadas para a determinação das estruturas dos compostos orgânicos são a ressonância magnética nuclear do próton (RMN- ^1H) e a ressonância magnética nuclear de carbono 13 (RMN- ^{13}C), uma vez que a maior parte dos compostos orgânicos têm nas suas estruturas átomos de hidrogénio e todos têm átomos de carbono (Moore e Langley 2010).

Uma vez que os átomos de hidrogénio presentes na maior parte dos compostos orgânicos são os ordinários (^1H), a técnica de RMN- ^1H é muito sensível e obtém espectros muito complexos de difícil interpretação, sobretudo em casos de moléculas contendo muitos prótons. Nestes casos, recorre-se à espectroscopia de RMN- ^{13}C que fornece espectro relativamente simples, visto que esta detecta átomos de carbono 13 cuja abundância natural é de cerca de 1.1 % (Gokel 2004, Solomons e Fryhle 2005, McMurry 2008).

3. PARTE EXPERIMENTAL

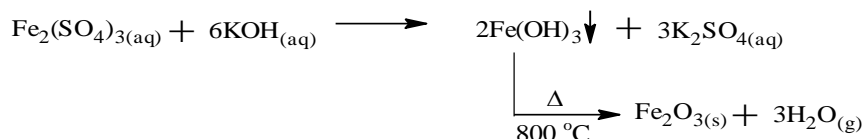
Todas as experiências foram realizadas utilizando os seguintes reagentes:

Tabela 1. Reagentes utilizados e os respectivos graus de pureza

Reagente	Grau de pureza	Solvente	Grau de pureza
Sulfato de ferro (III)	-----	Isopropanol	99.8 %
Hidróxido de potássio	> 85 %	Éter dietílico	99 %
Naftaleno	> 99 %	Amoníaco (aq)	25 %
Carbonato de potássio	89 %	Clorofórmio	99.5 %
Brometo de potássio	> 98.5 %	Éter de petróleo	-----
Ácido cloroacético	99 %	Hexano	> 98 %
Ácido clorídrico	37 %		
Ácido sulfúrico	95-98 %		
Ácido fosfórico	40 %		
2-naftol	98 %		
Magnésio	99 %		
Formaldeído	30 %		

3.1. PREPARAÇÃO DOS REAGENTES PARA AS SÍNTESES

3.1.1. Preparação do óxido de ferro (III)



Preparou-se cerca de 6 g o hidróxido férrico ($\text{Fe}(\text{OH})_3$), misturando cerca de 16 g de sulfato férrico ($\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$), dissolvido em 60 mL de água, e 12.6 g de hidróxido de potássio (KOH) também dissolvido em 40 mL de água. Formou-se um precipitado de cor castanha que foi filtrado por gravidade, lavado e seco ao ar e na estufa a 105 ± 5 °C durante 4 horas. O pó castanho resultante foi incinerado no forno mufla a 800 °C por 4 horas, arrefecido e transferido para um frasco.

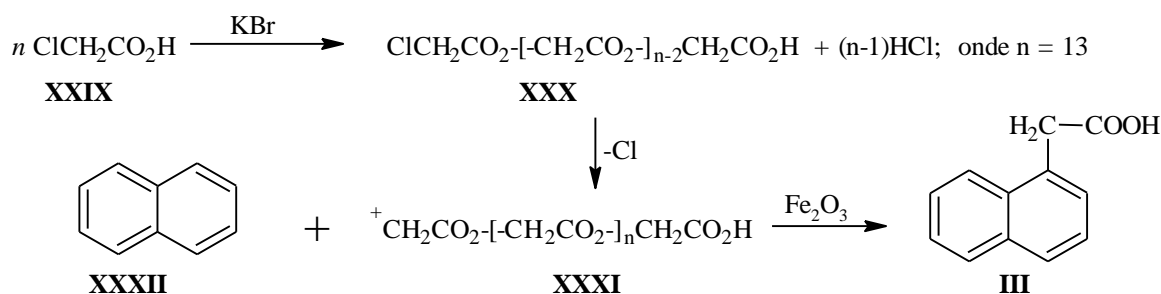
3.1.2. Determinação de peróxido em éter dietílico

Colocou-se cerca 1 mg de bicarbonato de sódio em um tubo de ensaio, adicionou-se 1 mL de ácido sulfúrico diluído, juntou-se o éter dietílico e agitou-se bem a mistura. O não aparecimento da coloração azul na camada etérica, é uma evidência clara de ausência de peróxido no éter. Para se garantir o resultado, fez-se um outro ensaio agitando a mistura da solução aquosa de iodeto de potássio (1 mL), ácido sulfúrico 15% (1 mL) e 2 mL da amostra de éter. Não apareceu a coloração de amarela na camada aquosa de iodeto de potássio, o que comprova o resultado pré-obtido.

3.1.3. Secagem do éter dietílico

Adicionou-se o cloreto de cálcio em pó à amostra de éter dietílico hidratado, e deixou-se a mistura por três dias. Como resultado, o cloreto de cálcio manteve-se na forma de pó, o que indica a ausência de água.

3.2. SÍNTESE DO ÁCIDO α -NAFTILACÉTICO PELA REACÇÃO DE NAFTALENO COM O ÁCIDO CLOROACÉTICO



A reacção de naftaleno com o ácido cloroacético é comumente catalisada por pequenas quantidades de brometo de potássio (cerca de 10% dos reagentes totais) ou cloreto de ferro (III) (0.05-0.0008%), pois se for levada a cabo sem a intervenção de catalisador o rendimento é na ordem de 3-4% (Southwich *et al.* 1954). É importante notar que vários outros haletos metálicos (tais como cloreto de sódio, iodeto de potássio e brometo férrico), haletos de hidrogénio, ácido sulfúrico, ou mesmo os catalisadores de Fiedel-Crafts como cloreto de alumínio e cloreto de zinco não promovem a formação do ácido α -naftilacético (Ogata e Ishiguro 1950 e Southwich *et al.* 1954). Porém, estes

apresentam a acção promotora, embora menos efectiva que a do brometo de potássio, quando misturados com o óxido de ferro (III) (Ogata e Ishiguro 1950).

Com o ácido bromoacético em vez de ácido cloroacético, a reacção é mais rápida mas este não é comumente utilizado por ser mais caro que o ácido cloroacético e por ser irritante à pele (Ogata e Ishiguro 1950).

A habilidade do brometo de potássio promover esta reacção quando em pequenas quantidades, não é até então completamente entendida mas acredita-se que o brometo de potássio promove a conversão rápida e completa do ácido cloroacético (XXIX) em mistura de ácidos cloroacetilpoliglicólicos (XXX) cuja decomposição resulta em carbocatiões (XXXI) que reagem com naftaleno (XXXII), em ebulição, para formar o ácido α -naftilacético ou produtos hidrolisáveis a este (Southwich *et al.* 1954).

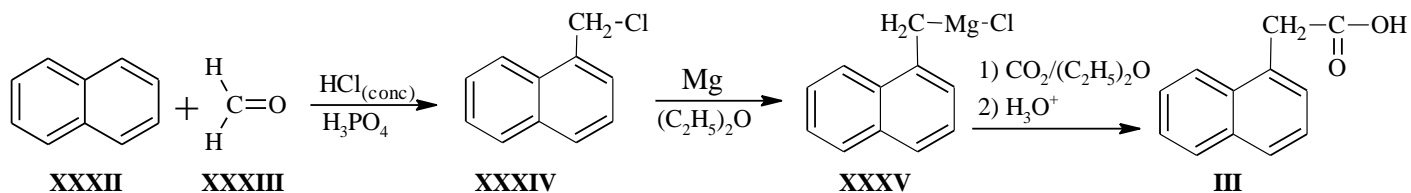
Técnica

28.8 g (0.225 mol) de naftaleno, 14.1 g (0.149 mol) de ácido cloroacético, 0.04 g (0.000275 mol) de óxido de ferro (III), e 0.21 g (0.0018 mol) de brometo de potássio foram colocados em um balão de fundo redondo equipado de um termómetro de mercúrio de 250 °C e um tubo de arrefecimento por ar de cerca de 1 m de comprimento. A mistura foi suavemente fervida em um banho de areia por 20 horas a 200 °C. Observou-se que a medida que a temperatura aumentava a mistura sólida fundia-se e resultou numa massa fundida de cor castanha quando a temperatura da mistura atingiu 170 °C, isto após duas horas de aquecimento. Nem todo o naftaleno reagiu, pois parte deste sublimava e cristalizava-se no tubo de arrefecimento.

Após 20 horas de fervura, o resíduo foi transferido para um copo de Becker de 150 mL e o ácido α -naftilacético foi extraído três vezes com a solução aquosa de hidróxido de potássio 5 % (p/v) quente, arrefecido e filtrado por gravidade. A acidificação do filtrado com ácido hidrolórico a 10^{-3} M resultou num precipitado acastanhado com cristais brancos dispersos. Recristalizou-se o precipitado em água ligeiramente acidificada com de ácido hidrolórico concentrado, dando cristais incolores (filtrado) e um resíduo castanho que, acredita-se que seja a mistura de ácidos cloroacetilpoliglicólicos resultantes da acção do brometo de potássio sobre ácido cloroacético (Southwich *et al.* 1954). Os cristais brancos foram secos ao ar e pesados. O rendimento é de cerca de 0.42 g (1.5 % baseado em

ácido cloroacético), p. f. 115-120 °C (p. f. do padrão é de 120-125 °C enquanto o descrito na literatura é de 130-133 °C).

3.3. SÍNTESE DO ÁCIDO α -NAFTILACÉTICO PELO MÉTODO DE GRIGNARD



Preparação do dióxido de carbono: $\text{CaCO}_3 (\text{pó}) + \text{HCl}_{(\text{aq})} \rightarrow \text{CaCl}_2(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} + \text{CO}_2(\text{g})$

A síntese do ácido α -naftilacético proposta por Gilman e Kirby (1929) tem como intermediários chave os reagentes de Grignard ou organomagnesianos, os quais possuem a fórmula geral **R-Mg-X**; onde: R = cadeia hidrocarbônica e X = halogênio (geralmente cloro, bromo ou iodo).

Sendo o magnésio muito menos eletronegativo que o carbono, a ligação carbono – magnésio do organomagnesiano é altamente polar e a densidade eletrônica é atraída pelo átomo de carbono, conferindo-lhe uma carga parcial negativa [$\text{R}^{\delta-} - \text{Mg}^{\delta+} - \text{X}$]. Devido a isto, os organomagnesianos possuem um carácter acentuadamente nucleófilo que os permite reagir com compostos que possuem átomos de carbono de baixa densidade eletrônica, tais como os compostos carbonilos e nitrilos. É através desta propriedade que os organomagnesianos reagem com o dióxido de carbono para formar os carboxilatos que passam a ácidos carboxílicos, após a acidificação (Allinger *et al.* 1971, Wade 2003 e Sarker *et al.* 2007).

