

**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS APLICADAS E EDUCAÇÃO**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA E MEIO AMBIENTE**

**GABRIELA CRISTINA DA SILVA SOARES**

**ANÁLISE QUANTITATIVA DE PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS DE**  
**AGROTÓXICOS EM INDÚSTRIA CANAVIEIRA EM REGIÃO**  
**COSTEIRA DA PARAÍBA**

**Rio Tinto/PB**  
**2012**

**GABRIELA CRISTINA DA SILVA SOARES**

**ANÁLISE QUANTITATIVA DE PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS DE  
AGROTÓXICOS EM INDÚSTRIA CANAVIEIRA EM REGIÃO  
COSTEIRA DA PARAÍBA**

Monografia apresentada ao Curso de Bacharelado em Ecologia da Universidade Federal da Paraíba/*Campus* IV, como requisito para a obtenção do título de Bacharel em Ecologia.

**Orientador: Prof. Dr Marcus Tullius Scotti**

**Rio Tinto/PB  
2012**

S676a Soares, Gabriela Cristina da Silva.

Análise quantitativa de parâmetros físico-químicos de agrotóxicos em indústria canavieira em região costeira da Paraíba / Gabriela Cristina da Silva Soares. – Rio Tinto: [s.n.], 2012.

39f.: il. –

*Orientador: Marcus Tullius Scotti.*

*Monografia (Graduação) – UFPB/CCAE.*

1. Toxicidade do solo. 2. Defensivos agrícolas. 3. Indústria canavieira – Paraíba.

UFPB/BS-CCAE

CDU: 631.453(043.2)

**GABRIELA CRISTINA DA SILVA SOARES**

**ANÁLISE QUANTITATIVA DE PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS DE  
AGROTÓXICOS EM INDÚSTRIA CANAVIEIRA EM REGIÃO  
COSTEIRA DA PARAÍBA**

**Data:** \_\_\_/\_\_\_/\_\_\_

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Dr. Marcus Tullius Scotti  
Universidade Federal da Paraíba  
(Orientador)

---

Eng. Agr. Dr. Carlos Henrique de A. Farias  
Empresa Miriri Alimentos e Bioenergia

---

Dra. Luciana Scotti  
Universidade Federal da Paraíba

*"De Davi. O Senhor é minha luz e  
minha salvação, a quem temerei?  
O Senhor é o protetor de minha  
vida, de quem terei medo?".  
(Salmo 26,1)*

Aos meus pais, Valdecir de Azevedo Soares e Neuza Ana da  
Silva Soares.

Aos meus irmãos Miguel Wagner Souza Soares e Rafael da  
Silva Soares, dedico.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus, por ter sido a minha força e por ter iluminado meu caminho para que eu pudesse concluir mais uma etapa da minha vida, pois sem ele nada teria sido possível.

A minha família agradeço a dedicação, amor e apoio recebidos sempre.

Ao Professor Dr. Marcus Tullius Scotti, por toda orientação ao longo do curso, apoio, conselhos, paciência, conversas, ensinamentos e amizade.

Aos Professores do curso de Bacharelado em Ecologia por suas aulas e atenção.

As minhas tias Ozane e Maria Aparecida pelo apoio nos momentos difíceis e pela força.

Aos amigos que fiz durante o curso, em especial a Déborah, Marcus Raffael, Izolda, Alexandre e Juscelino pela verdadeira amizade e por todos os momentos que passamos juntos durante esses quatro anos.

Ao meu namorado Robson da Fonseca Rodrigues por ter sempre me apoiado.

A todos os amigos do laboratório de Ecologia Química, pelo convívio e alegrias compartilhadas.

À Empresa Miriri Alimentos e Bioenergia S/A pelo acolhimento, e fornecimento dos nomes dos defensivos agrícolas.

A Luciana Scotti e Lélia Scotti por serem uma referência na vida minha e pela amizade.

A Universidade Federal da Paraíba pelo apoio na divulgação dos trabalhos realizados e demais necessidades.

A minha madrinha Wilsa Cardoso Padilha por ser um exemplo de fé, pelo apoio e amizade.

Aos irmãos de comunidade em especial as minhas coordenadoras Joseana e Francisca, assim como a minha Madrinha Janaína pela compreensão e apoio sempre.

