Studies of hydrogen bonds between the protonated amino group of chitosan and specific groups of glyphosate.

Lourival R. de S. Neto[1](IC), Roberto R. Faria[1](PG), Renan F. Guerra[1](PG), Eduardo de F. Franca[1](PQ)*, Moacir F.F. Júnior[1] (PG)

*eduardofranca@iqufu.ufu.br

[1] Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Avenida João Naves de Ávila, 2121 - Santa Mônica, Uberlândia - MG, 38408-100

Palavras Chave: *Adsorção, quitosana, glifosato.*

Abstract

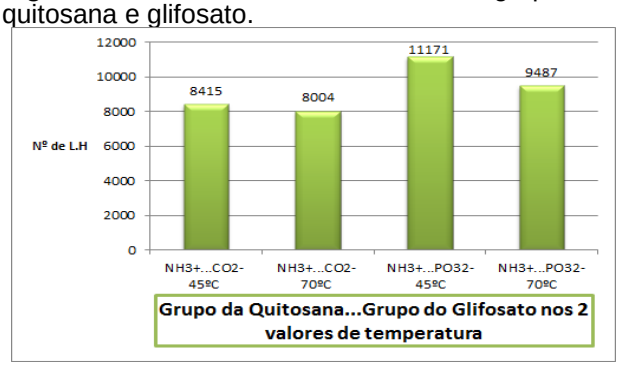
Studies of the number of H-bonds by molecular dynamics were carried out between the glyphosate herbicide and chitosan.

Introdução

A quitina, um dos principais componentes do exoesqueleto de artrópodes, consiste num material orgânico de extrema abundância na natureza, seu principal derivado se chama quitosana e pode ser obtido pelo processo de desacetilação parcial ou total que se trata da conversão de grupos *N*-acetil em grupos amino. A utilização de ambos os polímeros apresenta interesse econômico pra diversas indústrias devido à versatilidade de suas aplicações e de suas atividades biológicas. A quitosana consiste num biomaterial promissor com destaque na capacidade de adsorção de diversos contaminantes ambientais, principalmente os herbicidas. O presente trabalho utiliza-se de *N*-(fosfonometil)-glicina, comercialmente chamado de glifosato, trata-se do herbicida mais comercializado no mundo[1] para interagir com a quitosana em duas temperaturas distintas (45ºC e 70ºC), com a finalidade de elucidar o número de ligações de hidrogênio (L.H) em solução aquosa. O grupo de maior interação da quitosana é o amino protonado (NH_3^+), os grupos de interação do glifosato são: carboxilato (CO_2^-), amino protonado (NH_2^+) e fosfonato (PO_3^{2-}). Este trabalho utiliza-se dos métodos de simulação computacional de Dinâmica Molecular(MD) para análise do promissor potencial da atuação do polissacarídeo como descontaminante ambiental através do processo de quelação[2].

Resultados e Discussão

Figura 1. Número de LH entre os grupos de quitosana e glifosato.



O número de ligações de hidrogênio é superior à 45ºC, o que indica rompimento destas interações com o aumento da temperatura entre o grupo NH_3^+ e os grupos do glifosato. O grupo NH_3^+ interagiu mais com o fosfonato o que classifica-o como um excelente aceptor de ligação de hidrogênio para os diferentes valores de temperatura. O aumento de temperatura não causou um efeito drástico na diminuição do número de ligações de hidrogênio, isso porque as interações de caráter eletrostático são interações fortes. O grupamento amino protonado do glifosato (NH_2^+) e o grupamento amino protonado da quitosana (NH_3^+) possuem carga de mesmo sinal e por isso não interagiram de modo a formar ligações de hidrogênio.

Conclusões

O grupo carboxilato é o que menos interagiu com o grupo amino protonado. O fosfonato foi o que mais interagiu. Este fato confirma a maior intensidade das interações eletrostáticas e modificações estruturais afim de aumentar o número de L.H entre o herbicida e o biopolímero devem ser estudadas afim de aumentar a capacidade de adsorção do glifosato por quitosana.

Agradecimentos

IQ-UFU, LCQC, CNPq, FAPEMIG e Rede Mineira de Química

[1] HU; ZHAO; SOROHAN. Desalination, **2011** v. 271, p. 150-156.
[2] MAZEAU; RINAUDO, Food Hydrocolloids, **2004**, v. 18 (6), p. 885.