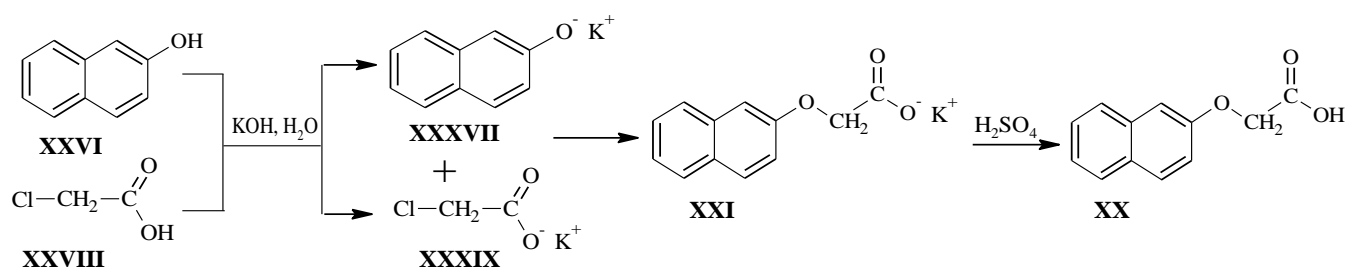
Técnica

A mistura de 16 g (0.125 mol) de naftaleno, 16 g (0.50 mol) de formaldeído, 24 mL de ácido clorídrico concentrado e 10 mL de ácido fosfórico foi aquecida a 85 °C por duas horas. Em seguida adicionou-se mais 6 mL de ácido clorídrico concentrado e continuou-se o aquecimento por mais 8 horas. O produto formado foi extraído com clorofórmio, lavado com água, com solução de carbonato de potássio e novamente com água. O solvente (clorofórmio) foi evaporado, o resíduo foi recuperado com éter de petróleo e filtrado. O filtrado resultante foi recristalizado em hexano. Obteve-se 12 g do produto.

10 g (0.057 mol) de 1-(clorometil)naftaleno em 50 mL de éter foram adicionados lentamente a 1.38g (0.057 mol) de magnésio em 85 mL de éter. A solução do cloreto de 1-naftilmetilmagnésio era de cor verde-amarelado.

Pelo tratamento do carbonato de cálcio com ácido clorídrico diluído, libertou-se o dióxido de carbono; este que foi passado através do cloreto de 1-naftilmetilmagnésio. Formou-se um precipitado branco, o qual foi filtrado, seco e recristalizado em água acidificada com ácido clorídrico. O rendimento de ácido α -naftilacético (p. f. 127 – 131 °C) é de cerca de 59.4%.

3.4. SÍNTESE DO ÁCIDO 2-NAFTOXIACÉTICO



O método usual de preparação do ácido 2-naftoxiacético é a síntese de Williamson para a preparação de éteres assimétricos (R-O-R', sendo R \neq R'). Tal método compreende a reacção do naftol com um hidróxido de alcali, em solução aquosa, formando o ião naftóxido seguida pela reacção do ião naftóxido com ácido monohaloacético (ácido cloroacético ou bromoacético) ou monohaloacetato de etilo (cloroacetato ou bromoacetato de etilo) em solução aquosa para dar o 2-naftoxiacetato, o qual é recuperado e/ou convertido a ácido correspondente pela acidificação (Bausor 1939, Haskelberg 1946).

Técnica

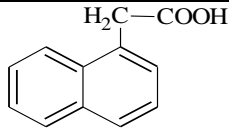
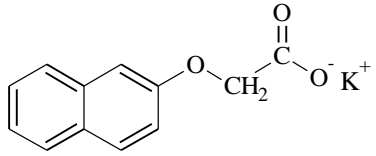
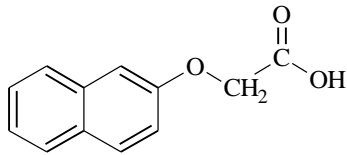
Cerca de 12.5 g (0.0867 mol) de β -naftol foram dissolvidos em 112.5 cm³ de água contendo cerca de 6 g (0.107 mol) de KOH. Em um outro frasco, cerca de 8.17 g (0.0865 mol) de ácido cloroacético foram dissolvidos em 62.5 cm³ de água contendo 6 g (0.107 mol) de hidróxido de potássio. As duas soluções foram misturadas, agitadas e refluxadas durante uma hora. Com o aquecimento, a cor da mistura, inicialmente castanha escura, tornava-se mais clara. Após o arrefecimento a temperatura ambiente, formou-se um precipitado acastanhado de β -naftoxiacetato de potássio, o qual foi filtrado e

seco na estufa a 90 °C durante 4 horas; o rendimento é de cerca de 17.3 g (98.65 %) de β -naftoxiacetato de potássio bruto. Cerca de 5.41 g do pó castanho resultante, foi recristalizada em água, filtrada e seca; obtendo-se desta forma cerca de 4.5 g do β -naftoxiacetato de potássio ligeiramente puro. 0.5 g de β -naftoxiacetato de potássio recristalizado foram adicionadas a 6.3 cm³ de álcool etílico e a mistura foi agitada. À emulsão assim formada, adicionou-se cerca de 1.3 cm³ de solução aquosa de ácido sulfúrico a 15 % e o sólido dissolveu-se. Em seguida adicionou-se 3.8 cm³ de solução de ácido sulfúrico 15%, perfazendo assim 5.1 cm³ no total. Por adição de 31.3 cm³ de água, formou-se um precipitado acastanhado, o qual foi seco e recristalizado em isopropanol. O rendimento é de cerca de 0.31 g (59.4 %) de ácido β -naftoxiacético (p. f. 145-150 °C enquanto o p. f. da literatura é de 151-154 °C).

3.5. ANÁLISE CROMATOGRÁFICA

Para se proceder com a cromatografia em camada fina para a identificação e/ou determinação da pureza dos reguladores de crescimento de plantas sintetizados neste trabalho, foram utilizadas placas de alumina (óxido de alumínio – Al₂O₃) 150 F₂₅₄ – neutral. As soluções das amostras em análise, foram preparadas dissolvendo cerca de 0.012 g de cada amostra em cerca de 1 mL de solvente ou solventes específicos (tabela 2). As placas foram reveladas em uma lâmpada ultravioleta a 230 nm. As fases móveis utilizadas em cada caso e os índices de retenção (R_f) padrão e obtidos são apresentados na tabela 2.

Tabela 2. Compostos sintetizados e os respectivos valores dos índices de retenção (R_f)

Número do composto	Fórmula estrutural	Fórmula molecular	Solvente utilizado para a preparação da solução amostra	Fase móvel	R_f padrão	R_f obtido
III		$C_{12}H_{10}O_2$	Isopropanol	Isopropanol: amoníaco: água (8:1:1)	0.58	0.60
XXI		$C_{12}H_9O_3K$	Isopropanol	Isopropanol	-----	0.77
XX		$C_{12}H_{10}O_3$	Isopropanol	Isopropanol	-----	0.88

3.6. ANÁLISE DOS ESPECTROS INFRAVERMELHO DOS COMPOSTOS SINTETIZADOS

Tabela 3. Dados do espectro IV do ácido α -naftilacético

Grupo molecular	Dados teóricos $\bar{\nu}$ (cm^{-1})	Dados experimentais $\bar{\nu}$ (cm^{-1})
C=O (ácidos carboxílicos)	1725–1690 (forte)	1684.61
O-H (ácidos carboxílicos)	3300–2500	3000
C=C (anéis aromáticos)	1600 e 1500–1430	1947.06–1771.09
C-H (alcanos)	2970–2870 (forte), 1480–1440 (médio)	2913.26, 1510.42 e 1410.42
C-H (anéis aromáticos)	3100–3010 (médio)	3058.02

3.7. ANÁLISE DO ESPECTRO DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÃO DO ÁCIDO α -NAFTILACÉTICO

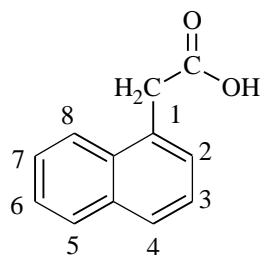


Tabela 4. Deslocamentos químicos de RMN-¹H do ácido α -naftilacético

Tipo de próton	Dados estimativos δ (ppm)	Dados experimentais δ (ppm)
Prótons aromáticos	7.00–8.18	7.26–7.98
Próton ligado ao carbono 2	7.00	7.26
Prótons ligados aos carbonos 3, 6 e 7	7.42–7.54	7.41-7.57
Próton ligado ao carbono 4	7.92	7.80–7.84
Próton ligado ao carbono 5	8.05	7.85–7.89
Próton ligado ao carbono 8	8.18	7.95-7.99
Próton do O-H carboxílico	11.00	11.13
Próton de CH ₂	4.14	4.10

4. ANÁLISE E INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

4.1. ÁCIDO α -NAFTILACÉTICO

Os resultados obtidos da análise cromatográfica, mostram que os valores dos índices de retenção do ácido α -naftilacético sintetizado e padrão são aproximados (0.58 e 0.60), o que demonstra que de facto o pó branco obtido é do composto desejado (ácido α -naftilacético). Embora tenha se obtido apenas uma mancha na placa, o ácido α -naftilacético sintetizado não atingiu o seu grau de pureza máxima pois o ponto de fusão experimental do composto sintetizado (125-130 °C) é inferior ao tabelado (130-133 °C) e ao do padrão (130-135 °C).

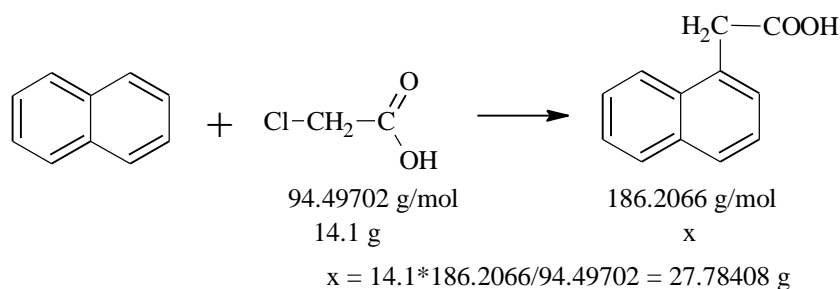
O rendimento foi calculado através da seguinte relação matemática:

$$\text{Rend.} = \frac{\text{Rend. exp.}}{\text{Rend. teor.}} \times 100\% ;$$

onde: Rend. exp.= quantidade (g) do produto obtido; Rend. teor = quantidade (g) do produto, obtida através de cálculos estequiométricos.

Exemplo do cálculo do rendimento:

Sendo o número de moles de naftaleno (0.225 mol) superior ao do ácido cloroacético (0.149 mol), o ácido cloroacético é o reagente limitante e, portanto, a sua massa será utilizada para o cálculo do rendimento.



$$\text{Rend.} = \frac{0.42}{27.78} * 100\% = 1.51 \%$$

Assim, o rendimento obtido por esta via é de cerca de 1.5 %. Este rendimento é muito inferior ao esperado (cerca de 34 %); o que pode ser reflexo do não alcance da temperatura recomendada (cerca de 218 °C) durante o aquecimento em banho de areia.

Pelo método de Grignard, o rendimento obtido é de cerca de 59.4 % do ácido naftilacético (p. f. 127-131 °C). Neste caso, o ponto de fusão é superior ao do produto da reacção do ácido cloroacético com o naftaleno (cerca de 120-125 °C) e ainda está próximo do intervalo encontrado na literatura (130-133 °C). Comparando os dois métodos, pode se dizer que este é mais vantajoso pois forma-se um produto mais puro e dá maior rendimento.