*"O verdadeiro conhecimento, como qualquer outra coisa de valor,  
não é para ser obtido facilmente.  
Deve-se trabalhar por ele, estudar por ele, e mais que tudo,  
rezar por ele."*

**Thomas Arnold**

## Resumo

O estudo quantitativo das propriedades físico-químicas de compostos pode ser realizado empregando o coeficiente de sorção do solo ( $K_{OC}$ ). A medição experimental deste é um processo difícil, caro e demorado, portanto, é necessário um grande esforço na estimativa de valores de  $K_{OC}$  através de modelagem estatística. Este trabalho identificou as propriedades físico-químicas relevantes para o valor de  $K_{OC}$  dos defensivos agrícolas, utilizados pela indústria canavieira Miriri Alimentos e Bioenergia S/A, por meio de descritores GRIND (*GRid INdependent Descriptors*). Este estudo de relação entre estrutura-propriedade (QSPR) indica que o tamanho, a presença de anéis aromáticos e halogênios aumentam os valores de  $K_{OC}$ .

**Palavras chave:**  $K_{OC}$ ; descritores; defensivos agrícolas.

## **ABSTRACT**

The quantitative study of physico-chemical properties of compounds can be done using the soil sorption coefficients (Koc). The experimental measurement this process is difficult, expensive and time-consuming, thus is necessary a big effort has been put into attempting the estimation of Koc through statistical modeling. This study is identified the physico-chemical properties relevant to Koc pesticides values, used by Miriri agroindustry Food and Bioenergy S/A, using descriptors GRIND (*GRid INdependent Descriptors*). The quantitative study structure–property relationships (QSPR), indicates that the size, presence of aromatic rings and halogens increases the values Koc.

**Keywords:** Koc; descriptors; pesticides.

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO .....	13
2. MATERIAIS E MÉTODOS.....	16
3. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	18
4. CONCLUSÃO.....	31
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	32
ANEXO.....	35

**MANUSCRITO A SER SUBMETIDO À REVISTA QUÍMICA NOVA**

**ANÁLISE QUANTITATIVA DE PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS DE AGROTÓXICOS EM INDÚSTRIA CANAVIEIRA EM REGIÃO COSTEIRA DA PARAÍBA**

**Gabriela Cristina da Silva Soares\* e Marcus Tullius Scotti**

Departamento de Engenharia e Meio Ambiente, Universidade Federal da Paraíba, CEP 58297-000 Rio Tinto - PB, Brasil.

[gaby.ecologia@gmail.com](mailto:gaby.ecologia@gmail.com)

## **ABSTRACT**

The quantitative study of physico-chemical properties of compounds can be done using the soil sorption coefficients (Koc). The experimental measurement this process is difficult, expensive and time-consuming, thus is necessary a big effort has been put into attempting the estimation of Koc through statistical modeling. This study is identified the physico-chemical properties relevant to Koc pesticides values, used by Miriri agroindustry Food and Bioenergy S/A, using descriptors GRIND (*GRid INdependent Descriptors*). The quantitative study structure–property relationships (QSPR), indicates that the size, presence of aromatic rings and halogens increases the values Koc.

**Keywords:** Koc; descriptors; pesticides.

## 1. INTRODUÇÃO

A demanda do crescimento da população mundial por alimentos e fibras, juntamente com as fontes produtoras de energia provenientes da agricultura; como, por exemplo, a cana-de-açúcar, para obtenção do álcool etanol, requer uma agricultura que produza grande quantidade por área cultivada, para isso são necessárias boas práticas agrícolas como, por exemplo, a irrigação e a utilização dos defensivos agrícolas para combater as perdas causadas nas colheitas. O grande desafio está em produzir e aplicar os defensivos agrícolas sem afetar o meio ambiente e os recursos naturais<sup>1</sup>.

Com relação à produção de energia a partir da agricultura, os Estados Unidos é o maior produtor mundial de etanol e também o maior importador, sendo o Brasil o maior exportador e o segundo maior produtor, este possui 438 usinas em pleno funcionamento, produzindo 27,5 bilhões e exportando cinco bilhões de litros de etanol<sup>2</sup>, assim como há 2,9 milhões de hectares em que se cultiva cana-de-açúcar destinada à produção de etanol, e outros 3,2 de hectares utilizados na produção de açúcar. Somadas essas áreas, ocupa-se aproximadamente 10% da área cultivável do território nacional<sup>3</sup>.

