



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E CULTURA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ – UFPI
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO – PRPPG
Coordenadoria Geral de Pesquisa – CGP**

*Campus Universitário Ministro Petrônio Portela, Bloco 06 – Bairro Ininga
Cep: 64049-550 – Teresina-PI – Brasil – Fone (86) 215-5564 – Fone/Fax (86) 215-5560
E-mail: pesquisa@ufpi.br; pesquisa@ufpi.edu.br*

Estudo conformacional da molécula de herbicida picloram, usando método computacional semi-empírico PM3, para identificar estruturas compatíveis com a atividade biológica deste composto na prevenção de impactos ambientais.

Orientador: Prof^ª. Dr. Francisco Carlos Marques da Silva; **bolsista:** Maicon Oliveira Miranda.

1.0 INTRODUÇÃO

Os herbicidas formam um grupo bastante diversificado de produtos tóxicos, que são sintetizados para o controle de plantas daninhas. Além disso, esses produtos podem se deslocar para ambientes aquáticos propositalmente ou sem que o agricultor não saiba os devidos modos de uso do herbicida através de varias maneira incorreta do seu uso (TOMITA E BEIRUTH, 2002). Dentre as substancias mais utilizadas no controle de plantas daninhas está o picloram, o mesmo é usado nas pastagens brasileiras e se identifica por apresentar alta persistência no solo (BERISFORD et al., 2006), possui uma elevada solubilidade, pequena sorção em água e alto potencial de lixiviação, podendo atingir lençóis freáticos(BOVEY E RICRADSON,1991)

A química computacional vem sendo desenvolvida nas universidades como uma alternativa para a pesquisa em química, sendo já reconhecida pelo fato dos seus resultados e de grande respaldo na comunidade científica (SOUZA, 2004).

A química computacional vem mudando o conceito de Química durante as últimas décadas. Em nossa pesquisa faz-se menção ao programa GAUSSIAN 03W que faz cálculos da química quântica, essa ferramentas traz grande facilidade ao químico teórico nas diversas área do conhecimento da química. Com ela pode se explicar vários compostos químicos antes mesmo de serem sintetizados. (SOUZA, 2004). .

2.0 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

O objetivo deste trabalho é analisar os momentos de dipolo e suas cargas da molécula do herbicida picloram e a análise quantitativa destes através do programa GAUSSIAN 03W.

2.2Objetivos específicos

- Analisar as energias dos orbitais homo e lumo;

- Analisar o potencial eletrostático da molécula;
- Prevê através das cargas uma possível reação química.

4.0 Materiais e métodos

No primeiro momento foi realizada uma pesquisa bibliográfica sobre as características do herbicida picloram ou ácido 4-amino-3,6-tricloropiridina-2 carboxílico e suas devidas aplicações no uso da agroindústria.

5.0 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Um dos parâmetros de analisar por onde uma reação irá acontecer é visualizando a distribuição de suas cargas na molécula, ou seja, o valor quantitativo da carga nos dirá por onde um reagente seja ele, eletrófilo ou nucleófilo irá iniciar a reação, possivelmente, a quebra das ligações intermoleculares do herbicida.

Tabela 1: cargas de Mulliken no método PM3

Átomos	Cargas de Mulliken
1 C	-0,099927
2 C	-0,026966
3 C	-0,117879
4 C	-0,180476
5 Cl	0,098249
6 Cl	0,129866
7 Cl	0,120563
8 C	0,329414
9 O	-0,307884
10 O	-0,253225
11 H	0,222935
12 N	0,025964
13 C	-0,058795
14 N	0,029058
15 H	0,044144
16 H	0,044958

Um dos fatores relacionado à contaminação do picloram estar relacionado diretamente com o momento de Dipolo, o picloram é polar assim como a água uma substância polar e que está em maior abundância no meio agrícola ela traz consigo uma propriedade física bastante peculiar que é a solubilidade, a mesma tem a força de dissolver o herbicida picloram contaminando o solo e aquíferos próximos, a tabela 4 mostra o momento de dipolo do picloran.

