

ISSN 2175-8395

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento

REDE DE NANOTECNOLOGIA APLICADA AO AGRONEGÓCIO

ANAIS DO VI WORKSHOP – 2012

Maria Alice Martins
Morsyleide de Freitas Rosa
Men de Sá Moreira de Souza Filho
Nicodemos Moreira dos Santos Junior
Odílio Benedito Garrido de Assis
Caue Ribeiro
Luiz Henrique Capparelli Mattoso

Editores

Fortaleza, CE
2012

Exemplares desta publicação podem ser adquiridos na:

Embrapa Instrumentação

Rua XV de Novembro, 1452,
CEP 13560-970 – São Carlos, SP
Fone: (16) 2107-2800
Fax: (16) 2107-2902
<http://www.cnpdia.embrapa.br>
E-mail: sac@cnpdia.embrapa.br

Embrapa Agroindústria Tropical

Rua Dra. Sara Mesquita, 2270,
CEP 60511-110 – Fortaleza, CE
Fone: (85) 3391-7100
Fax: (85) 3391-7109
<http://www.cnpat.embrapa.br>
E-mail: sac@cnpat.embrapa.br

**Comitê de Publicações da Embrapa
Instrumentação**

Presidente: João de Mendonça Naime
Membros: Débora Marcondes Bastos Pereira
Milori, Washington Luiz de Barros Melo, Sandra
Protter Gouvêa, Valéria de Fátima Cardoso.
Membro suplente: Paulo Sérgio de Paula
Herrmann Júnior

**Comitê de Publicações da Embrapa
Agroindústria Tropical**

Presidente: Antonio Teixeira Cavalcanti Júnior
Secretário-Executivo: Marcos Antonio Nakayama
Membros: Diva Correia, Marlon Vagner Valentim
Martins, Arthur Cláudio Rodrigues de Souza, Ana
Cristina Portugal Pinto de Carvalho, Adriano
Lincoln Albuquerque Mattos e Carlos Farley
Herbster Moura

Supervisor editorial: Dr. Victor Bertucci Neto

Capa: Mônica Ferreira Laurito, Pedro Hernandes Campaner

Imagens da capa:

Imagem de MEV-FEG de Titanato de potássio – Henrique Aparecido de Jesus Loures
Mourão, Viviane Soares

Imagem de MEV de Eletrodeposição de cobre – Luiza Maria da Silva Nunes, Viviane Soares

Imagem de MEV de Colmo do sorgo – Fabrício Heitor Martelli, Bianca Lovezutti Gomes,
Viviane Soares

Imagem de MEV-FEG de HPMC com nanopartícula de quitosana – Marcos Vinicius Lorevice,
Márcia Regina de Moura Aouada, Viviane Soares

Imagem de MEV-FEG de Vanadato de sódio – Waldir Avansi Junior

Imagem de MEV de Fibra de pupunha – Maria Alice Martins, Viviane Soares

1ª edição

1ª impressão (2012): tiragem 300

Todos os direitos reservados.

A reprodução não-autorizada desta publicação, no todo ou em parte, constitui
violação dos direitos autorais (Lei nº. 9.610).

CIP-Brasil. Catalogação na publicação.

Embrapa Instrumentação

Anais do VI Workshop da rede de nanotecnologia aplicada ao agronegócio 2012 – São
Carlos: Embrapa Instrumentação; Fortaleza: Embrapa Agroindústria Tropical, 2012.

Irregular

ISSN: 2175-8395

1. Nanotecnologia – Evento. I. Martins, Maria Alice. II. Rosa. Morsyleide de
Freitas. III. Souza Filho, Men de Sá Moreira de. IV. Santos Junior, Nicodemos Moreira
dos. V. Assis, Odílio Benedito Garrido de. VI. Ribeiro, Caue. VII. Mattoso, Luiz
Henrique Capparelli. VIII. Embrapa Instrumentação. IX. Embrapa Agroindústria
Tropical.

© Embrapa 2012



Simulação computacional do herbicida Metribuzin

Sergio R. de Lazaro 1, Tiago J. Bortolini 1, Cauê R. de Oliveira 2

1. Departamento de Química, UEPG, Ponta Grossa, Paraná, Brasil, srlazaro@uepg.br

2. Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, Embrapa, São Carlos, São Paulo, Brasil

Projeto Componente: 5

Plano de Ação: 3

Resumo

Este trabalho consiste em uma simulação da estrutura eletrônica do herbicida Metribuzin visando um sério problema ambiental relacionado com a contaminação a partir de herbicidas que são aplicados na agricultura para o aumento do rendimento da produção. Essa simulação analisou os orbitais HOMO e LUMO da molécula.

Palavras-chave: metribuzin, simulação, herbicida, geometria molecular, triazina, anel triazínico, resíduo, poluição ambiental, defensivos agrícolas.

Introdução

Encontrado como cristais brancos com um odor característico fraco, o metribuzin possui uma solubilidade de 1,05 g/L em água a 20 °C. É bastante solúvel em dimetilformamida, e também é solúvel em ciclohexanona, acetona, metanol, benzeno, etanol, e outros solventes orgânicos. É relativamente estável à irradiação ultravioleta, porém a fotodecomposição na água é bastante rápida. Este herbicida é absorvido principalmente pelas raízes, inibindo a fotossíntese a partir do sistema de transporte de elétrons [1]. Usado como controle em culturas de tomate, cana-de-açúcar, soja, batata e cereais. Fitotóxico a muitas plantações, como as de morango, batata doce, alface, flores de verão e várias outras. É bastante conhecido pelo nome Sencor® (Bayer®) e 'Lexone' (Du Pont®).