O espectro de infravermelho do ácido α -naftilacético apresenta uma absorção intensa e estreita na faixa de 1684.61 cm^{-1} que é característica de vibração da ligação C=O dos ácidos carboxílicos. Possui também bandas a $2913.26, 1510.42$ e 1410.42 cm^{-1} que são características de estiramento das ligações C-H saturadas. De 1947.06 a 1771.09 cm^{-1} , o espectro apresenta bandas características da vibração das ligações C=C aromáticas. Em 1510.42 e 1410.42 cm^{-1} existem bandas características do estiramento das ligações C-H sp^3 -s. De 2500 a 3058.02 cm^{-1} , existem bandas largas de difícil identificação que, segundo a literatura, podem ser características das vibrações das ligações C-H aromáticas (3058.02 cm^{-1}), O-H dos ácidos carboxílicos (3000 cm^{-1}), e C-H sp^3 -s (2913.26 cm^{-1}).

O espectro de ressonância magnética nuclear protónica do ácido α -naftilacético, apresenta picos no intervalo de 7.26 a 7.98 ppm que são característicos dos desvios químicos dos átomos de hidrogénio aromáticos. Apresenta ainda dois singuletos a 11.13 e 4.10 ppm que são característicos dos átomos de hidrogénio do O-H carboxílico e CH_2 , respectivamente.

4.2. **ÁCIDO 2-NAFTOXIACÉTICO E 2-NAFTOXIACETATO DE POTÁSSIO**

Embora não tenham se encontrados padrões de análise cromatográfica do ácido 2-naftoxiacético e do seu derivado, 2-naftoxiacetato de potássio, foi possível distinguir os dois pelas diferenças significativas dos seus valores de R_f e dos pontos de fusão; uma vez que o ácido 2-naftoxiacético possui R_f igual a 0.88 e o seu valor de p. f. é de 140-145 °C enquanto o do seu derivado, 2-naftoxiacetato de potássio, possui o R_f igual a 0.77 e o p.f. está acima de 250 °C. Sendo um sal, o aquecimento do 2-naftoxiacetato de potássio a altas implicaria a sua decomposição.

A mancha obtida na eluição do 2-naftoxiacetato de potássio, cujo valor de R_f é 0.77, pode não corresponder a este composto; uma vez que este é um sal de metal alcalino e, de um modo geral, estes não eluem. Este (o R_f) pode corresponder a um subproduto da reacção cuja identidade não é conhecida.

Tal como no caso do ácido α -naftilacético, o ponto de fusão do ácido 2-naftoxiacético experimental (140-145 °C) é inferior ao da literatura (150-154 °C) o que evidencia que este composto ainda não atingiu o grau máximo da sua pureza.

Não foi possível obter os dados espectroscópicos destes compostos, devido a indisponibilidade de condições para a realização destas experiências.

5. CONCLUSÃO

Os reguladores de crescimento de plantas são classificados em cinco principais grupos:

- Auxinas;
- Giberelinas;
- Citocininas;
- Etileno; e
- Ácido abscísico.

Esta classificação não é restrita, pois está se a descobrir ainda várias substâncias com actividades reguladoras de crescimento de plantas, tais como os brassinosteróides, jasmonatos, entre outras.

Conforme o objecto do estudo, foram realizadas as sínteses dos ácidos α -naftilacético, 2-naftoxiacético e 2-naftoxiacetato de potássio, compostos estes que são enquadrados no grupo das auxinas. O ácido α -naftilacético foi preparado através de duas vias, a saber:

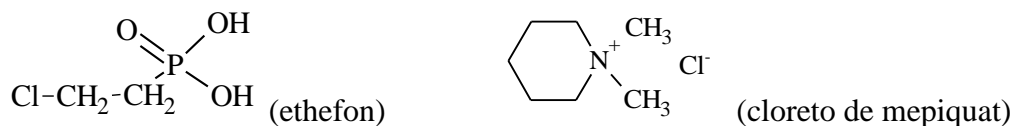
- Reacção do naftaleno com ácido cloroacético, levada a cabo a 200 °C durante 20 horas. Por esta via obteve-se o rendimento de cerca de 3 % de ácido α -naftilacético (p. f. 125-130 °C).
- Reacção de Grignard, a qual envolve a formação de 1-clorometilnaftaleno, formação do cloreto de 1-naftilmetilmagnésio e a sua carbonilação. O rendimento obtido por esta via é de 59.4 % (p. f. 127-131 °C).

Já o ácido 2-naftoxiacético e o 2-naftoxiacetato de potássio foram preparados através da síntese de Williamson, a qual envolve a reacção do 2-naftol com o ácido cloroacético na presença de hidróxido de potássio. O rendimento do ácido 2-naftoxiacético é de 59.4 % (p. f. 144-150 °C).

A ocorrência das reacções, a pureza dos produtos bem como a identidade estrutural de cada composto sintetizado foram confirmados mediante a determinação dos pontos de fusão, análise cromatográfica (cromatografia em camada fina) e espectroscópica (espectroscopia de infravermelho e de ressonância magnética nuclear de protão).

6. RECOMENDAÇÕES

As informações obtidas do IIAM - Repartição de Registo e Controlo de Agroquímicos, mostram que apenas dois PGRs (o ethefon e o cloreto de mepiquat) são utilizados na agricultura moçambicana.



Tais informações destacam ainda que estes agroquímicos melhoram bastante a produção e a sua escassez deve-se aos custos de aquisição que são relativamente altos. Sendo assim, recomenda-se ao Departamento de Química que crie condições laboratoriais (em destaque os reagentes e materiais de execução de experiências e de protecção do analista) que possam permitir o desenvolvimento de técnicas (de síntese de PGRs de estruturas relativamente simples e/ou extracção de PGRs de elevada complexidade estrutural - tais como as giberelinas e os brassinosteróides) rápidas, menos dispendiosas, menos perigosas a saúde humana e ambiental, que não requerem muitos equipamentos especiais e que dão maiores rendimentos. Tais técnicas poderiam, posteriormente, ser aplicadas para síntese e/ou extracção destes compostos em escalas industriais, para o uso interno e exportação. Recomenda-se também que se invista em aparelhos de caracterização estrutural para tornar mais credíveis e mais informativos os trabalhos de investigação desenvolvidos por esta Instituição.

Recomenda-se que se faça um estudo mais aprofundando acerca das razões pelas quais os tipos de substituintes e as posições do anel, às quais encontram-se ligados as cadeias laterais, influem bastante nas actividades fisiológicas dos PGRs derivados de naftaleno.

Recomenda-se às Faculdades de Biologia e de Agronomia e Engenharia Florestal da Universidade Eduardo Mondlane que façam testes preliminares das actividades biológicas dos compostos sintetizados e definam as concentrações mínimas e máximas necessárias para que estes compostos induzam as actividades biológicas previstas. Caso as actividades biológicas previstas sejam observadas e os padrões ambientais e de toxicidade ao organismo humano sejam obedecidos, recomendar-se-á a sociedade em geral para que utilizem estes agroquímicos para o melhoramento da produção agrícola no nosso País, e no mundo em geral.

7. BIBLIOGRAFIA

7.1. MANUAIS

- [1]. AHLUWALIA, V. K. BHAGAT, P. e AGGARWAL, R. (2005). *Laboratory Techniques in Organic Chemistry*. pp 72-174. New Delhi. I. K. International Pvt. Ltd
- [2]. ALLINGER, N. et al (1971). *Organic Chemistry*. 2th edition. 1355 pp. New York. Worth Publishers, Inc
- [3]. ARSHAD, M. e FRANKENBERGER, W. T. Jr. (2002). *Ethylene: Agricultural Resources and Applications*. p v. New York. Kluwer Academic. Plenum Publishers
- [4]. ATWELL, B. et al (1999). *Plants in Action: Adaptation in Nature Performance in Cultivation*. 1st edition. pp 297-302. Australia. Macmillan Publishers Australia PTY Ltd
- [5]. BACHMANM, W. E. e STRUVE, W. S. (1942). *Organic Reactions*. Vol 1. pp 38–62. United Kingdom. John Wiley & Sons, Inc
- [6]. BASRA, A. S. (2000). *Plant Growth Regulators in Agriculture and Horticulture: their Role and Commercial Uses*. p 545. New York. Published by Food Products Press ®
- [7]. BRUICE, P. Y. (2004). *Organic Chemistry*. Volume 1. 4th edition. 1228 pp. USA. Prentice Hall
- [8]. CAREY, F. A. (2000). *Organic Chemistry*. 4th edition. pp 487-543. USA. McGraw Hill Education
- [9]. COSTA, J. M. (2005). *Diccionario de Química Física*. p 64. Barcelona. Pulicacions I Edicions de la Universitat de Barcelona
- [10]. DEVLIN, R. M. (1976). *Fisiología Vegetal*. pp 353-437. Barcelona. Ediciones Omega, SA
- [11]. DA SILVA, C. Jr. e SASSON, S. (2007). *Biologia*. Volume único. 4^a edição reformulada. pp 482-491. São Paulo. Editora Saraiva
- [12]. FERRI, M. G. (1985). *Fisiologia Vegetal*. Volume 2. 2^a edição. pp 215-282. São Paulo. EPU

- [13]. GEORGE, E., HALL, M. A. e KLERK, G. (Eds.). (2008). *Plant Propagation by Tissue Culture*. Vol. 1 The Background. 3rd edition. pp 173-197. Netherlands. Published by Springer
- [14]. GOKEL, G. W. (2004). *Dean's Handbook of Organic Chemistry*. 2nd edition. 1042 pp. McGraw Hill
- [15]. HOFFMAN, R. V. (2004). *Organic Chemistry: An Intermediate Text*. 2nd edition. pp 347-348. Canada. John Wiley & Sons, Inc
- [16]. LAUE, T. e PLAGENS, A. (2005). *Named Organic Reactions*. 2nd edition. 317 pp. Germany. Translated into English by Vogel, C. John Wiley & Sons, Ltd
- [17]. LESSENGER, J. E. (2006). *Agricultural Medicine*. pp 156-160. New York. Springer
- [18]. MCMURRY, J. E. (2008). *Organic Chemistry*. 7th edition. 1354 pp. USA. Thomson Learning, Inc.
- [19]. MEVER, B. S. et al (1965). *Introdução à Fisiologia Vegetal*. pp 392-439. Lisboa. Fundação Calouste Gulbenkian
- [20]. MITTAL, A. (2007). *Chemistry*. pp 417-440. New Delhi. S. B. Nangia
- [21]. MOORE, J. T. e LANGLEY, R. H. (2010). *Organic Chemistry II for Dummies*. 388 pp. USA. John & Wiley Publishing
- [22]. PARKER, R. (2010). *Plant and Soil Science: Fundamentals and Applications*. Pp 320-322. USA. Delmar
- [23]. PESSARAKLI, M. (2001). *Handbook of Plant and Crop Physiology*. 2nd edition revised and expanded. 997 pp. New York. Marcel Dekker, Inc
- [24]. SARKER; S. D. e NAHAR, L. (2007). *Chemistry for Pharmacy Students: General, Organic and Natural Product Chemistry*. 371 pp. Great Britain. John Wiley & Sons Editor

