

**ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DA INTERAÇÃO DE IMIDAZOLPORFIRINAS
BASE-LIVRE COM GLIFOSATO EM SOLUÇÃO AQUOSA ÁCIDA**

CERETTA, G. E.^[1]; BATISTA, O. R. P.^[1]; MAYER, I.^[2]

Este trabalho apresenta a obtenção e a caracterização espectroscópica de uma nova imidazolporfirina, a *meso* tetra(2-metil-1H-imidazol)porfirina base-livre, bem como os estudos preliminares da sua interação em solução aquosa com o herbicida glifosato em diferentes valores de pH ácidos. A síntese das porfirinas bases-livres foi realizada entre derivados de pirrol e imidazolcarbaldeído em ácido acético e acompanhado por espectroscopia de absorção no ultravioleta-visível (UV-Vis), com a visualização da formação da banda Soret ($\lambda = 416$ nm, $\log \epsilon \sim 5,2$) e de quatro bandas Q's de menor intensidade na região de 500 a 650 nm. Após duas horas de reação sob refluxo, removeu-se o solvente num evaporador rotatório e fez-se a purificação das porfirinas em coluna de sílica-gel, usando como eluente uma mistura de metanol e diclorometano. A estrutura dessa porfirina é sensível ao pH, pois além do equilíbrio de protonação/desprotonação dos nitrogênios pirrólicos do centro porfirínico, os quatro grupos imidazol ligados nos carbonos *meso* também podem ser protonados ou desprotonados. A protonação do anel porfirínico desloca a banda Soret de 416 para 445 nm e aumenta sua intensidade de absorção ($\log \epsilon \sim 5,3$) devido ao efeito de um aumento da simetria local, em conjunto com a formação de apenas duas bandas Q's (~590 e ~660 nm). Comportamento semelhante ocorre ao se coordenar um íon metálico no anel porfirínico. Esse processo apresenta pontos isobésticos bem definidos na região de 430 e 540 nm, representando equilíbrios simples entre cada par de espécies envolvidas. O comportamento espectral da tetra(imidazol)porfirina na presença de sucessivas adições de alíquotas de glifosato, na faixa de micro a milimolar, demonstrou uma maior variação espectral das bandas da porfirina a medida que o pH da solução era aumentado. Por exemplo, comparando-se em pH ácidos de 1,5 a 4,0, evidencia-se principalmente para a banda Soret, uma diminuição de absorbância, sendo mais significativa em pH 4,0 quando comparado a pH menor que 2,0. Tal fato sugere que, devido ao anel porfirínico e os grupos imidazol estarem protonados, há um acúmulo de carga positiva na estrutura. O glifosato em pH abaixo de

2,0 encontra-se com sua estrutura em maior predominância neutra ($pK_{a2} = 2,6$) ou monocatiônica ($pK_{a1} = 0,8$). Logo, as possíveis interações intermoleculares não serão tão favorecidas por causa da repulsão eletrostática, mesmo com possibilidade de ligações de hidrogênio presentes. Já na faixa de $2,0 < pH < 4,0$ há uma maior possibilidade de interações, tanto por via eletrostática quanto ligações de hidrogênio. Isso é corroborado pelo fato do centro porfirínico agora estar neutro, os grupos imidazol protonados e o glifosato predominantemente monoaniônico ($pK_{a3} = 5,6$). Portanto, com esses estudos até aqui desenvolvidos, há interessantes perspectivas para aplicações desses derivados de *meso* tetra(imidazol)porfirinas base-livre como materiais para interfaces transdutoras (direta ou indiretamente) no sensoriamento iônico de espécies de glifosato em solução aquosa. E, isso é possível ao se compreender as propriedades espectroscópicas dessas *meso* tetra(imidazol)porfirinas base-livre, e suas variações, quando na presença de glifosato em solução aquosa ácida, o que ainda apresenta-se atualmente como uma lacuna de conhecimento.

Palavras-chave: Água; Interação; Pesticida; Porfirinas.

Área do Conhecimento: Engenharias.

Origem: Pesquisa.

Instituição Financiadora/Agradecimentos: Universidade Federal da Fronteira Sul UFFS.

Aspectos Éticos: Não se aplica.

[1] Eduarda Grunwald Ceretta. Engenharia Ambiental e Sanitária. Universidade Federal da Fronteira Sul. Eduarda.c1516@gmail.com

[1] Paulo Roberto Oliveira Batista. Engenharia Ambiental e Sanitária. Universidade Federal da Fronteira Sul. pauloroberto3352@gmail.com

[2] Ildemar Mayer. Docente do curso de Engenharia Ambiental e Sanitária da UFFS. ildemar@uffs.edu.br