Doses elevadas de metribuzin em soja induzem aumentos na fitotoxicidade das plantas e, conseqüentemente, redução no vigor das sementes, o efeito residual de metribuzin aplicado em pré-emergência, causa menor potencial de armazenamento e pior desempenho da semente na fase de estabelecimento no campo [1]. Sintomas como clorose e necrose nas plantas afetadas e a diminuição da área fotossintética total evidenciam a

perda da realização da fotossíntese das plantas de soja tratadas com o metribuzin [2].

Materiais e métodos

Para a realização destas simulações utilizou-se o programa GAUSSIAN 03 [3] com visualização nos programas MOLDEN e GaussView 2.1. O sistema investigado nesse trabalho foi metribuzin (Fig. 1). Na primeira etapa realizaram-se cálculos para determinação das geometrias das moléculas em relação energia total de cada sistema. Para essa finalidade utilizou-se a metodologia da Teoria do Funcional de Densidade (TFD ou DFT) com funcional de densidade B3LYP e conjunto de base 6-31g(d, p). Em relação ao campo autoconsistente (SCF) limitou-se o truncamento das integrais ou limite de precisão para o valor de diferença entre as energias da ordem de 10^{-6} . Utilizou-se um computador do tipo PC com processador AMD Athlon 64 3200+, 1GHz de memória RAM, disco rígido de 140 Gb. (o tamanho do manuscrito completo não deve exceder 3 páginas e deverá ser escrito em Times New Roman, fonte 11, espaço simples)



Fig. 1: Estrutura molecular do herbicida Metribuzin.

Resultados e discussão

O metribuzin, por ser um anel triazínico, poderia ter um comportamento semelhante a atrazina, todavia, o metribuzin não é um composto triazínico simétrico, mudando completamente a estabilidade do anel. Assim nota-se uma maior disponibilidade de elétrons no oxigênio ligado ao anel, e nos nitrogênios onde há duplas ligações. A disponibilidade de elétrons no anel, esta presente com maior intensidade nas ligações N-N, onde há uma estabilidade pela ressonância dentro do anel, necessitando um meio reacional muito favorável. O oxigênio também disponibiliza pares de elétrons para reações, mas pelo que é indicado nos produtos, não há reação para a retirada deste oxigênio, portanto não sendo de grande utilidade no meio reacional, mas pode participar da ressonância. [4].

Um dos possíveis produtos gerados com a reação no HOMO (Fig. 2) é a formação do Desaminometribuzin. Para a formação deste produto, nota-se a reação do nitrogênio ligado ao anel, assim, ocorrendo uma desaminação.

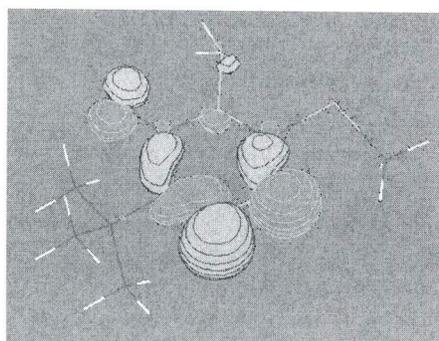


Fig. 2: Densidade eletrônica do orbital molecular HOMO para a molécula de Metribuzin.

A densidade eletrônica do orbital LUMO (Fig. 3) está em sua maioria dentro do anel. No

oxigênio fora do anel, também esta presente uma densidade eletrônica. A formação do diketo-metribuzin pode estar relacionado com a densidade do anel, mais precisamente no carbono ligado ao enxofre, onde há a substituição do enxofre por um oxigênio, e posteriormente a formação do diketo-metribuzin.

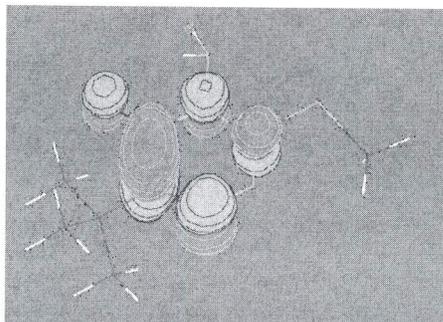


Fig. 3: Densidade eletrônica do orbital molecular LUMO para a molécula de metribuzin.

Conclusões

Conclui-se que existem possibilidades de oxidação nos orbitais moleculares HOMO e LUMO como demonstrado nas densidades eletrônicas. As reações com adição e/ou a retirada de elétrons podem ocorrer na forma de ataque direto à estrutura do anel triazínico.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao apoio financeiro dos órgãos de fomento CNPq, FINEP, EMBRAPA, CAPES, Rede AgroNano.

Referências

1. D. M. Moraes; B. G. F. Santos; F.A. Villela; D.S.B. Santos Revista Brasileira de Sementes 1997, 159.
2. Y.S. Yang; S.W. Bingham Weed Sci., 1984, 247.
3. M.J. Frisch; G.W. Trucks; H.B. Schlegel; G.E. Scuseria; et. al. Inc.: Pittsburgh, PA, 2002.
4. T. Henriksen; B. Svensmark; R.K. Juhler J Environ Qual. 2004, 619.