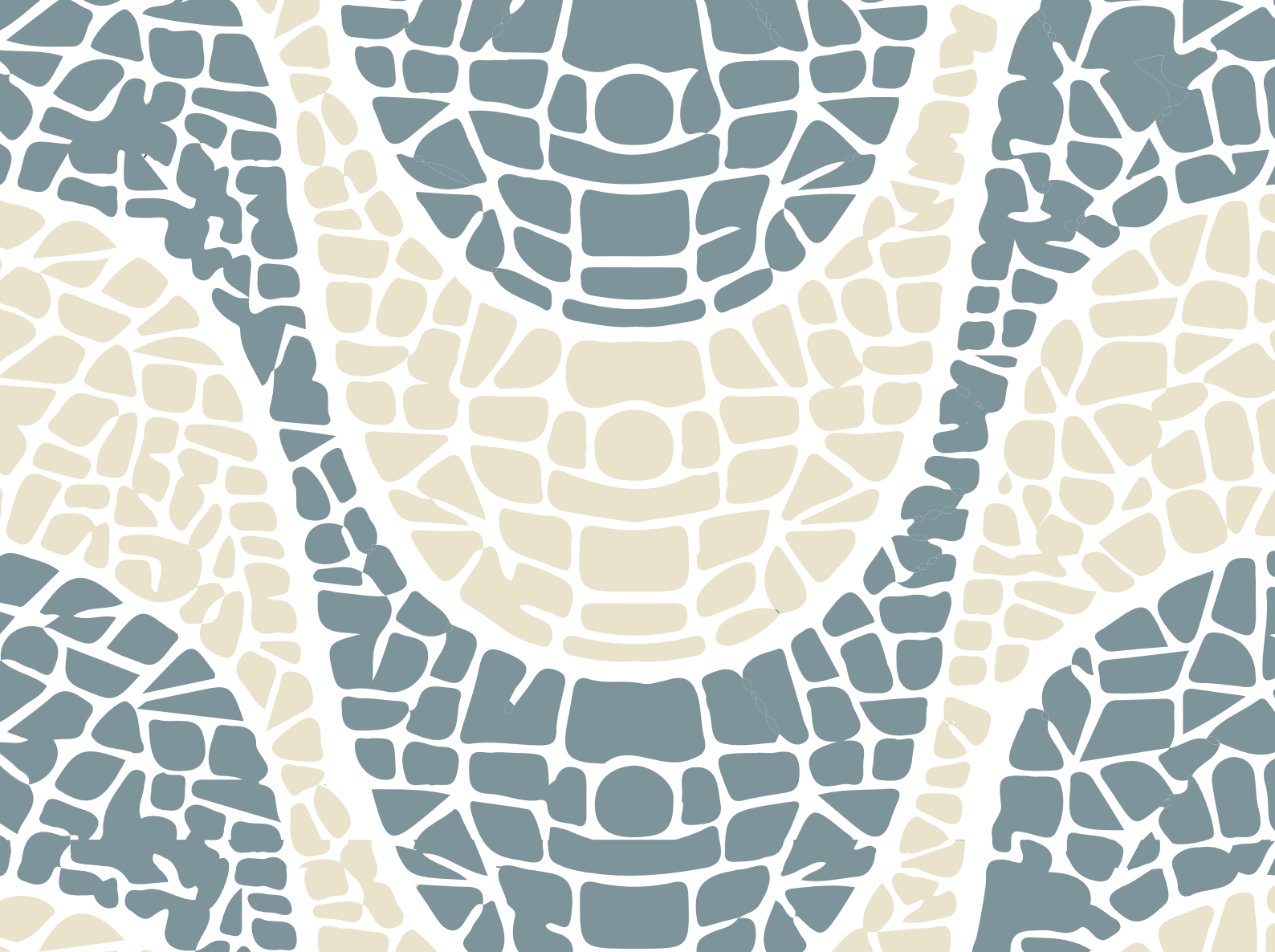
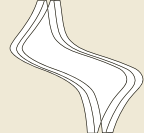




XXVI CONGRESSO

SIBAE 19-23 Maio 2024
Lisboa, Portugal

LIVRO DE RESUMOS
2024



Estudo Computacional da Degradação Eletroquímica do Herbicida Metribuzin

Kathia Maria Honorio¹, Erica de Sousa Conrado¹, Michell de Oliveira Almeida²

¹Escola de Artes, Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil.

²Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil.

e-mail: kmhonorio@usp.br

O herbicida metribuzin é usado no controle de ervas daninhas em plantações de cana-de-açúcar e, em alta exposição ao ambiente, pode se tornar um disruptor endócrino (ED). Essas substâncias podem afetar receptores hormonais, causando reações adversas em organismos [1]. EDs são poluentes persistentes e uma forma comum de degradá-los é usar métodos eletroquímicos para gerar peróxido de hidrogênio. A seguir, o peróxido de hidrogênio formado é convertido em reagente de Fenton gerando $\text{OH}^\bullet$, o qual degrada EDs. Além de técnicas experimentais, simulações computacionais podem ser usadas no estudo de degradação de EDs [2]. Assim, o principal objetivo deste estudo foi realizar simulações para avaliar possíveis mecanismos de degradação do metribuzin. Para isso, inicialmente foi realizada a otimização da estrutura de metribuzin usando o método CAM-B3LYP e a função de base 6-31++G(3d,3p). As cargas atômicas foram calculadas usando o método NPA e o meio foi simulado com o modelo de solvente implícito CPCM (água). Após a obtenção da estrutura otimizada, foram calculados os valores de energia das espécies com carga +1 ($qN-1$) e carga -1 ($qN+1$). A partir destes cálculos, foi possível obter os índices de Fukui. Neste caso, o índice analisado foi f^0 , que é relacionado ao ataque de um radical à uma região da molécula; quanto maior o valor deste índice, o átomo possivelmente é mais suscetível a um ataque radicalar. Após a análise do índice f^0 calculado, foi observado que o carbono 8 na estrutura de metribuzin apresenta valor igual a 0,15, indicando sua suscetibilidade a um ataque radical. Esse ataque pode levar a um possível mecanismo de degradação do referido herbicida. A **Figura 1** mostra a região mais reativa da molécula.

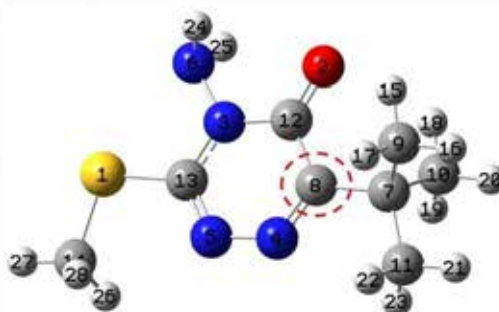


Figura 1. Possível sítio de reatividade para o ataque do radical hidroxila na estrutura de metribuzin.

Portanto, os resultados obtidos neste trabalho sugerem um possível mecanismo de degradação para o herbicida metribuzin. A partir deste estudo, também será possível colaborar com grupos que buscam analisar formas de diminuir impactos ambientais e problemas relacionados com saúde relacionados com o uso de EDs.

Agradecimentos

FAPESP (2018/19103-8 e 2017/10118-0), CNPq e CAPES.

Referências

[1] G. Ghiselli, W. F. Jardim. *Quím. Nova*, 30 (2007) 695.

[2] M. Qutob *et al.*. *RSC Advances*, 12 (2022) 18373-18396.