

Previsão da Energia de Adsorção do Fipronil em Nanotubos de Carbono

Felippo B. de Lima^{1*} (IC), Thales C. Vieira¹ (IC), Neubi F. X. Junior² (PQ), Glauco F. Bauerfeldt¹ (PQ)

¹Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil. ²University of Surrey, Inglaterra.

*E-mail do autor correspondente: felippo.batista@gmail.com

Palavras Chave: Nanotubos de Carbono, Fipronil, PM6, Sensores Eletroquímicos, CNT, Adsorção

Introdução

Atualmente, no Brasil, tem sido comum a aplicação de Fipronil como inseticida tanto para uso agrícola como veterinário. O uso desenfreado e descarte inadequado de agrotóxicos e medicamentos farmacêuticos acarreta, entretanto, na poluição ambiental,¹ sendo importante propor novas tecnologias em prol da determinação rápida e acurada dos níveis de fipronil em corpos hídricos. Para tanto, sensores eletroquímicos podem ser uma solução adequada.

Os nanotubos de carbono (CNT) apresentam propriedades eletrônicas, óticas e mecânicas muito interessantes e têm sido usados na confecção de diferentes tipos de dispositivos, incluindo sensores.² Neste trabalho, a ação de CNT como sensores eletroquímicos para a detecção do fipronil é investigada por métodos teóricos. Especificamente, busca-se investigar as interações específicas entre fipronil e CNT e quantificar a energia de adsorção por método teórico, PM6. O programa Gaussian 09 foi utilizado.

Resultados e Discussão

Inicialmente, buscou-se localizar a geometria de menor energia do fipronil através de cálculos de otimização de geometria para diferentes conformações possíveis. A estrutura mais estável (Figura 1) apresenta uma forte interação eletrostática entre os átomos de hidrogênio do grupo NH₂ do anel pirazólico e a ligação do oxigênio com o enxofre.

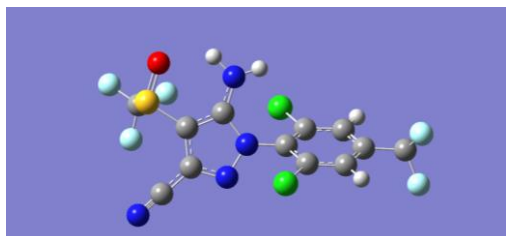


Figura 1: Geometria de Menor Energia do Fipronil, obtida em nível PM6.

O modelo de CNT adotado nesse trabalho foi um SWNT[10,0] de comprimento 15 Å. Esse modelo foi previamente otimizado em nível PM6 e, então, modos de adsorção de fipronil foram testados,

considerando tanto a adsorção em paredes quanto nas bordas.

Observando os parâmetros otimizados de energia de adsorção do fipronil na borda do sensor (Figura 2) é visível que o CNT tenha a preferência de adsorver fipronil através da interação com o átomo de enxofre, observando também forte interação entre o carbono do anel aromático e um dos cloros de seu grupo funcional com os átomos de carbono do CNT. A energia de adsorção obtida foi -7,74 eV (incluindo as correções de energia de ponto zero vibracional).

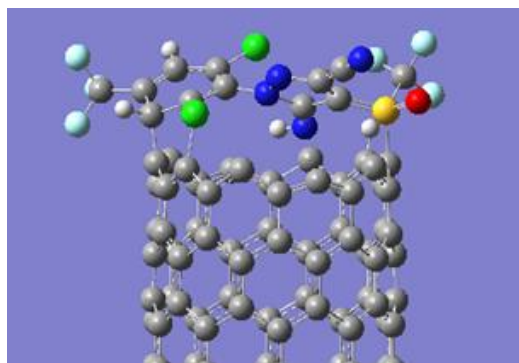


Figura 2. Molécula de fipronil adsorvida no nanotubo de carbono SWNT[10,0].

Conclusões

Pode-se afirmar que é possível criar um nano(bio)sensor eletroquímico constituído de carbono, por conta de suas propriedades únicas em níveis atômicos partindo de unidades nanométricas, sendo viável a adsorção do fipronil encontrada em áreas superficiais da água doce.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da FAPERJ (Edital Nº 47/2021 – Apoio Ao Desenvolvimento Científico E Tecnológico Regional No Estado Do Rio De Janeiro (Dctr) – 2021).

1. MONTAGNER, C. C.; VIDAL, C.; ACAYABA, R. *Química Nova*, **2017**, *40* (9), 1094–1110.

2. FILHO, A.G.S.; FAGAN, S.B. *Quim. Nova*, **2007**, *30* (7), 1695-1703.