
ESTUDO COMPARATIVO DOS ARRANJOS SUPRAMOLECULARES DO MONURON E DIURON POR SUPERFÍCIE HIRSHFELD E TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE ELETRÔNICA.

SILVA, Thais Teles

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Goiânia

AGUIAR, Antônio Sérgio Nakao

Universidade Evangélica de Goiás, Câmpus Anápolis

COSTA, Rogério Ferreira

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Goiânia

Os herbicidas são uma alternativa capaz de conter o avanço de ervas daninhas nas lavouras, que aumenta o custo dos alimentos. O Monuron e o Diuron são herbicidas feniluréias e seu mecanismo de ação atua na destruição do fotossistema II das plantas. O Monuron foi proibido, devido à possibilidade de carcinogenicidade, e o Diuron apresentou resistência no controle de pragas. Estudos têm sido realizados para modificar essa situação, pois compreender as interações intermoleculares e suas propriedades químicas e as zonas de ancoragem da molécula significa entender melhor a base molecular das mutações que produzem resistência a esses agentes. A partir dos arquivos de informação cristalográfica obtidos no Cambridge Structural Data Center, realizou-se uma análise dos compostos Monuron (3-(p-Chlorophenyl)-1,1-dimethylurea) e Diuron (N-(3,4 Dichlorophenyl)-N',N'-dimethylurea) por meio de seus orbitais moleculares de fronteira e Mapas de Potencial Eletrostático implementados no pacote de programas Gaussian09, por meio do funcional M06-2X e do conjunto de base de Pople 6-311 ++ G (2d, 2p). Além disso, os arranjos supramoleculares, caracterizados pelas superfícies de Hirshfeld, foram estudados. Os resultados mostraram que a inserção do Cl2 na posição *meta* do anel benzeno diminuiu a superfície de contato na interação C...H e aumentou a contribuição da interação Cl1...H, mas apenas no Diuron a interação é forte. Pelos orbitais moleculares de fronteira, verificou-se que o Monuron tem um caráter ligeiramente básico e o Diuron, ligeiramente ácido. Observou-se também que o Monuron é mais reativo quando os elétrons desemparelhados se encontram nos orbitais a e menos reativo quando os elétrons desemparelhados se encontram nos orbitais b. As feniluréias possuem regiões nucleofílicas

em torno do cloro e do oxigênio e regiões eletrofílicas nas adjacências dos grupos metila e anel benzeno. Essas características conferem às moléculas polaridade. Observou-se que o Cl_2 eduziu a distribuição eletrônica na molécula, devido à sua capacidade de atrair elétrons.

Palavras-chave

Erva daninha, Herbicidas, Superfície de Hirshfeld, DFT.