A produtividade de cana-de-açúcar no nordeste apresenta pouco mais de 70 milhões de toneladas, representando 10,4 % da produção nacional, estando a Paraíba responsável por 6 milhões de toneladas, o equivalente a 9% da produção do Nordeste<sup>4</sup>. Assim sendo, pode-se considerar a cana-de-açúcar o produto dentro da agropecuária mais importante para o estado<sup>5</sup>.

De acordo com Baird (2002), os defensivos agrícolas são substâncias que podem matar diretamente um organismo indesejável ou controlá-lo de alguma maneira, como por exemplo: interferindo no seu ciclo reprodutivo.<sup>6</sup> Estes podem ser classificados: a partir da função (organismo - alvo); a estrutura química de suas substâncias ativas; e segundo os efeitos nocivos à saúde humana e ao ambiente<sup>7</sup>.

Em 2008, o Brasil alcançou a liderança no consumo mundial de defensivos agrícolas, com um volume estimado de 673 milhões de toneladas de ingredientes ativos, equivalente a US\$ 7,1 bilhões. Desta forma, se faz necessário intensificar os estudos relacionados com o impacto ambiental destes compostos, pois a presença de resíduos de defensivos agrícolas tem sido verificada nos diferentes compartimentos ambientais (água, solo, ar)<sup>8</sup>.

A Toxicologia Ambiental é o estudo dos efeitos nocivos de substâncias estranhas sobre os seres vivos, que normalmente estão submetidos a exposições em longo prazo de doses individuais relativamente baixas de um produto químico tóxico presente no ar que respiramos, na água que bebemos ou nos alimentos que comemos, que de um modo geral, podemos apresentar como consequência dessas exposições contínuas, por exemplo, câncer ou defeitos congênitos. A avaliação da contaminação ambiental dos diversos ecossistemas é feita com base nos estudos das propriedades físico-químicas dos defensivos agrícolas<sup>6</sup>.

Uma vez na água, dependendo das características físico-químicas, o resíduo do defensivo agrícola pode se ligar ao material particulado em suspensão, se depositar no sedimento do fundo ou ser absorvido por organismos, podendo então ser transportado através do sistema aquático por difusão nas correntes de água ou nos corpos dos organismos aquáticos<sup>9</sup>. Nas plantas, nos solos ou na água, os defensivos agrícolas podem incorporar-se á cadeia alimentar, a partir do processo de biomagnificação, que resulta de uma série de etapas de bioacumulação, que ocorrem ao longo da cadeia alimentar<sup>10</sup>.

O estudo das propriedades físico-químicas das substâncias pode ser realizado utilizando o coeficiente de sorção do solo ( $K_{OC}$ ) para descrever o potencial de poluição de um agrotóxico orgânico não iônico, sendo este um parâmetro que expressa a razão entre a concentração de químicos no solo e na água, para carbono orgânico por meio de uma grande variedade de interações intermoleculares entre a substância química, a matéria orgânica do solo e sedimentos<sup>11</sup>, os processos de sorção desempenham um papel importante na determinação do destino ambiental, distribuição e persistência dos produtos químicos a partir da avaliação da mobilidade destes no solo, principalmente quando submetidos à lixiviação ou escoamento superficial<sup>14</sup>, assim como pode se utilizar o coeficiente de partição octanol-água,  $K_{ow}$ , que refere-se ao grau de afinidade da molécula do pesticida pela fase polar (representada pela água) ou apolar (representada pela substância 1-octanol)<sup>12</sup>. O  $K_{ow}$  é uma medida que define a hidrofobicidade de um composto orgânico e é um parâmetro comumente utilizado na área ambiental, que está fortemente correlacionado com o  $K_{oc}$ <sup>13</sup>.

Quanto menor for o valor de  $K_{ow}$ , maior será o potencial de lixiviação do herbicida. Por sua vez, quanto maior for o valor de  $K_{oc}$ , maior será sua sorção ao solo<sup>12</sup>. Em geral, quanto maior for o coeficiente de partição  $K_{ow}$  octanol-água, maior será a probabilidade de encontrar o

produto químico na matéria orgânica de solos e sedimentos, e finalmente, de ocorrer migração para os tecidos gordurosos de organismos vivos. Porém, valores de log Kow de 7,8 ou maiores são indicativos de produtos químicos capazes de adsorver fortemente aos sedimentos, o que tornará realmente improvável que adquiram mobilidade suficiente para introduzir-se nos tecidos vivos. Por essa razão, os produtos químicos com valores de log Kow na faixa de 4-7 são os que se bioconcentram em maior grau<sup>6</sup>.

