



Serviço Público Federal
Ministério da Educação

Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



Uma abordagem estratégica para agricultura sustentável: Planejamento, síntese supramolecular e caracterização de modificações cristalinas dos herbicidas Ametrina e Atrazina

Doutoranda: Amandha Kaiser da Silva

Orientador: Carlos Eduardo Domingues Nazário

Co-orientador: Paulo Souza Carvalho Júnior

Pesticidas – herbicidas, fungicidas, inseticidas, etc - são agentes moleculares utilizados para o controle de pragas na agricultura. Dado a crescente demanda da população por alimentos e combustíveis, o uso de herbicidas tem sido fundamental para garantir produtividade das culturas. Contudo, a exposição e o uso indiscriminado dos mesmos são um risco ao ambiente e saúde humana. Dentre os herbicidas, a ametrina (AMT) e atrazina (ATZ) são amplamente utilizadas para o cultivo de milho, soja e cana-de-açúcar; porém, apresentam propriedades físico-químicas indesejadas, tal como baixa solubilidade, o que contribui para uma aplicação não efetiva. Neste contexto, a engenharia de cristal multicomponente configura uma estratégia viável para o desenvolvimento de soluções sustentáveis e eficientes através da modificação de propriedades físico-químicas. A seleção de coformadores e protocolos de síntese e cristalização foram projetadas, com base na sistematização de dados estruturais e supramoleculares das moléculas depositadas na *Cambridge Structural Database* (CSD). A abordagem de formação de sais e cocrystalis foi aplicada para AMT e ATZ. Todos os compostos foram caracterizados por difração de raios-X (DRX), calorimetria explanatória diferencial (DSC), análise termogravimétrica (TGA) e espectroscopia vibracional na região do infravermelho (IR). Este estudo elucidou a estrutura cristalina de fumarato de ATZ (ATZ-H₂FUM (1:1)), nitrato de amitrina (AMT-NO₃ (4:1)) e trifluoracético de ametrina (AMT3FAc (1:13)). O cocrystal ATZ-H₂FUM ocorre em duas formas: ATZ-H₂FUM e ATZ-H₂FUM·H₂O. Estes cristais não diferem em sua morfologia e ambos cristalizam no grupo espacial C2/c e Z'=1 estabilizada por *synthons* amino-triazina...ácido. O composto AMT-NO₃ (4:1) cristaliza no grupo espacial P-1 e Z'=1 estabilizada por *synthos* amino-triazina...ácido. Enquanto o composto AMT-3FAc cristaliza no grupo espacial P21/c com o par de íons AMT⁺3FAc⁻ associados via *synthons* amino-triazine...3FAc. Os espectros de IR indicam natureza dos cocrystalis e sais pela identificação do estado não protonado e protonado de AMT e ATZ. Estes sólidos exibem excelente concordância entre os difratogramas de Raios X em pó obtidos experimentalmente e os teóricos simulados a partir da estrutura cristalina. Uma vez que foi obtido uma única fase indicando que o monocristal apresenta alta pureza e homogeneidade. Nas análises de DSC/TGA, foi possível observar que estes sólidos são termicamente mais estáveis em relação a ATZ e AMT puras o que corrobora com a manufatura e produção. Estas diversidades de formas sólidas de herbicidas definem candidatos a novas formulações sólidas de herbicidas aplicadas em doses reduzidas.

Palavras-chave: engenharia de cristais, herbicidas, sustentabilidade.