- [25]. SEAGER, S. L. e SLABAUGH, M. R. (2010). *Safety-Scale Laboratory Experiments for Chemistry for Today: General, Organic, and Biochemistry*. 7th edition. pp 231-237. USA. Books/Cole
- [26]. SEQUEIRA, A. J. et al. (2003). *Introdução à Cromatografia com Ênfase em Material Biológico*. pp 17-19. Porto Alegre. EDIPUCRS
- [27]. SKOOG, D. A. WEST, D. M. HOLLER, F. J. e CROUCH, S. R. (2006). *Fundamentos de Química Analítica*. Tradução da 8^a edição Norte-Americana. 1026 pp. Editora Thomson Learning. São Paulo
- [28]. SOLOMONS, T. W. G. e FRYHLE, C. B. (2005). *Química Orgânica*. Volume 1. 8^a Edição. pp 365-413. Rio de Janeiro. LTC Editora S.A. Traduzido de Organic Chemistry 1, 8th edition por Rodson Mendes
- [29]. TAIZ, L. e ZEIGER, E. (2006). *Fisiologia Vegetal*. Volumen I. 1265 pp. Universitat Jaume I. Tradução da 3^a edição: Plant Physiology
- [30]. VIEIRA, E. L. et al (2010). *Manual de Fisiologia Vegetal*. pp 184-202. São Luís. EDUFMA
- [31]. VOGEL, A. I. (1989). *Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry*. 5th edition. 1540 pp. UK. Longman Scientific & Technical
- [32]. WADE, L. G. (2003). *Organic Chemistry*. 5th edition. pp 971-972. Madrid. Pearson Prentice Hall

7.2. **PATENTES**

- [33]. ALT, G. H. e FRANZ, J. E. (1976). *Plant Growth Regulators*. Patent US 3.985.773. 7 pp
- [34]. CAMBRON, A. (1942). *Preparation of α -Chlormethyl Naphthalene*. Patent US 2.304.537. 2 pp
- [35]. GODFROID, J. e STEINER, E. (August 19, 1980). *Derivatives of 4-Cyclohexyl-1-naphthalene-acetic Acid and their use as Drugs*. Patent US 4.218.473

- [36]. KONDO, K. et al. (19.05.1981). *Process for Preparing Aromatic Acetic Acid*. Patent US 4.268.442. 12 pp
- [37]. ROBLIN, R. O. Jr. (1939). *1-Naphthaleneacetic Acid*. Patent US 2.166.544. 2 pp
- [38]. SOUTHWICH, P. L. (13.10.1953). *Method of Making Naphthaleneacetic Acid*. Patent US 2.655.531. 2 pp
- [39]. WENNER, W. (29.10.1949). *Production of Arylacetic Acids and Amides*. Patent US 2.489.348. 6 pp
- [40]. WOLFRAM, A. SCHÖRNIG, L. e HAUSDÖRFER, E. (20.03.1934). *New Process of Preparing Arylacetic Acids and New Product Obtainable Thereby*. Patent US 1.951.686. 3 pp

7.3. JORNAIS CIENTÍFICOS

- [41]. AMER, I. e ALPER, H. (1989). *Lanthanide – Promoted and Nickel Cyanide Catalyzed Carbonylation Reactions under Phase – Transfer Conditions*. Journal of American Chemical Society. Vol. 111. pp 927-930
- [42]. BAUSOR, S. C. (10.03.1939). *a New Growth Substance, β -Naphthoxyacetic Acid*. American Journal of Botany. Vol. 26. pp 415-418
- [43]. CESAR, J. e DOLENC, M. S. (2001). *Trimethylsilyldiazomethane in the Preparation of Diazoketones via Mixed Anhydride and Coupling Reagent Methods*. Tetrahedron Letters. Vol. 42. pp 7099-7102
- [44]. GILMAN, H. e KIRBY, J. E. (1929). *Some Rearrangement Reactions of α -naphthylmethylmagnesium Chloride*. Journal of the American Chemical Society. Vol. 51. pp 3475-3478.
- [45]. HASKELBERG, L. (16.12.1946). *The Halogenation of Aryloxyacetic Acids and their Homologs*. Journal of Organic Chemistry. pp 426-430

- [46]. KATRITZKY, A. L. ZHANG, S. FANG, Y. (2000). *BtCH₂TMS-Assisted Homologation of Carboxylic Acids: a Safe Alternative to the Arndt-Eistert Reaction*. Organic Letters. Vol. 2. N° 24. pp 3789-3791
- [47]. OGATA, Y e ISHIGURO, J. (1950). *Preparation of α -Naphthaleneacetic Acid by the Condensation of Naphthalene with Chloroacetic Acid*. Journal of the American Chemical Society. Vol. 72. Japan. p 4032
- [48]. OGATA, Y. OKANO, M. e KITAMURA, Y. (1951). *The Chemistry of 1-Naphthaleneacetic Acid Derivatives*. Journal of Organic Chemistry. pp 1588-1592. Japan
- [49]. SOUTHWICH, P. L. PURSGLOVE, L. A. PURSGLOVE, B. M. e WALSH, W. L. (1954); *The Role of Chloroacetylpoliglicolic Acids in the Potassium Bromide Catalyzed Conversion of Chloroacetic Acid and Naphthalene into α -Naphthylacetic*. Journal of the American Chemical Society. Vol. 76. Carnegie Institute of Technology. pp 754-757

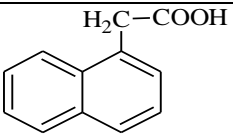
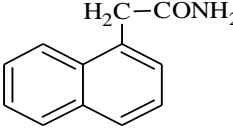
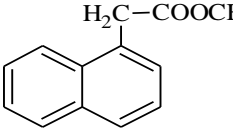
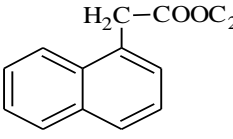
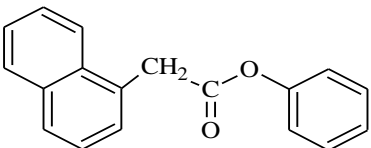
7.4. ARTIGOS DA INTERNET

- [50]. MUENDANE, C. T. (2009). *Revolução Verde em Moçambique: Será Revolução? Será Verde?*. 48 pp. Maputo. SIREMO. Acedido em 01 de Agosto de 2011, em <http://www.ispu.ac.mz/content/download/6287/32439/file/REVOLU%C3%87%C3%83O%20VERDE%20EM%20MO%C3%87AMBIQUE%20-%20CARDOSO%20MUENDADE.pdf>
- [51]. Unicef (2009). *Moçambique em perspectiva*. acedido em 11 de Novembro de 2011, em <http://www.unicef.org/mozambique/pt/overview.html>

ANEXOS

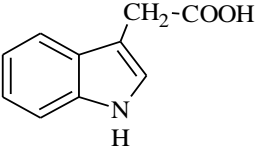
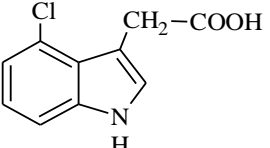
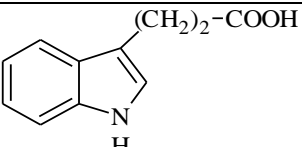
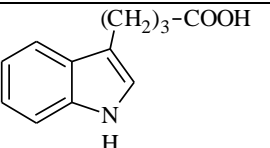
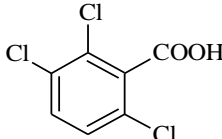
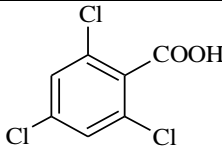
Nas tabelas 1 a 10 em anexo, estão elucidadas as estruturas dos principais reguladores de crescimento de plantas sintetizados e/ou isolados de fontes naturais quaisquer que estão disponíveis no mercado internacional.

Tabela 1. Principais auxinas disponíveis no mercado internacional

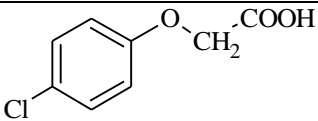
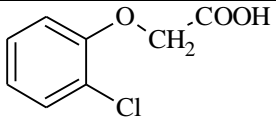
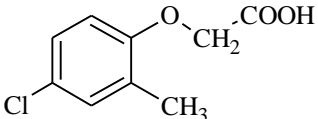
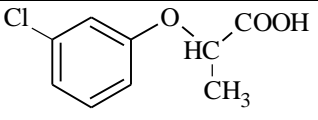
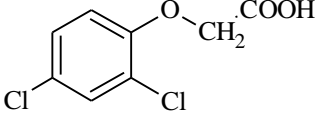
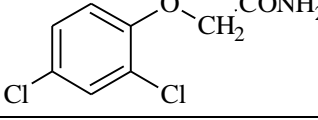
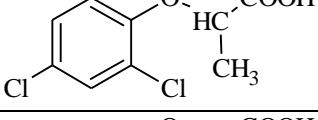
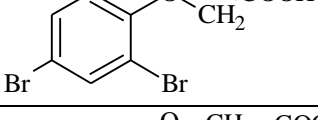
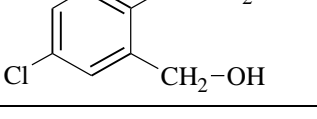
AUXINAS				
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura	
<i>Auxinas derivadas de naftaleno</i>				
Ácido 1-naftalenoacético (ANA)	Ácido naftalen-1-ilacético	Naphthalen-1-ylacetic acid (NAA)		
Auxinas derivadas do ANA ou NAA	1-Naftalenoacetamida (NAD)	2-(naftalen-1-il)acetamida	2-(naphthalen-1-yl)acetamide	
	α -Naftilacetato de metilo	Naftalen-1-ilacetato de metilo	Methyl naphthalen-1-ylacetate	
	α -Naftilacetato de etilo	Naftalen-1-ilacetato de etilo	Ethyl naphthalen-1-ylacetate	
	α -Naftilacetato de fenilo (P-NAA)	Naftalen-1-ilacetato de fenilo	Phenyl naphthalen-1-ylacetate	

α -Naftilacetato de 3-hidroxifenilo (3-HP-NAA)	Naftalen-1-ilacetato de 3-hidroxifenil	3-Hydroxyphenyl naphthalen-1-ylacetate	
α -naftilacetato de sódio	Naftalen-1-ilacetato de sódio	Sodium naphthalen-1-ylacetate	
α -naftilacetato de potássio	Naftalen-1-ilacetato de potássio	Potassium naphthalen-1-ylacetate	
Ácido β -naftoxiacético ³	Ácido (naftalen-2-iloxi)acético	(Naphthalen-2-yloxy)acetic acid (NOA)	
Ácido β -naftoxi- α -propiónico ³	Ácido 2-(naftalen-2-iloxi)propanóico	2-(Naphthalen-2-yloxy)propanoic acid	
Ácido β -naftoxi- α -butírico ³	Ácido 2-(naftalen-2-iloxi)butanóico	2-(Naphthalen-2-yloxy)butanoic acid	
α -Naftol	Naftalen-1-ol	Naphthalen-1-ol	