A medição experimental de Koc é um processo difícil, caro e demorado, portanto, um grande esforço tem sido em colocar a estimativa de Koc através de modelagem estatística<sup>14</sup>. Para isso se faz necessário o emprego de ferramentas computacionais, a representação molecular e a utilização de cálculos teóricos obtidos por descritores moleculares, como os índices topológicos, índices de informação, entre outros, a partir de interações intermoleculares – estéricas, eletrostáticas e lipofílicas entre agrotóxicos e componentes do solo. Assim como várias aplicações de estudos de QSAR /QSPR (relação quantitativa entre a estrutura química atividade biológica/propriedade) com descritores moleculares estão relacionadas com problemas ambientais<sup>11</sup>. Este trabalho tem como objetivo fazer o levantamento dos agrotóxicos utilizados pela indústria canavieira Miriri Alimentos e Bioenergia S/A, localizada na Fazenda Miriri, zona rural de Santa Rita - PB, identificar as propriedades físico-químicas presentes nestes, que são responsáveis pela bioacumulação, assim como prever os valores de Koc para as estruturas químicas dos princípios ativos dos agrotóxicos.

## 2. MATERIAIS E MÉTODOS

### Série de compostos

Foi realizada uma visita a agroindústria Miriri Alimentos e Bioenergia S/A na Fazenda Miriri, zona rural de Santa Rita - PB, onde por meio de entrevista, foram obtidos os nomes de 20 agrotóxicos utilizados por esta, e seus respectivos rótulos.

Em seguida foi realizada a busca pelos seus respectivos princípios ativos no banco de dados PubMed<sup>15</sup>. As estruturas (**figura 1.**) dos princípios ativos 2D (duas dimensões) foram desenhadas utilizando-se as ferramentas disponíveis no programa computacional ACD/ChemSketch v12.01<sup>16</sup>. As estruturas das moléculas obtidas foram submetidas à otimização de geometria e análise conformacional, utilizando o software Hyperchem v. 8.03<sup>17</sup>, onde foi utilizado inicialmente o método de mecânica molecular MM+<sup>18</sup> e a seguir o método quântico semi-empírico RM1 (Recife model 1) utilizando cálculos de orbital molecular<sup>19</sup>, sendo este a reparametrização do método AM1 (Austin Model 1)<sup>20</sup>.

### Cálculo dos descritores moleculares do modelo publicado por Gramatica e colaboradores em 2007<sup>14</sup>.

Foram realizadas buscas de modelos de QSAR/QSPR, assim como a seleção destes para interpretação e cálculo dos descritores utilizando o software DRAGON v. 5.4 e predição de log de Koc dos compostos orgânicos não iônicos. O modelo (**equação 1**) utilizado foi o publicado por Gramatica e colaboradores em 2007, que foi aplicado a 643 compostos.<sup>14</sup>

Um descritor molecular pode ser considerado como sendo o resultado obtido de procedimento lógico e matemático, aplicado às informações químicas codificadas através de uma representação simbólica de uma molécula<sup>21</sup>. Este procedimento transforma estas informações em um valor numérico associado a uma propriedade molecular importante para posterior análise (exemplo: lipofilicidade) ou a um respectivo parâmetro experimental (exemplo: coeficiente de partição)<sup>22</sup>.

## **Cálculo dos descritores moleculares 3D**

As estruturas dos princípios ativos dos agrotóxicos e os seus respectivos valores de log Koc experimental, foram importados para o software VolSurf. Neste, o programa GRID gera um campo de interação molecular conhecido como MIF (*Molecular Interaction Field*), e a seguir descritores independentes de alinhamento (GRIND - *GRid-INdependent Descriptors*), que são especificamente propostos para caracterizar as interações ligante-receptor<sup>23</sup>. O MIF baseia-se no potencial de energia total de interação entre uma molécula alvo e uma sonda, que pode ser um átomo ou uma molécula, como a de água, por exemplo, e mapeia as forças químicas existentes entre estas<sup>24</sup>.

As sondas GRIDs são seletivas e o uso inteligente destas permite coletar dados das propriedades de campos moleculares, que podem empregados em estudos de seletividade, QSAR e QSAR-3D<sup>25</sup>. Para a geração dos modelos de PLS (*Partial Least Squares* – método dos mínimos quadrados parciais)<sup>26</sup>, foram selecionadas as sondas H<sub>2</sub>O (sonda hidrofílica), DRY (sonda hidrofóbica), NH (sonda amídica-doadora de ligações de hidrogênio) e O (sonda carbonílica-aceptora de ligações de hidrogênio).

