

Análises de reações de oxidação da atrazina e simazina com H₂O₂ catalisadas por metaloporfirinas *via* cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas

Maria A. Braga de Oliveira (IC), Kelly A. Ribeiro Tagliaferro (PG), Maria A. Carvalho de Medeiros (PQ).

Resumo

A atrazina e a simazina são agroquímicos seletivos da família das s-triazinas. A degradação desses compostos no meio ambiente pela ação de microorganismos é um processo lento que demanda um tempo de meses a anos, dependendo da matriz em que se encontram. Uma das alternativas relatada pela literatura para solucionar esse problema foi o emprego de catalisadores metaloporfirínicos, capazes de mimetizar a família de enzimas do citocromo P-450. Neste contexto, o objetivo do presente trabalho foi estudar as reações de oxidação da atrazina e da simazina por peróxido de hidrogênio, catalisadas por metaloporfirinas de ferro e de rutênio. As análises das reações catalíticas foram realizadas por meio da Cromatografia Gasosa associada à Espectrometria de Massas (GC-MS/MS) e pela Espectrofotometria na região do ultravioleta e visível (UV-Vis).

Palavras Chave: Oxidação, Metaloporfirinas, GC-MS/MS

Introdução

A atrazina(ATZ) e simazina(SIM) são herbicidas seletivos da família das s-triazinas [1]. A degradação desses compostos no meio ambiente pela ação de microorganismos é um processo lento, uma das alternativas para solucionar esse problema foi o emprego de catalisadores metaloporfirínicos. O objetivo deste trabalho foi estudar as reações de oxidação da ATZ e SIM, catalisadas pelas metaloporfirinas (MP) de ferro e rutênio *via* Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas em tandem (GC-MS/MS) e pela Espectrofotometria na região do ultravioleta e visível.

Resultados e Discussão

Nos cromatogramas das reações de oxidação da ATZ e SIM catalisadas por MP de ferro e rutênio, foram determinadas as diminuições das áreas dos picos desses herbicidas durante a reação.

Na Figura 1 tem-se o espectro de massas do desetildesisopropilatrazina, CAS number 3397-62-4 que se formou durante a reação de oxidação da mistura da ATZ com a simazina catalisada por MP de ferro (Figura 2).

O pico do desetildesisopropilatrazina apareceu após o período de 40 minutos de reação, quando os compostos triazínicos foram catalisados pela MP de ferro. Nas reações catalisadas pela MP de rutênio, o pico desse composto apareceu após 80 minutos de reação. Nas reações individuais da atrazina e da simazina o desetildesisopropilatrazina não foi detectado.

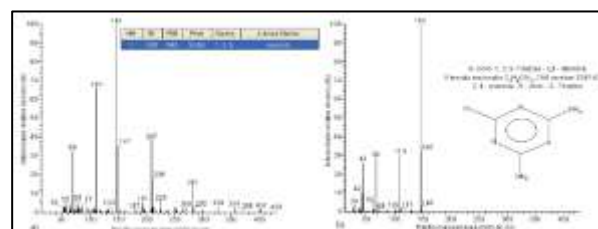


Figura 1: a) Espectro de massas do subproduto da reação em estudo e b) Espectro de massas do desetildesisopropilatrazina da biblioteca NIST.

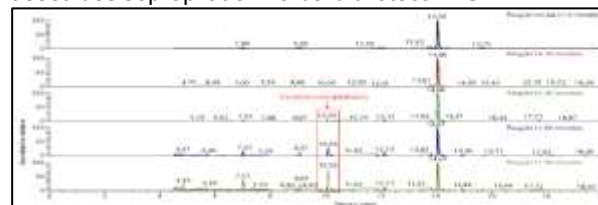


Figura 2: Cromatogramas das reações de oxidação da mistura da atrazina com a simazina catalisada pela metaloporfirina de ferro.

Conclusões

As oxidações da atrazina e simazina foram evidenciadas pelas diminuições das áreas de seus picos cromatográficos, durante o monitoramento das reações, com a formação de outros picos. Na reação da mistura da atrazina com a simazina observou-se o aparecimento do pico da desetildesisopropilatrazina.

Agradecimentos

Ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica PIBIC/CNPq.

¹ HERRI, W.; PFISTER, F.; CARROLL, B.; PARSHLEY, T.; NABORS, J. B. "In": LEBARON, H.M; MC FARLAND, J. E.; BURNSIDE, O. C. *The Triazines Herbicides- 50 years Revolutionizing Agriculture*. 1ª Ed. Elsevier Science, p.13-29,2008