

Compostos de coordenação de Co(II) e glifosato obtidos por síntese hidrotérmica

Gabriela Guida¹; Wagner Souto Sobral² & Marcelo Hawrylak Herbst³

1. Bolsista PIBIC, aluna de graduação em Química Industrial; 2. Aluno de Doutorado do PPGQ/UFRRJ; 3. Professor do DEQUIM/UFRRJ.

Palavras-chave: glifosato, compostos de coordenação, difração de raios-X

Introdução

O glifosato (N-(fosfonometil)glicina) é um herbicida sistêmico e pós emergente que atualmente representa 60% do mercado mundial de herbicidas não seletivos. O interesse no glifosato como ligante em compostos de coordenação é devido a sua estrutura possuir três grupos doadores: amino, fosfonato e carboxilato, possibilitando ao glifosato se coordenar de forma polidentada [1]. Além disso, como qualquer aminoácido, o glifosato é um *zwitterion*, e sua capacidade coordenante pode ser modulada em função do pH. Uma das propriedades mais estudadas em compostos de coordenação contendo ligantes organofosforados é a porosidade, devido a sua aplicabilidade em áreas como separação molecular, armazenagem de solventes e gases e catálise heterogênea. Por outro lado, o magnetismo desses compostos também tem sido explorado [2]. Condições hidrotérmicas têm sido utilizadas em pesquisas sobre ligantes orgafosfonados, com o objetivo de se obter monocristais. A obtenção de monocristais permite determinar a estrutura cristalina através de análise por difração de raios-X.

Metodologia

Os objetivos deste trabalho são a síntese e a caracterização de complexos de cobalto divalente com o glifosato a partir da metodologia de Han *et al.*, [3] que obteve monocristais do complexo de Co(II) com o glifosato. As reações foram feitas pela mistura de glifosato, acetato de cobalto, HCl 6M, H₂O e etanol, em um reator de aço inox com camisa de PTFE, e a temperatura foi controlada em mufla digital, sob pressão autógena. As sínteses foram projetadas numa razão estequiométrica de 1:1 (glifosato: Co²⁺), e foram realizadas a 80°C, variando o tempo de reação (24 e 48h). Os sólidos obtidos foram caracterizados por espectroscopia no infravermelho (Bruker Vertex 70, PPGQ-UFRRJ). Para a caracterização espectroscópica dos compostos, baseando-se em um critério analítico de identificação de ligações químicas ou de grupos funcionais da molécula, foram usados trabalhos de referência para as principais bandas de absorção no infravermelho atribuídas para o glifosato [4,5].

Resultados e Discussão

Os dois produtos apresentaram bandas na região acima de 3300 cm⁻¹, atribuídas ao estiramento O-H de moléculas de água, e em 1600 e 1420 cm⁻¹, atribuídas respectivamente aos estiramentos antissimétricos e simétricos do grupo carboxilato do glifosato coordenado. Além disso, nos dois espectros foi observada banda em 1000 cm⁻¹, atribuída ao estiramento P-O-Co [6], caracterizando, portanto a coordenação ao centro de Co(II). O produto da reação por 24h apresentou também bandas em 1731 e 912 cm⁻¹, atribuídas respectivamente ao estiramento antissimétrico do grupo carboxilato e ao estiramento P-OH do grupo fosfonato do glifosato não complexado.

Conclusão

As amostras foram encaminhadas para caracterização por difração de raios-X de pó, e os resultados serão apresentados no painel.

Bibliografia

- [1] Fonseca, N. F., Dissertação de Mestrado, UFRRJ, 2011.
- [2] Batten, S. R., Neville, S. M., Turner, D. R.; Coordination Polymers: design, analysis and applications. RSC, Cambridge, UK, 2009.
- [3] Han, G-F. *et al.*; Z. Anorg. Allg. Chem., **2008**, 634, 1991.

[4] Shoval, S., Yariv, S.; *Agrochimica*, **1991**, XXV, 5.

[5] Subramaniam, V.; Hoggard, P. E.; *J. Agric. Food Chem.*, **1988**, 36, 1326.

[6] Nakamoto, K., *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, 5th John Wiley & Sons, New York, 1997.