## **Análise estatística**

Campos moleculares de interação 3D podem ser automaticamente convertidos em descritores moleculares mais simples, usando-se um procedimento chamado VolSurf (do inglês VOLume and SURFace), tendo este como conceito básico transformar as informações presentes em campos moleculares de mapas 3D em um número limitado de descritores quantitativos numéricos que são fáceis de entender e interpretar<sup>26</sup>. Estes descritores podem ser usados para a construção de modelos multivariados. O VolSurf foi desenvolvido principalmente para estabelecer a relacionar estrutura química e suas propriedades<sup>27</sup>.

Empregou-se o método PLS (*Partial Least Squares* – método dos mínimos quadrados parciais) para correlacionar os dados, com o objetivo de se construir um modelo para a predição de valores de Koc, usando-se o software VolSurf. O PLS é uma ferramenta quimiométrica utilizada para extração e racionalização de informações a partir de descritores multivariados de

sistemas biológicos, a partir de duas matrizes menores, nomeadamente de gráfico de “score”, o qual quantifica a distribuição dos compostos e o gráfico de “loading”, o qual quantifica a contribuição dos descritores para o modelo, estes condensam as informações reduzindo a complexidade e simplificando os dados. Para a série de moléculas importadas para o VolSurf foram produzidas vários descritores, de acordo com o número de sondas<sup>26</sup>. O número de variáveis latentes (LV) significativas como também a seleção de variáveis originais foram realizados por validação cruzada, utilizando-se a opção *leave- one- out*. O modelo com maior valor de coeficiente de validação interna ( $Q^2_{cv}$ ) foi selecionado<sup>28</sup>.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram obtidas as estruturas dos princípios ativos dos agrotóxicos sendo 11 herbicidas, 4 maturadores, 1 cupinicida, 2 nematocidas e 2 inseticidas, (**figura 1**), utilizados pela Empresa Miriri Alimentos e Bioenergia suas respectivas classificações toxicológicas e grupos químicos, que estão apresentados na (**tabela 1**), com relação aos agrotóxicos “roundup wg” e “glifosato atamor 48”, estes apresentaram os mesmos princípios ativos.

**Tabela 1.** Listagem dos agrotóxicos utilizados pela Empresa Miriri Alimentos e Bioenergia, seus respectivos usos, classificação toxicológica e grupo químico.

<b>Nome/Princípio ativo</b>	<b>Uso</b>	<b>Classificação toxicológica</b>	<b>Grupo químico</b>
Fusilade 250 ew (fluazifope-p-butílico)	Herbicida	III/Medianamente tóxico	Ácido ariloxifenoxipropiônico
Glifosato atamor 48 (Glifosato)	Herbicida	III/Medianamente tóxico	Glicina substituída
Curavial (sulfometuron metil)	Maturador	III/Medianamente tóxico	Sulfoniluréias
Moddus (trinexapaque-etílico)	Maturador	III/Medianamente tóxico	Ácido dioxociclohexanocarboxílico
Boral 500 SC (Sulfentrazona)	Herbicida	IV/ Pouco tóxico	Triazolona
Gamit star (clomazona)	Herbicida	III/Medianamente tóxico	Isoxazolidinona
Butiron (tebutiurom)	Herbicida	II/ Altamente tóxico	Uréia
Advance (diuron+hexazinona)	Herbicida	III/ Medianamente tóxico	Diuron e triazinona
Broker 750 wg (hexazinona)	Herbicida	I/Extremamente tóxico	Triazinona
Dinamic (amicarbazone)	Herbicida	II/ Altamente tóxico	Triazolinona
Gesapax 500 ciba-geigy (Ametrina)	Herbicida	IV/Pouco tóxico	Triazinas
Helmoxone (Paraquat)	Herbicida	I/Extremamente tóxico	Bipiridílio
Aminol 806 (2,4 d amina)	Herbicida	I/Extremamente tóxico	Ácido ariloxialcanóico
Roundup wg (Glifosato)	Herbicida	IV /Pouco tóxico	Glicina substituída
Callisto (mesotriona)	Herbicida	III/ Medianamente tóxico	Tricetona
Regent 800 wg (Fipronil)	Cupinicida	II / Altamente tóxico	Pirazol
Altacor (Clorantraniliprole)	Inseticida	III/ Medianamente tóxico	Antranilamida
Certero (Triflumurom)	Inseticida	IV/ Pouco tóxico	Benzoiluréia
Furadan 350 SC (carbofurano)	Nematicida	I /Extremamente tóxico	Metilcarbamato de benzofuranila
Plateau (Imazapique)	Nematicida	III /Medianamente tóxico	Imidazolinona