Tabela 4: Momento de dipolo.

Base	Momento de Dipolo (Debye)
AM1	4,3949
PM3	4,2163

Finalmente temos as regiões onde de fato toda a reação pode acontecer essas regiões são chamadas de orbitais, os orbitais são regiões onde a máxima probabilidade de se encontrar elétrons, sendo que nessa região há as interações de elétrons, ou seja, a reação

química acontece. foram calculadas as energias dos orbitais homo e lumo do herbicida e a figura 1 mostra que a energia do orbital homo é inferior a energia do orbital lumo.

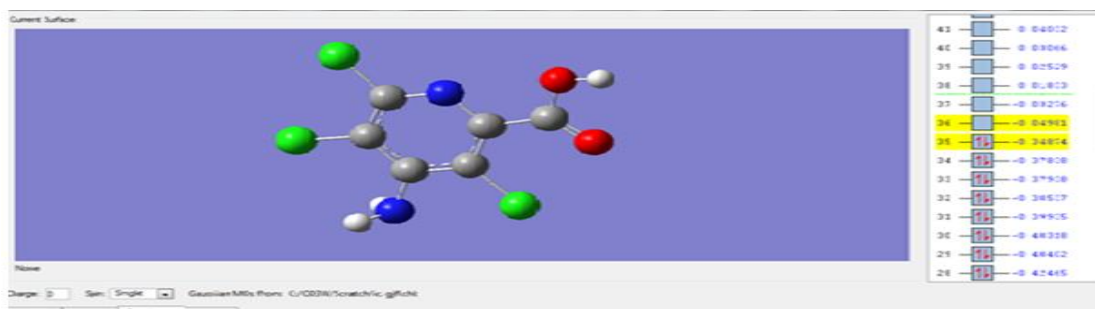


Figura 1: vista geral do picloran dos orbitais homo e lumo na base PM3.

As energias correspondentes dos orbitais homo e lumo são -0,34074 e -0,04941 respectivamente, o fato da energia do orbital lumo ser maior é devido aos orbitais vazios da molécula, ou seja, a não interação dos elétrons por causa da inexistência do mesmo, por outro lado esses orbitais estão prontos para receber elétrons favorecendo assim uma reação química.

6.0 CONSIDERAÇÕES FINAIS.

- Os valores encontrados são simulações teóricas visando ao valor pratico;
- Os encartes de cores vermelhas apresentam uma região rica em densidade eletrônica e a verde deficiente em elétrons.
- Foi apresentados valores de momento de dipolo diferentes de zero comprovando que de fato a substancia é polar;
- Os valores de energia dos orbitais lumo foram superiores aos dos orbitais homo.

7.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BERISFORD, Y.C., BUSH, P.B., JOHN, W., TAYLLOR JR. Leaching and persistence of herbicides for kudzu (*Pueraria montana*) control on pine regeneration sites. **Weed Science**, v.54, p. 391-400, 2006.

BOVEY, R. W.; RICHARDSON, C. W. Dissipation of clopyralid and picloram in soil and seep flow in the blacklands of Texas. **J. Environ. Qual**, v. 20, n. 3, p. 528-531, 1991.

SUSA, RLA, S.; MEDINA, V.F. & MCCUTCHEON, S.C. Phytoremediation: An ecological solution to organic chemical contamination. *Ecol. Eng.*, 18:647-658, 2002.

TOMITA, R.Y., BEYRUTH, Z. Toxicologia de agrotóxicos em ambiente aquático. **Biológico**, v.64, p.135-142, 2002 Pinho, A. P.; Matos, A. T.; Morris, L. A.; Costa, L. M. Atrazine and picloram adsorption in organic horizon forest samples under laboratory conditions. *Planta Daninha*, v.25, n.1, p.125-131, 2007.