³ Também possui derivados como os do ácido α -naftilacético

<i>Auxinas derivadas de indol</i>			
Ácido indol-3-acético ¹ (AIA)	Ácido 1H-indol-3-ilacético	1H-indol-3-ylacetic acid (IAA)	
Ácido 4-cloroindol-3-acético ¹	Ácido (4-cloro-1H-indol-3-il)acético	(4-Chloro-1H-indol-3-yl)acetic acid (4Cl-IAA)	
Ácido indol-3-propiónico ¹	Ácido 3-(1H-indol-3-il)propanóico	3-(1H-indol-3-yl)propanoic acid	
Ácido indol-3-butírico ¹ (AIB)	Ácido 4-(1H-indol-3-il)butanóico	4-(1H-indol-3-yl)butanoic acid (IBA)	
<i>Ácidos benzóicos substituídos</i>			
Ácido 2,3,6-triclorobenzóico	Ácido 2,3,6-triclorobenzóico	2,3,6-Trichlorobenzoic acid (2,3,6-TCBA)	
Ácido 2,4,6-triclorobenzóico	Ácido 2,4,6-triclorobenzóico	2,4,6-Trichlorobenzoic acid (2,4,6-TCBA)	

Dicamba	Ácido 2-metoxi-3,6-diclorobenzóico	2-Methoxy-3,6-dichlorobenzoic acid	
Ácido 2-cloro-5-nitrobenzóico	Ácido 2-cloro-5-nitrobenzóico	2-Chloro-5-nitrobenzoic acid	
Ácido 2-Bromo-3-nitrobenzóico	Ácido 2-Bromo-3-nitrobenzóico	2-Bromo-3-nitrobenzoic acid	
Ácidos fenóxi substituídos			
Ácido 2,4,5-triclorofenoxiacético	Ácido 2,4,5-triclorofenoxiacético	2,4,5-Trichlorophenoxyacetic acid (2,4,5-T)	
Ácido 2,4,5-triclorofenoxi- α -propiónico	Ácido 2-(2,4,5-triclorofenoxi)propanóico	2,4,5-Trichlorophenoxy- α -propionic acid	
2,4,5-Trichlorophenoxy- α -propionamida	2-(2,4,5-Triclorofenoxi)propanamida	2-(2,4,5-Trichlorophenoxy)propanamide	
Ácido 2,4,5-triclorofenoxi- α -butírico	Ácido 2-(2,4,5-triclorofenoxi)butanóico	2-(2,4,5-Trichlorophenoxy)butanoic acid	
2,4,5-Trichlorophenoxy- α -butiramida	2-(2,4,5-triclorofenoxi)butanamida	2-(2,4,5-Trichlorophenoxy)butanamide	

Ácido 4-clorofenoxiacético	Ácido 4-clorofenoxiacético	4-Chlorophenoxyacetic acid (4-CPA)	
Ácido 2-clorofenoxiacético	Ácido 2-clorofenoxiacético	2-Chlorophenoxyacetic acid (2-CPA)	
Ácido 2-metil-4-clorofenoxiacético	Ácido 2-metil-4-clorofenoxiacético	2-Methyl-4-chlorophenoxyacetic acid (MPCA)	
Cloprop	Ácido 2-(3-clorofenoxi)propanóico	2-(3-chlorophenoxy)propanoic acid	
Ácido 2,4-diclorofenoxiacético (2,4-D)	Ácido 2,4-diclorofenoxiacético	2,4-Dichlorophenoxyacetic acid	
2,4-diclorofenoxiacetamida	2-(2,4-diclorofenoxi)acetamida	2,4-Dichlorophenoxyacetamide	
Ácido 2,4-diclorofenoxi- α -propiónico	Ácido 2-(2,4-diclorofenoxi)propanóico	2,4-Dichlorophenoxy- α -propionic acid	
Ácido 2,4-dibromofenoxiacético	Ácido 2,4-dibromofenoxiacético	2,4-Dichlorophenoxyacetic acid	
Cloxifenac	Ácido [4-cloro-2-(hidroximetil)fenoxi]acético	[4-chloro-2-(hydroxymethyl)phenoxy]acetic acid	

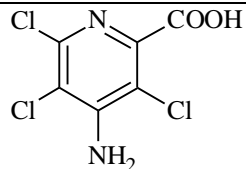
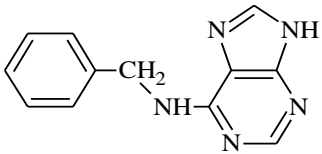
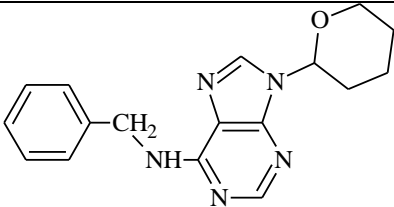
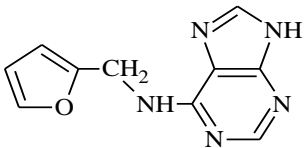
<i>Auxinas derivadas do ácido picolínico</i>			
Tordon ou Picloran	Ácido 4-amino-3,5,6-trichloro-2-piridinocarboxílico (ATCP)	4-Amino-3,5,6-trichloropicolinic acid	

Tabela 2. Principais citocininas disponíveis no mercado internacional

CITOCININAS (CKs)			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
<i>Citocininas derivadas de adenina</i>			
6-Benziladenina (BAP) Ou Benzilaminopurina	<i>N</i> -benzil-9 <i>H</i> -purin-6-amina	<i>N</i> -benzyl-9 <i>H</i> -purin-6-amine	
Tetrahidropiranyl benziladenina (PBA)	<i>N</i> -benzil-9-(tetrahydro-2 <i>H</i> -piran-2-il)-9 <i>H</i> -purin-6-amina	<i>N</i> -benzyl-9-(tetrahydro-2 <i>H</i> -pyran-2-yl)-9 <i>H</i> -purin-6-amine	
Cinetina	<i>N</i> -(furan-2-ilmetil)-9 <i>H</i> -purin-6-amina	<i>N</i> -(furan-2-ylmethyl)-9 <i>H</i> -purin-6-amine	

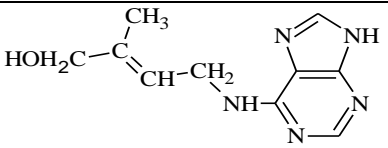
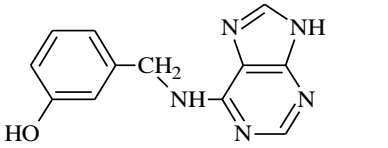
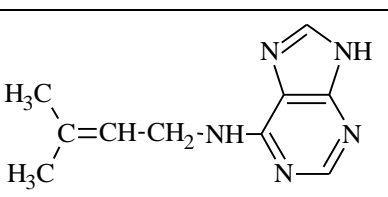
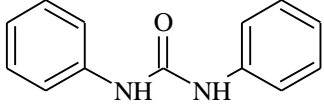
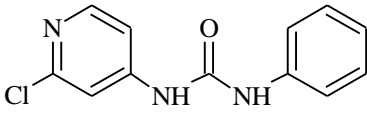
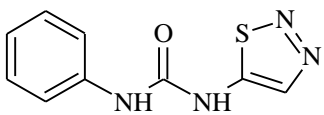
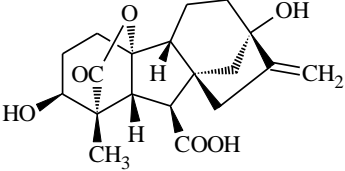
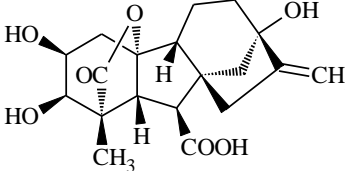
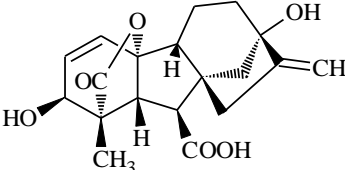
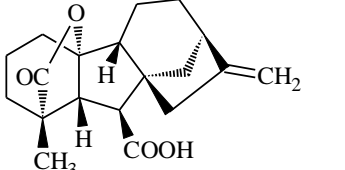
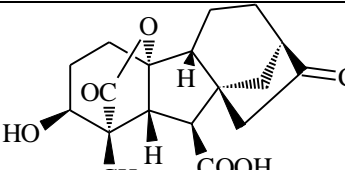
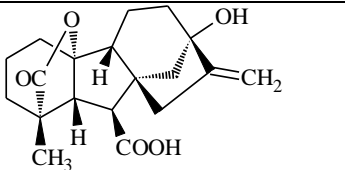
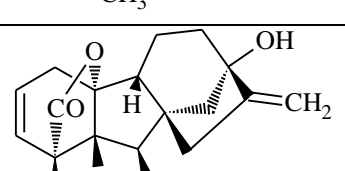
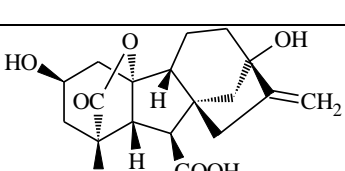
<i>Trans</i> -zeatina	(2 <i>E</i>)-2-metil-4-(9 <i>H</i> -purin-6-ilamino)but-2-en-1-ol	(2 <i>E</i>)-2-methyl-4-(9 <i>H</i> -purin-6-ylamino)but-2-en-1-ol	
<i>Meta</i> -topolina	3-[(9 <i>H</i> -purin-6-ilamino)metil]fenol	3-[(9 <i>H</i> -purin-6-ylamino)methyl]phenol	
<i>N</i> ⁶ -Dimetilaliladenina	<i>N</i> -(3-metilbut-2-en-1-il)-9 <i>H</i> -purin-6-amina	<i>N</i> -(3-methylbut-2-en-1-yl)-9 <i>H</i> -purin-6-amine	
<i>Citocininas derivadas de ureia</i>			
Carbanilida	1,3-Difenilureia	1,3-Diphenylurea	
Forclorfenuron (4-CPPU)	1-(2-cloropiridin-4-il)-3-fenilureia	1-(2-Chloropyridin-4-yl)-3-phenylurea	
Tidiauron	1-Fenil-3-(1,2,3-tiadiazol-5-il)ureia	1-Phenyl-3-(1,2,3-thiadiazol-5-yl)urea	

Tabela 3. Principais giberelinas detectadas e isoladas dos tecidos vegetais

GIBERELINAS (GAs)			
Nome comum	Estrutura	Nome comum	Estrutura
<i>Giberelinas com 19 átomos de carbono (C₁₉-GAs)</i>			
GA ₁		GA ₈	
Ácido giberélico (GA ₃)		GA ₉	
GA ₄		GA ₂₀	
GA ₅		GA ₂₉	

GA ₇		GA ₃₄	
<i>Giberelinas com 20 átomos de carbono (C₂₀-GAs)</i>			
GA ₁₂		GA ₂₄	
GA ₁₅		GA ₂₅	
GA ₁₇		GA ₄₄	
GA ₁₉		GA ₅₃	

Tabela 4. Principais libertadores de etileno disponíveis no mercado internacional

