

Estudo espectroeletróquímico de herbicidas triazínicos através de espectroscopia Raman intensificada.

Denise S. Cordeiro* (PG), Paola Corio (PQ).

*denise@iq.usp.br

Instituto de Química – Universidade de São Paulo. Av. Prof. Lineu Prestes, 748 -- São Paulo – SP.

Palavras Chave: ametrina, atrazina, SERS, Raman.

Introdução

O efeito Raman intensificado pela superfície (SERS, *surface-enhanced Raman Scattering*) é uma técnica espectroscópica bastante sensível para a detecção de analitos em superfície metálicas e para o estudo de processos de adsorção. Um substrato comumente utilizado em estudos SERS são os eletrodos tratados eletroquimicamente.¹ Tais superfícies podem fornecer, além dos dados espectroscópicos, dados eletroquímicos das moléculas de interesse. Nesse trabalho, investigamos o comportamento espectroscópico e eletroquímico de herbicidas triazínicos (figura 1), uma importante classe de herbicidas, correspondendo à aproximadamente 30% da produção mundial.²



Figura 1. Fórmulas estruturais de alguns herbicidas triazínicos.

Resultados e Discussão

O estudo foi realizado combinando a eletroquímica a espectroscopia Raman *in-situ*. Para tal procedimento foi utilizado uma célula eletroquímica (figura 2) acoplada ao espectrômetro Raman.

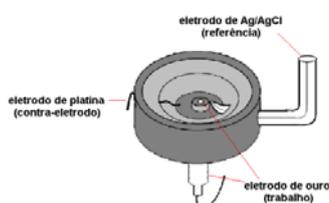


Figura 2. Célula espectroeletróquímica utilizada para a obtenção dos espectros SERS.

Para se obter o efeito SERS é necessário que a molécula esteja adsorvida (ou próxima) à superfície metálica. A resposta a interação da molécula com a superfície metálica pode ser vista através do espectro Raman obtido. Na figura 3 têm-se os espectros da atrazina e da ametrina sólidas e adsorvidas sobre a superfície do eletrodo de ouro. O comportamento desses herbicidas, apesar de terem estruturas parecidas, é diferente. O espectro SERS da ametrina é bastante parecido ao seu espectro em fase sólida. O mesmo não acontece com a

atrazina. O espectro SERS da atrazina tem, por exemplo, seus modos vibracionais referentes aos grupos C-N (1016 e 1250 cm^{-1}) intensificados, sugerindo que a adsorção tenha acontecido preferencialmente pelos nitrogênios da molécula.

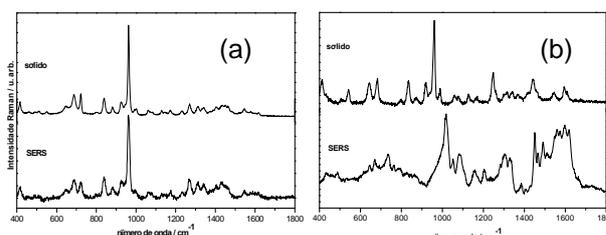


Figura 3. Espectros Raman (sólidos) e SERS sobre eletrodo de ouro: (a) ametrina e (b) atrazina.

O efeito SERS foi também utilizado para o estudo eletroquímicos desses compostos. A figura 4 mostra o conjunto de espectros SERS da ametrina e da atrazina em função do potencial aplicado, nos quais podemos observar a oxidação de cada herbicida.

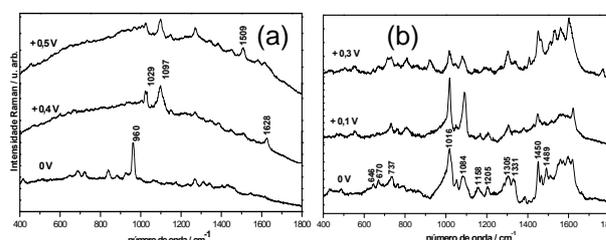


Figura 4. Espectros SERS da (a) ametrina (b) atrazina em eletrodo de ouro em solução aquosa de KCl ($0,1\text{ mol L}^{-1}$) nos potenciais eletroquímicos indicados ($\lambda_0 = 632,8\text{ nm}$). (V vs. Ag/AgCl).

Conclusões

A espectroeletróquímica SERS apresentou-se eficiente para estudar as diferentes maneiras que moléculas com estruturas parecidas podem interagir com a superfície de Au, bem como para avaliar processo redox de herbicidas triazínicos.

Agradecimentos

Agradecemos o apoio do CNPq, Capes e FAPESP.

¹ Wu, D., Liu, X., Duan, S. Xu, X., Ren, B., Lin, S. Tian, Z. *J. Phys. Chem. C.* **112**, 4195 (2008).

² Cabral, M. F.; Souza, D.; Alves, C. R.; Machado, S. A. S. *Eclética Químical* **28**, 41 (2003).