



VII
EBSH
Florianópolis.2007

**Encontro Brasileiro de
Substâncias Húmicas**

30/out a 01/nov 2007

**Livro de
Resumos
do VII
EBSH**

**As Substâncias Húmicas podem
ajudar a salvar o Planeta
Terra?**

**Hotel Maria do Mar
Florianópolis/SC - BRASIL**

UTILIZAÇÃO DA METODOLOGIA DE MARCADOR DE SPIN PARA ESTUDO DA INTERAÇÃO HIDROFÓBICA EM SUBSTÂNCIAS HÚMICAS

Simões, M.L.¹; Ferreira, J.A.¹; da Silva, W. T. L.¹; Milori, D.M.B.P.¹; Costa-Filho, A.J.²; Nascimento, O.R.²; Martin-Neto, L.¹

(1) Embrapa Instrumentação Agropecuária, C.P. 741, 13560-970, São Carlos, SP
 (2) Instituto de Física de São Carlos - IFSC/USP, C.P. 369, 13560-970, São Carlos, SP
 *marcelo@cnpdia.embrapa.br

Palavras Chaves: substâncias húmicas, interação hidrofóbica, marcador de spin

A avaliação da ocorrência de interações hidrofóbicas em substâncias húmicas (SH) torna-se importante, pois esse tipo de interação pode afetar a dinâmica e a reatividade de contaminantes apolares no ambiente (1) e influenciar no controle biogeoquímico do carbono no solo (2). Entretanto, a heterogeneidade química das SH e a baixa energia envolvida nesse tipo de interação dificultam a obtenção de evidências experimentais.

Com base nessas informações avaliou-se a ocorrência de interações hidrofóbicas em SH utilizando a metodologia de marcador de spin, detectável por ressonância paramagnética eletrônica (RPE) (3). Ferreira et al. (4) utilizaram essa metodologia para estudos sobre interações hidrofóbicas e detecção de sítios hidrofóbicos em ácido húmico (AH).

A Figura 1 mostra o espectro do marcador 5-SASL em água (em detalhe) e em presença de AH. É observado que quando do marcador em água há somente três linhas hiperfinas com constante de separação isotrópica (a_0) igual a 1,57 mT e taxa de difusão rotacional (τ_c), obtida por simulação espectral, próxima de 10^{-9} s, valores característicos de marcador com alta mobilidade molecular. Essa característica (alta mobilidade molecular) também foi obtida para o marcador TEMPO em presença do AH (dado não apresentado). Entretanto, comportamento espectral significativamente diferente foi obtido para o marcador 5-SASL em presença de AH, onde é observada a sobreposição de duas componentes, uma alargada indicando que o marcador está fortemente imobilizado no AH, e outra não alargada indicando que o marcador possui maior grau de mobilidade. A forte imobilização do marcador 5-SASL no AH foi confirmada pela diminuição de τ_c (10^9 s⁻¹ em água e 10^6 s⁻¹ em presença do AH).

Uma possível limitação do uso do marcador 5-SASL é a presença do grupo carboxílico (COOH) na sua estrutura química. Devido à presença desse grupo químico, há a possibilidade de ocorrer, além de interações hidrofóbicas, também iônicas e/ou ligações de hidrogênio. A utilização do marcador 5-MSSL, o qual tem o grupo metil (-CH₃), limita a ocorrência desses tipos de ligações e aumenta a

probabilidade de interações hidrofóbicas com o marcador (5) e exclui a possibilidade de equilíbrio rápido entre marcador, no caso em relação ao marcador TEMPO, e o AH, pois possui tamanho molecular similar ao marcador 5-SASL. O comportamento espectral do 5-MSSL foi similar ao do marcador 5-SASL (dado não apresentado), sugerindo que o grupo COOH não está envolvido na interação com o AH.

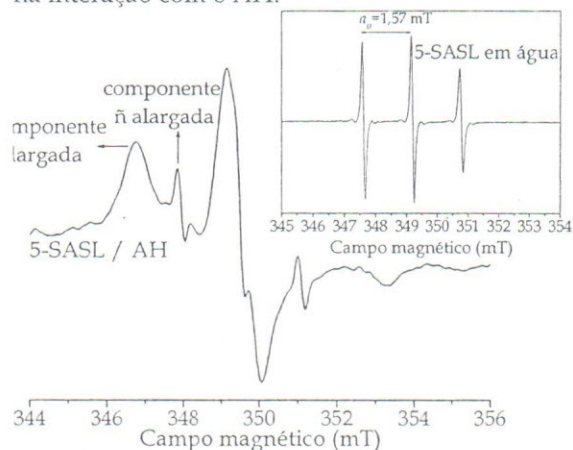


Figura 1. Espectros de RPE marcador 5-SASL em água (em detalhe) e em presença da suspensão de AH, ambos em pH 4,5.

Adicionalmente a estas análises foram realizadas outras similares com outros componentes do solo, objetivando-se obter resultados em situações mais próximas das condições ambientais.

REFERÊNCIAS:

- (1) Schwarzenbach, R.P.; Gschwend, P.M. Imboden, D.M. *Environmental Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, 1992.
- (2) Conte, P.; Spaccini, R.; Piccolo, A. *Fresenius Environ. Bulletin*. 2004, 13, 238-243.
- (3) Knowles, P.F.; Marsh, D.; Rattle, H.W.E. *Magnetic resonance of biomolecules*. John Wiley & Sons, New York, 1976.
- (4) Ferreira, J.A.; Nascimento, O.R.; Martin-Neto, L. *Environ. Sci. Technol.* 2001, 35, 761.
- (5) Ge, M.; Ranavavare, S.B.; Freed, J.H. *Biochim. Biophys. Acta*. 1990, 1036, 238.