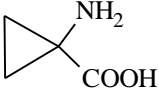
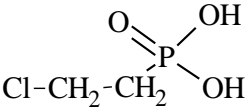
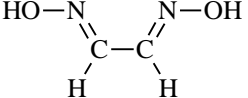
LIBERADORES DE ETILENO			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
ACC	Ácido 1-aminociclopropanocarboxílico	1-Aminocyclopropanecarboxylic acid	
Etacelasil	2-Cloroetiltris(2-metoxietoxi)silano	2-Chloroethyltris(2-methoxyethoxy)silane	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{O}-(\text{CH}_2)_2-\text{O}-\text{Si}-(\text{CH}_2)_2-\text{Cl} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{O}-(\text{CH}_2)_2-\text{O}-\text{Si}-\text{O}-(\text{CH}_2)_2-\text{O}-\text{CH}_3 \end{array}$
Ethefon	Ácido 2-cloroetilfosfônico	(2-chloroethyl)phosphonic acid	
Glioxima	(1E,2E)-N,N'-dihidroxietano-1,2-diimina	(1E,2E)-N,N'-dihydroxyethane-1,2-diimine	

Tabela 5. Principais brassinosteróides disponíveis no mercado internacional

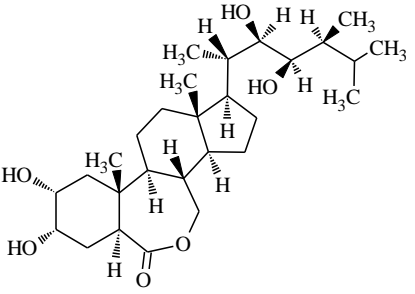
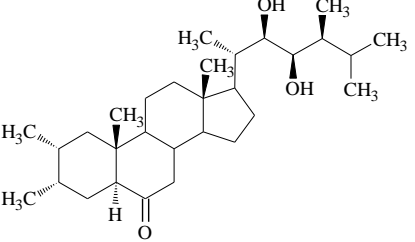
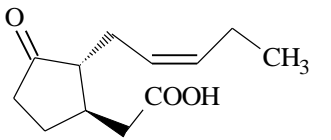
BRASSINOSTERÓIDES			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
Brassinólide (BL)	(1R,3aS,3bS,6aS,8S,9R,10aR,10bS,12aS)-1-[(1S,2R,3R,4S)-2,3-dihidroxi-1,4,5-trimetilhexil]hexadecahidro-8,9-dihidroxi-10a,12a-dimetil-6H-benz[c]indeno[5,4-e]oxepin-6-ona	Brassinolide	
Castasterona (CS)	(2R,3S,5S,8S,9S,10R,13S,14S,17R)-17-[(2S,3R,4R,5S)-3,4-dihidroxi-5,6-dimetilheptan-2-il]-2,3-dihidroxi-10,13-dimetil-1,2,3,4,5,7,8,9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidrociclopenta[a]fenantren-6-ona	Castasterone	

Tabela 6. Principais jasmonatos detectados e isolados das plantas

JASMONATOS (JAs)			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
Ácido (-)-jasmônico (JA)	Ácido {(1R,2R)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-il]ciclopentil}acético	{(1R,2R)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-yl]cyclopentyl}acetic acid	

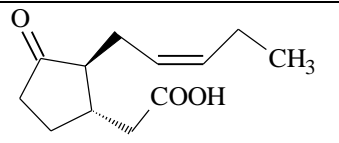
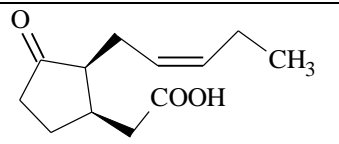
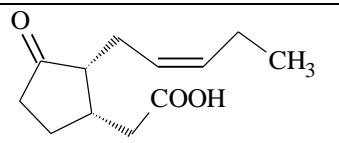
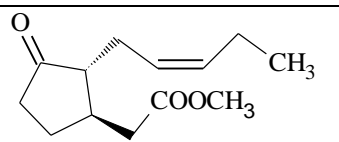
Ácido (+)-jasmônico	Ácido {(1S,2S)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-il]ciclopentil}acético	{(1S,2S)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-yl]cyclopentyl}acetic acid	
Ácido (+)-7-iso-jasmônico	Ácido {(1R,2S)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-il]ciclopentil}acético	{(1R,2S)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-yl]cyclopentyl}acetic acid	
Ácido (-)-7-iso-jasmônico	Ácido {(1S,2R)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-il]ciclopentil}acético	{(1S,2R)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-yl]cyclopentyl}acetic acid	
Jasmonato de metilo (MeJa)	{(1R,2R)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-il]ciclopentil}acetato de metilo	Methyl {(1R,2R)-3-oxo-2-[(2Z)-pent-2-en-1-yl]cyclopentyl}acetate	

Tabela 7. Principais poliamidas com actividades reguladores de crescimento de plantas

POLIAMIDAS			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
Putrescina	Butano-1,4-diamina	Butane-1,4-diamine	H ₂ N-(CH ₂) ₄ -NH ₂
Espermidina	N-(3-aminopropil)butano-1,4-diamina	N-(3-aminepropyl)butane-1,4-diamine	H ₂ N-(CH ₂) ₃ -NH-(CH ₂) ₄ -NH ₂
Espermina	N,N'-bis(3-aminopropil)butano-1,4-diamina	N,N'-bis(3-aminepropyl)butane-1,4-diamine	H ₂ N-(CH ₂) ₃ -NH-(CH ₂) ₄ -NH-(CH ₂) ₃ -NH ₂

Tabela 8. Outros estimulantes de crescimento de plantas disponíveis no mercado internacional

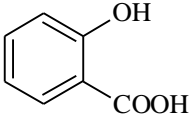
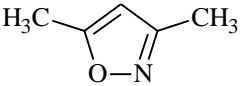
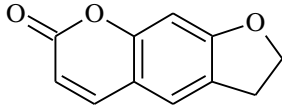
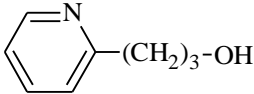
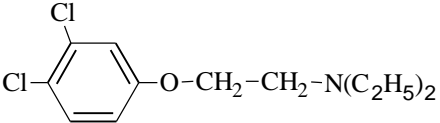
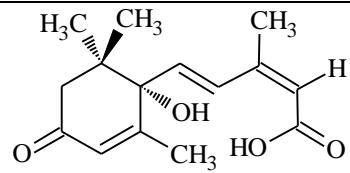
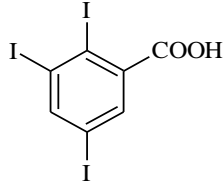
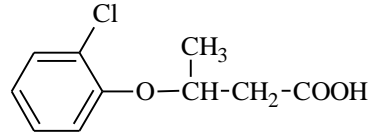
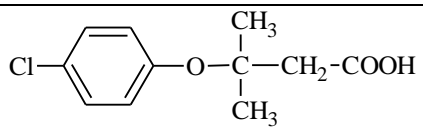
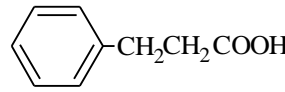
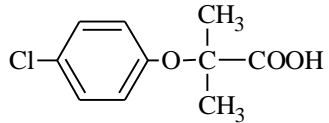
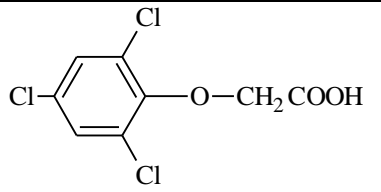
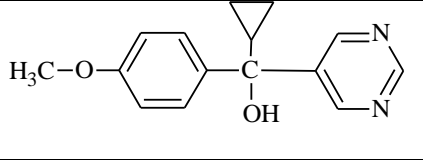
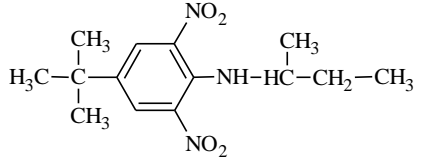
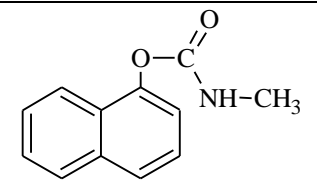
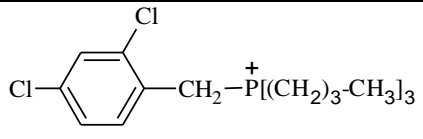
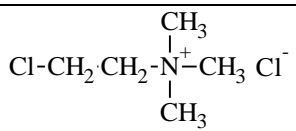
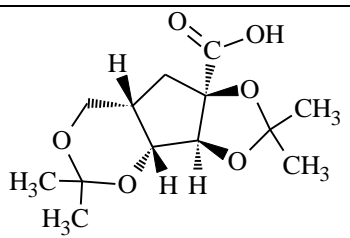
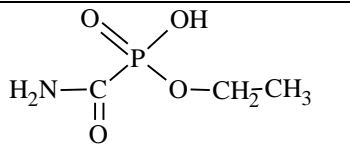
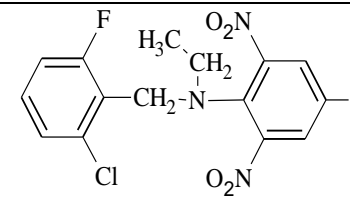
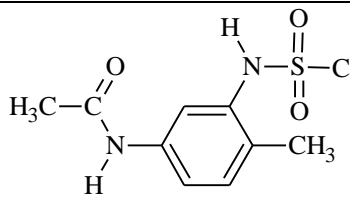
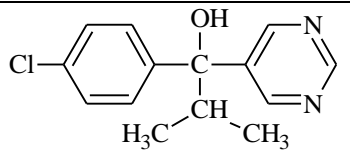
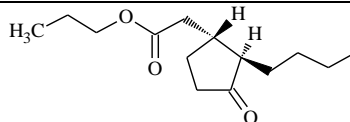
OUTROS ESTIMULANTES DE CRESCIMENTO			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
Ácido salicílico	Ácido 2-hidroxibenzóico	2-Hydroxybenzoic acid	
Himexazol	3,5-Dimetilisoxazol	3,5-Dimethylisoxazole	
Prosuler	2,3-dihydro-7H-furo[3,2-g]cromen-7-ona	2,3-Dihydro-7H-furo[3,2-g]chromen-7-one	
Piripropanol	3-(piridin-2-il)propan-1-ol	3-(pyridin-2-yl)propan-1-ol	
Triacontanol	Triacontan-1-ol	Triacontan-1-ol	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_{29}-\text{OH}$
DCPTA	2-(3,4-Diclorofenoxi)-N,N-dietiletanamina	2-(3,4-Dichlorophenoxy)-N,N-diethylethanamine	

Tabela 9. Principais inibidores de crescimento de plantas disponíveis no mercado internacional

INIBIDORES DE CRESCIMENTO			
Nome comum	Nome químico em português	Nome químico em inglês	Estrutura
Ácido abscísico	Ácido (2Z,4E)-5-[(1S)-1-hidroxi-2,6,6-trimetil-4-oxociclohex-2-en-1-il]-3-metilpenta-2,4-dienóico	(2Z,4E)-5-[(1S)-1-Hydroxy-2,6,6-trimethyl-4-oxocyclohex-2-en-1-yl]-3-methylpenta-2,4-dienoic acid	
TIBA	Ácido 2,3,5-Triiodobenzóico	2,3,5-Triiodobenzoic acid	
Ácido 3-(2-clorofenoxi)butanóico	Ácido 3-(2-clorofenoxi)butanóico	3-(2-chlorophenoxy)butanoic acid	
Ácido 3-(4-clorofenoxi)-3-metilbutanóico	Ácido 3-(4-clorofenoxi)-3-metilbutanóico	3-(4-chlorophenoxy)-3-methylbutanoic acid	
Ácido 3-fenilpropanóico	Ácido 3-fenilpropanóico	3-Phenylpropanoic acid	
PCIB	Ácido 2-(4-clorofenoxi)-2-metilpropanóico	2-(4-chlorophenoxy)-2-methylpropanoic acid	

