

Determinação de parâmetros termodinâmicos da interação entre o herbicida Glifosato e os íons Cu^{2+} , Ca^{2+} , Zn^{2+} e Al^{3+} .

Flávio Adriano Bastos ¹ (PG)*, José de Alencar Simoni ² (PQ)

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas – Caixa Postal 6154, CEP: 13.083-970 - Campinas – SP – Brasil, *flavioab@yahoo.com.br

Palavras Chave: Glifosato, microcalorimetria, equilíbrio químico, titulação calorimétrica, termodinâmica, herbicida.

Introdução

O objetivo deste trabalho é a determinação de parâmetros termodinâmicos da interação entre o herbicida Glifosato e os nitratos de cobre, cálcio, zinco e alumínio em solução aquosa. Ele é hoje o herbicida mais usado no mundo. Devido à presença dos grupos carboxilato, fosfonato e amina, apresenta grande tendência em formar complexos fortes com metais ^[1].

A técnica utilizada foi a calorimetria por titulação isotérmica (ITC), sendo os experimentos realizados a 298 ± 1 K, pH $\approx 3,30$ e força iônica $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ (KNO_3). Os valores de $\Delta_r H^\circ$ foram calculados pelo “Método das tangentes” ^[2] e, baseado em valores de constantes de formação do complexo Glifosato-metal da literatura ^[3], através de equações clássicas da termodinâmica, determinou-se os valores de $\Delta_r S^\circ$ e $\Delta_r G^\circ$.

Resultados e Discussão

O Método das tangentes baseia-se na premissa de que as constantes de estabilidade apresentam valores elevados. Assim, plotando-se num gráfico os valores de ΣQ_{obs} (calor observado experimentalmente) versus o número de mols de metal adicionado pode-se calcular, através da tangente da curva nos primeiros 3 ou 4 pontos experimentais, o valor de variação de entalpia, conforme apresentado na Figura 1:

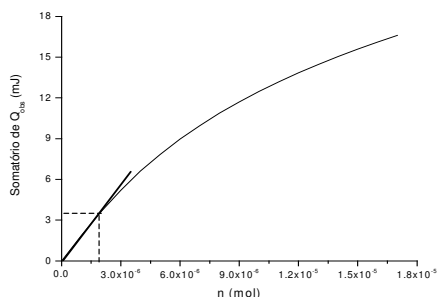


Figura 1. Método das tangentes para Cu^{2+} e Glifosato.

Através das equações 1 e 2, a seguir, calcula-se os valores de $\Delta_r S^\circ$ e $\Delta_r G^\circ$:

$$\Delta_r G^\circ = - R T \ln K \quad (\text{Equação 1})$$

e

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ \quad (\text{Equação 2})$$

Os resultados de $\Delta_r H^\circ$, $\Delta_r S^\circ$, $\Delta_r G^\circ$ da interação do herbicida com os quatro íons são apresentados na tabela 1:

Tabela 1. Resultados dos parâmetros da interação do Glifosato com os íons Ca^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} e Al^{3+} .

	$\Delta_r H (10^3 \text{ J mol}^{-1})$	$\Delta_r G (10^6 \text{ J mol}^{-1})$	$\Delta_r S (10^3 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})$
Ca^{2+}	$+ 0,35 \pm 0,01$	$- 18,8 \pm 1,0$	$+ 63,2 \pm 1,0$
Cu^{2+}	$+ 17,38 \pm 0,46$	$- 67,9 \pm 1,0$	$+ 227,7 \pm 1,0$
Zn^{2+}	$+ 0,68 \pm 0,03$	$- 49,7 \pm 1,0$	$+ 166,6 \pm 1,0$
Al^{3+}	$- 0,27 \pm 0,01$	$- 78,2 \pm 1,0$	$+ 262,3 \pm 1,0$

Conclusões

A partir dos dados da Tabela 1, conclui-se que os processos são entropicamente dirigidos, dado os elevados valores de $\Delta_r S^\circ$ em relação aos de $\Delta_r H^\circ$, que além endotérmicos (exceto o alumínio), apresentam valores bastante inferiores. Além disso, os valores negativos de $\Delta_r G^\circ$ indicam o sentido da ocorrência espontânea dos processos estudados.

Agradecimentos

CNPq, FAPESP, CAPES e Instituto de Química da Unicamp.

¹ Undabeytia, T.; Morillo, E.; Maqueda, C., *J. of Agricultural and Food Chemistry*, **2002**, 50 (7), 1918.

² Jordan, J.; *Treatise on Analytical Chemistry*, **1986**, Part I.

³ Popov et al.; *Pure Appl. Chemistry*, **2001**, 73, 1641.