2,4,6-T	Ácido (2,4,6-triclorofenoxi)acético	(2,4,6-trichlorophenoxy)acetic acid	
Ancimidol	Ciclopropil(4-metoxifenil)pirimidin-5-ilmetanol	Cyclopropyl(4-methoxyphenyl)pyrimidin-5-ylmethanol	
Butralin	N-(butan-2-il)-4-tert-butil-2,6-dinitroanilina	N-(butan-2-yl)-4-tert-butyl-2,6-dinitroaniline	
Carbaril	Naftalen-1-il metilcarbamato	Naphthalen-1-yl methylcarbamate	
Clorofónio	Tributil[(2,4-diclorofenil)metil]fosfónio	Tributyl[(2,4-dichlorophenyl)methyl]phosphonium	
Cicocel (CCC)	Cloreto de 2-cloro-N,N,N-trimetiletanaminio	2-chloro-N,N,N-trimethylethanaminium chloride	

Dikegulaque	Ácido (3aS,3bR,7aS,8aR)-2,2,5,5-tetrametiltetrahidro[1,3]dioxolo[4,5]ciclopenta[1,2-d][1,3]dioxina-8a(7H)-carboxílico	(3aS,3bR,7aS,8aR)-2,2,5,5-tetramethyltetrahydro[1,3]dioxolo[4,5]cyclopenta[1,2-d][1,3]dioxine-8a(7H)-carboxylic acid	
Flosamina	Hidrogeno P-(aminocarbonil)fosfonato de etil	Ethyl hydrogen P-(aminocarbonyl)phosphonate	
Flumetralina	N-(2-Cloro-6-fluorobenzil)-N-etil-2,6-dinitro-4-(trifluorometil)anilina	N-(2-Chloro-6-fluorobenzyl)-N-ethyl-2,6-dinitro-4-(trifluoromethyl)aniline	
Fluoridamida	N-(4-metil-3-{{(trifluorometil)sulfonyl}amino} fenil)acetamida	N-(4-methyl-3-{{(trifluoromethyl)sulfonyl}amino} phenyl)acetamide	
Isopirimol	1-(4-clorofenil)-2-metil-1-(pirimidin-5-il)propan-1-ol	1-(4-chlorophenyl)-2-methyl-1-(pyrimidin-5-yl)propan-1-ol	
Prohidrojasmona	[(1R,2R)-3-oxo-2-pentilciclopentil]acetato de propil	Propyl [(1R,2R)-3-oxo-2-pentylcyclopentyl]acetate	

Hidrazida maléica (MH)	6-hidroxipiridazin-3(2H)-ona	6-Hydroxypyridazin-3(2H)-one		
Mepiquate	1,1-dimetilpiperidínio	1,1-Dimethylpiperidinium		
Cloreto de mepiquate	Cloreto de 1,1-dimetilpiperidínio	1,1-Dimethylpiperidinium chloride		
Morfactinaas	Clorofluoreno	Ácido 2-cloro-9H-fluoreno-9-carboxílico	2-Chloro-9H-fluorene-9-carboxylic acid	
	Clorofluorenol	Acido 2-cloro-9-hidroxi-9H-fluoreno-9-carboxílico	2-Chloro-9-hydroxy-9H-fluorene-9-carboxylic acid	
	Fluorenol	Ácido 9-hidroxi-9H-fluoreno-9-carboxílico	9-Hydroxy-9H-fluorene-9-carboxylic acid	
	Diclorofluorenol	Ácido 2,7-dicloro-9-hidroxi-9H-fluoreno-9-carboxílico	2,7-dichloro-9-hydroxy-9H-fluorene-9-carboxylic acid	
Piproctanil	1-(3,7-dimetiloctil)-1-(2-propenil)piperidínio	1-(3,7-dimethyloctyl)-1-(2-propenyl)piperidinium		

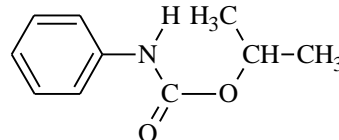
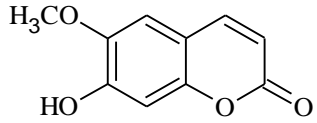
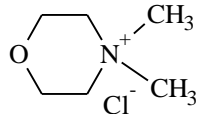
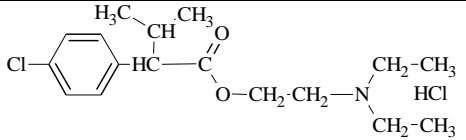
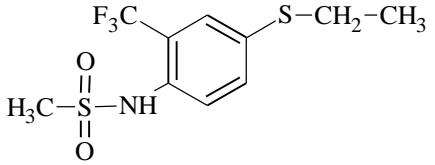
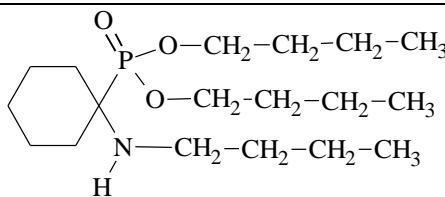
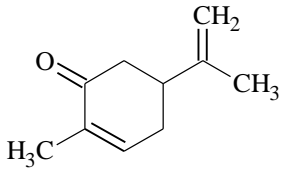
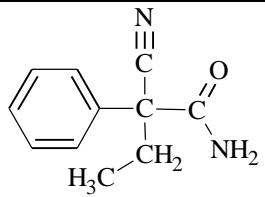
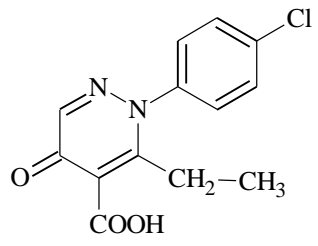
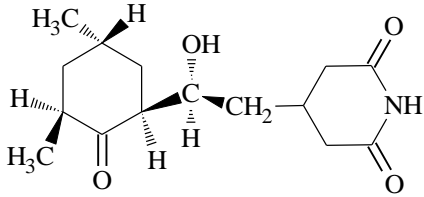
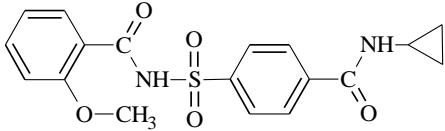
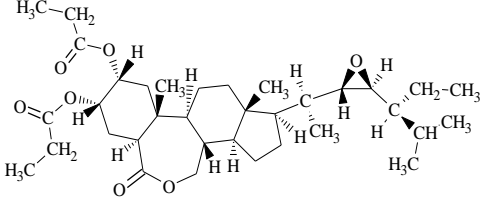
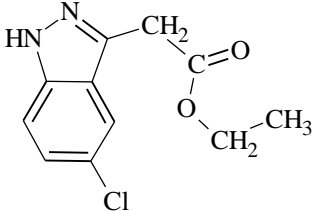
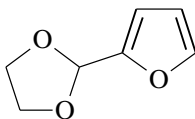
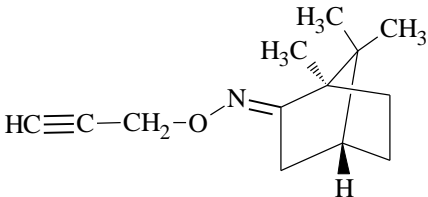
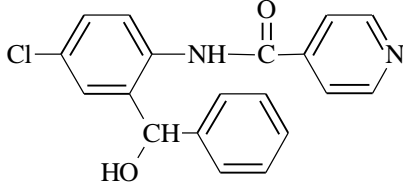
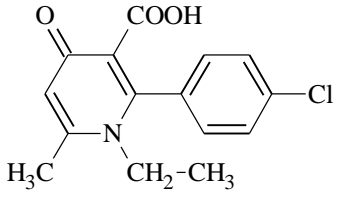
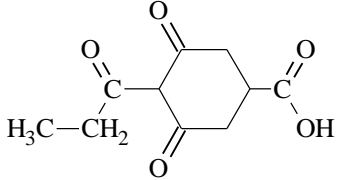
Profam	Propan-2-il fenilcarbamato	Propan-2-yl phenylcarbamate	
Escopoletina	7-hidroxi-6-metoxi-2H-cromen-2-ona	7-Hydroxy-6-methoxy-2H-chromen-2-one	
Tiaojean	Cloreto de 4,4-dimetilmorfolínio	4,4-dimethylmorpholin-4-ium chloride	

Tabela 10. Reguladores de crescimento de plantas não classificados

REGULADORES DE CRESCIMENTO NÃO CLASSIFICADOS			
Banchmedesh	Hidrocloreto de 2-(dietilamino)etil 2-(4-clorofenil)-3-metilbutanoato	2-(Diethylamino)ethyl 2-(4-chlorophenyl)-3-methylbutanoate	
Benzoflúor	N-[4-(etiltio)-2-(trifluorometil)fenil]metanosulfonamida	N-[4-(ethylthio)-2-(trifluoromethyl)phenyl]methanesulfonamide	
Buminafos	(P)-[1-(butilamino)ciclohexil]fosfonato de dibutil	Dibutyl (P)-[1-(butylamino)cyclohexyl]phosphonate	

Carvona	2-Metil-5-(prop-1-en-2-il)ciclohex-2-en-1-ona	2-Methyl-5-(prop-1-en-2-yl)cyclohex-2-en-1-one	
Cloreto de colina	Cloreto 2-hidroxi-N,N,N-trimetiletanamínio	2-Hydroxy-N,N,N-trimethylethanaminium chloride	$\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{N}^+(\text{CH}_3)_3 \text{Cl}^-$
Óxido nítrico	Oxoazanida ou Nitrilooxónio	Oxoazanide or Nitrilooxonium	NO
Ciobutide	2-Ciano-2-fenilbutanamida	2-Cyano-2-phenylbutanamide	
Clofencet	Ácido 2-(4-clorofenil)-3-etil-5-oxo-2,5-dihidropiridazina-4-carboxílico	2-(4-Chlorophenyl)-3-ethyl-5-oxo-2,5-dihydropyridazine-4-carboxylic acid	
Cianamida	Cianamida	Cyanamide	$\text{N}\equiv\text{C}-\text{NH}_2$
Cicloheximida	4-[(2R)-2-[(1S,3S,5S)-3,5-dimetil-2-oxociclohexil]-2-hidroxi-etil]-2,6-piperidinadiona	4-[(2R)-2-[(1S,3S,5S)-3,5-dimethyl-2-oxocyclohexyl]-2-hydroxyethyl]piperidine-2,6-dione	

Ciprosulfamida	N-{{[4-(ciclopropilcarbamoil)fenil]sulfonil}-2-metoxibenzamida	N-{{[4-(cyclopropylcarbamoil)phenyl]sulfonil}-2-methoxybenzamide	
Epocoleona	(1R,3aS,3bS,6aS,8S,9R,10aR,10bS,12aS)-1-[(1S)-1-[(2R,3R)-3-[(1S)-1-etil-2-metilpropil]oxirani]etil]hexadecahidro-10a,12a-dimetil-8,9-bis(1-oxopropoxi)-6H-benz[c]indeno[5,4-e]oxepin-6-ona	Epocoleone	
Etilclozate	(5-chloro-1H-indazol-3-yl)acetato de etil	Ethyl (5-chloro-1H-indazol-3-yl)acetate	
Furalano	2-(Furan-2-il)-1,3-dioxolano	2-(Furan-2-yl)-1,3-dioxolane	
Heptopargil	(1R,2E,4R)-1,7,7-trimetil-N-(prop-2-in-1-iloxi)biciclo[2.2.1]heptan-2-imina	(1R,2E,4R)-1,7,7-trimetil-N-(prop-2-yn-1-yloxy)biciclo[2.2.1]heptan-2-imine	

Holosulf	Ácido 2-cloroethanosulfínico	2-Chloroethanesulfinic acid	$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{S}(\text{OH})_2$
Inabenfida	N-{4-cloro-2-[hidroxi(fenil)metil]fenil}piridino-4-carboxamida	N-{4-chloro-2-[hydroxy(phenyl)methyl]phenyl}pyridine-4-carboxamide	
Karetazan	Ácido 2-(4-clorofenil)-1-etil-6-metil-4-oxo-1,4-dihidropiridino-3-carboxílico	2-(4-chlorophenyl)-1-ethyl-6-methyl-4-oxo-1,4-dihydropyridine-3-carboxylic acid	
Arsenato de chumbo	Arsenato de chumbo	Lead arsenate	$\text{HO}-\text{As}(\text{O})_3-\text{Pb}^{2+}$
Metasulfocarb	4-[(Metilcarbamoil)sulfanil]fenil metanosulfonato	4-[(Methylcarbamoil)sulfanyl]phenyl methanesulfonate	$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}-\text{C}(\text{O})-\text{S}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}-\text{S}(\text{O})_2-\text{CH}_3$
Prohexadiona	Ácido 3,5-dioxo-4-propanoilciclohexanecarboxílico	3,5-Dioxo-4-propanoilycyclohexanecarboxylic acid	

Pidanon	Ácido (4-hidroxi-3,6-dioxohexahidropiridazin-4-il)acético	(4-Hydroxy-3,6-dioxohexahydropyridazin-4-yl)acetic acid	
Sintofen	1-(4-clorofenil)-5-(2-metoxietoxi)-4-oxo-1,4,4a,8a-tetrahidrocinolino-3-carboxílico	1-(4-Chlorophenyl)-5-(2-methoxyethoxy)-4-oxo-1,4,4a,8a-tetrahydrocinnoline-3-carboxylic acid	
Triapentenol	1-(1-ciclohexil-3,4,4-trimetilpent-1-en-2-il)-1H-1,2,4-triazol	1-(1-Cyclohexyl-3,4,4-trimethylpent-1-en-2-yl)-1H-1,2,4-triazole	
Trinexapac	Ácido 4-[ciclopropil(hidroxi)metilidene]-3,5-dioxociclohexanocarboxílico	4-[Cyclopropyl(hydroxy)methylidene]-3,5-dioxocyclohexanecarboxylic acid	

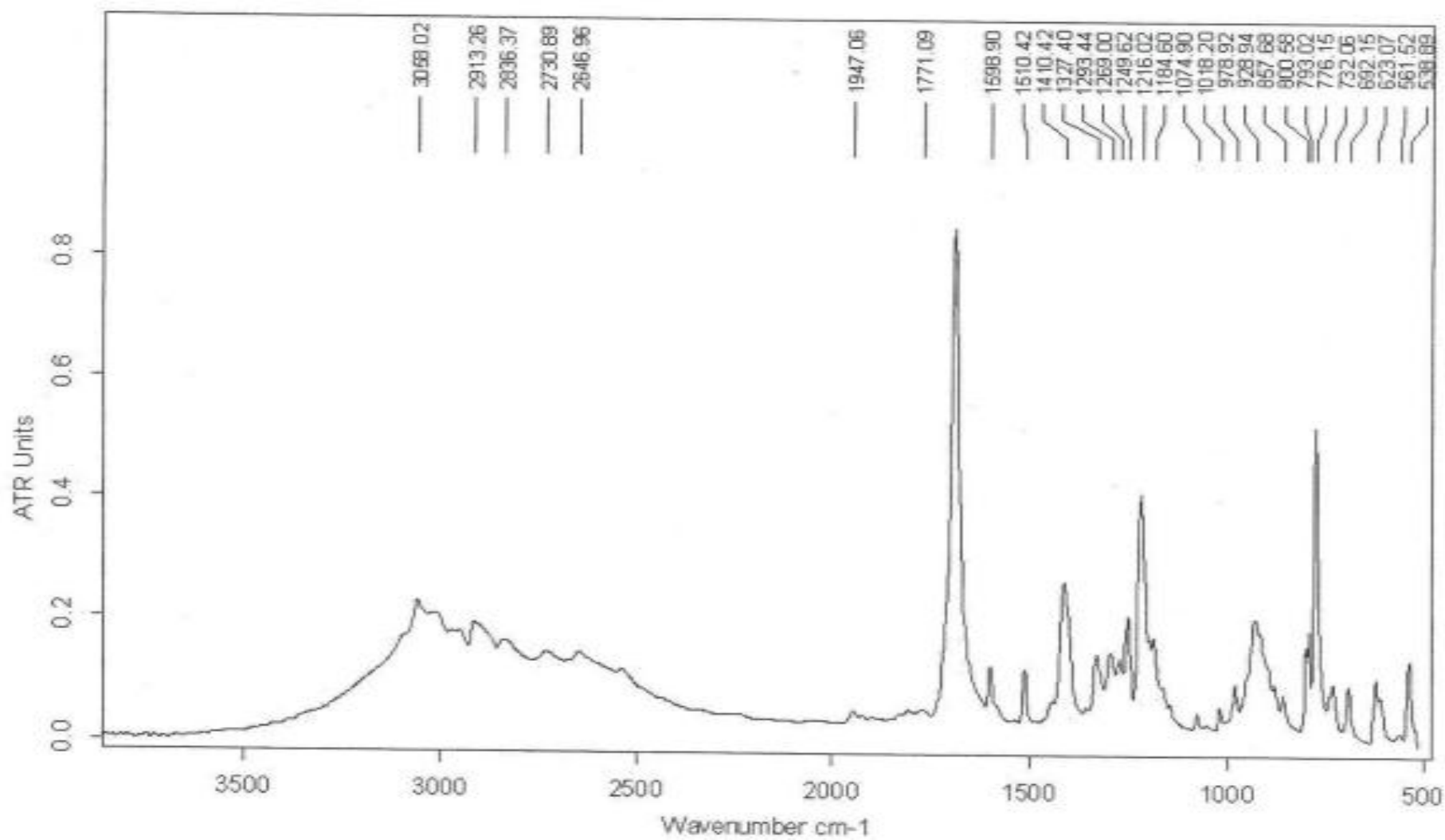


Fig. 1. Espectro de infravermelho do ácido α -naftilacético

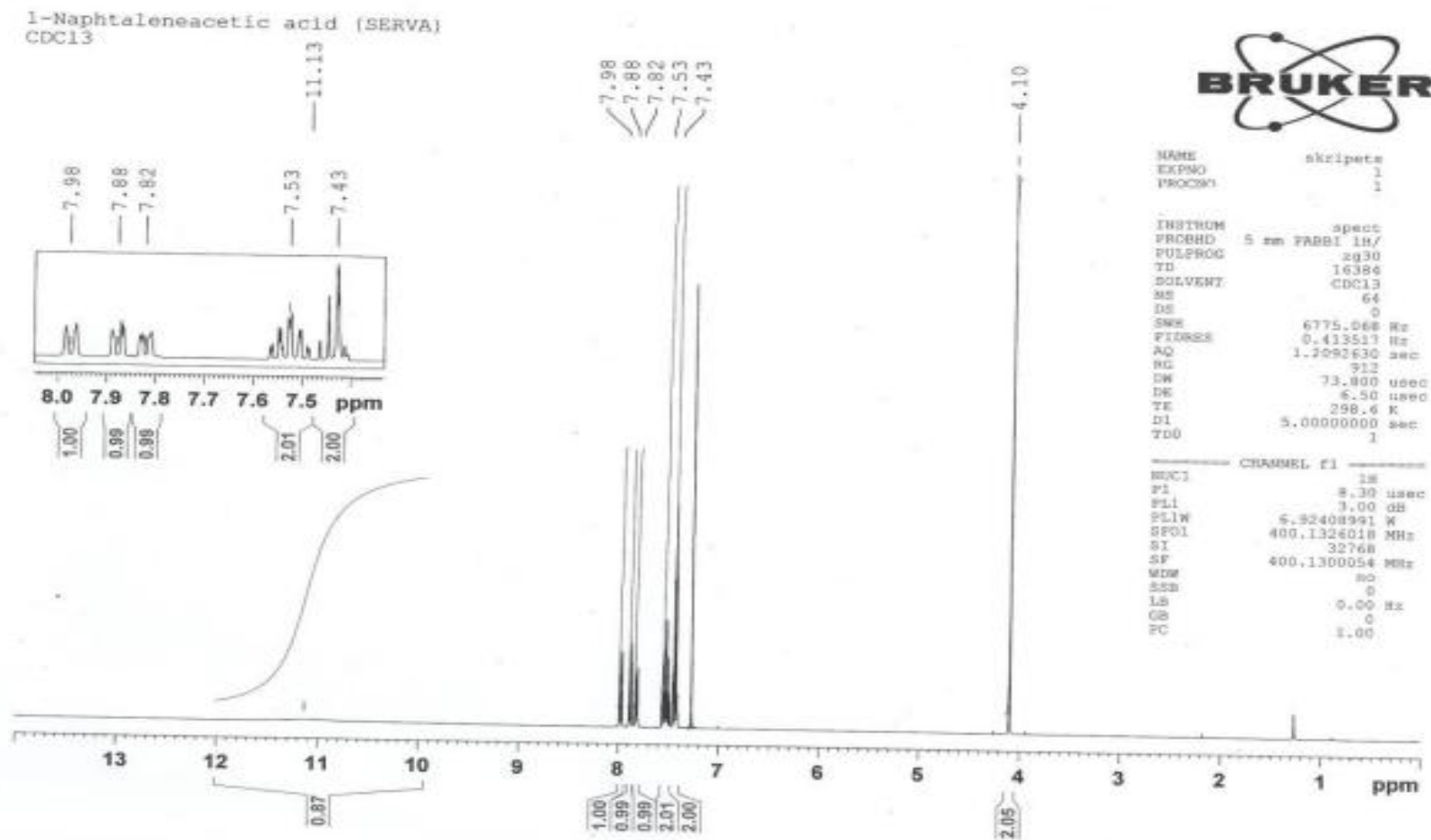


Fig. 2. Espectro de ressonância magnética nuclear de próton do ácido α -naftilacético