## Resultados utilizando os descritores do modelo de Gramatica e colaboradores em 2007.

O modelo selecionado foi o seguinte a (equação 1)<sup>14</sup>.

$$\begin{aligned} \log K_{oc} = & -1.92(\pm 0.11) + 2.07(\pm 0.06)VED1 \\ & - 0.31(\pm 0.01)nHA_{cc} - 0.31(\pm 0.02)MAXDP \\ & - 0.39(\pm 0.05)CICO \end{aligned} \quad \text{equação 1.}$$

(n= 643,  $r^2=0.79$ ,  $s=0.547$ ,  $Q^2_{cv}= 0.79$ ,  $Q^2_{boot}= 0.79$ ,  $RMSE=0.545$ ,  $RMSEP_{LOO} = 0.550$ ).

A equação selecionada apresenta quatro descritores, que pertencem a diferentes blocos. Os valores de Koc preditos foram gerados pela (**equação 1**) para as estruturas dos princípios ativos de 1-14 (**figura 1**) utilizando o modelo de Gramatica e colaboradores publicado em 2007<sup>14</sup>, sendo que segundo este trabalho o modelo deve ser utilizado para compostos orgânicos não iônicos, sendo assim foi verificada a presença de 5 compostos iônicos 15-19 (**figura 1**) nesta série que não foram incluídos nos cálculos. Os valores de Koc predito estão apresentados na (**tabela 2**), com seus respectivos valores experimentais de Koc, Kow e respectivos valores de logaritmo buscados na literatura para cada uma das estruturas dos princípios ativos. Os valores preditos e experimentais de log. de Koc apresentaram um valor não significativo de coeficiente de ajuste ( $r^2 = 0,3$ ), mas deve-se levar em consideração que a obtenção do valor experimental de Koc é um processo influenciado por diferentes componentes do solo como, por exemplo, textura, teor de argila e teor de matéria orgânica<sup>29</sup>, que podem variar e estão relacionados com as características físico-químicas deste. Na maioria das vezes são obtidas médias dos valores de Koc em vista das diferentes características do solo. Por este motivo os valores preditos diferenciaram dos experimentais.

Com relação aos valores de log Kow obtidos na literatura para as estruturas dos princípios ativos dos agrotóxicos, estes na sua maioria não se apresentam na faixa de log Kow de 4-7, que diz respeito aos compostos que se bioconcentram em maior grau<sup>6</sup>. Apenas os compostos 6 Certero (triflumurom), 9 fusilade 250 EW (fluazifope-p-butílico) e 13 Regent 800 WG (fipronil) possuem valores (**tabela 2**) que indicam que estes são capazes de se bioconcentrar em maior grau.

Os quatro descritores selecionados pela (**equação 1**) serão discutidos a seguir com relação a sua contribuição para o coeficiente de sorção do solo (Koc) e seu significado físico-químico.

O descritor **MAXDP** contribui negativamente para o Koc, e pertence ao bloco de **descritores topológicos** que quantificam a máxima variação eletrotológica positiva a partir da representação gráfica da molécula em 2 dimensões, estes são obtidos pela aplicação de operadores algébricos para representar matrizes para gráficos moleculares<sup>30</sup>. A molécula **12** “Plateau” (imazapique) exibiu alto valor para este descritor, como também um dos menores valores de Koc da série, por uma variação máxima na presença de átomos altamente eletronegativos como o oxigênio e o nitrogênio, com relação as suas conectividades e posicionamento ao longo do gráfico molecular, apresentando uma forte interação com a molécula de água. O descritor **CIC0** contribui negativamente com o Koc, e faz parte do bloco de **índices de informação**, que quantificam o conteúdo de informação complementar, a partir da diversidade dos compostos sem levar em consideração a simetria, baseados na representação gráfica da molécula em 2 dimensões<sup>30</sup>. A molécula **7** “Dinamic” (amicarbazone) e **8** “Furadan” (carbofurano) estão entre as que apresentaram altos valores deste descritor, assim como os menores valores de Koc da série.

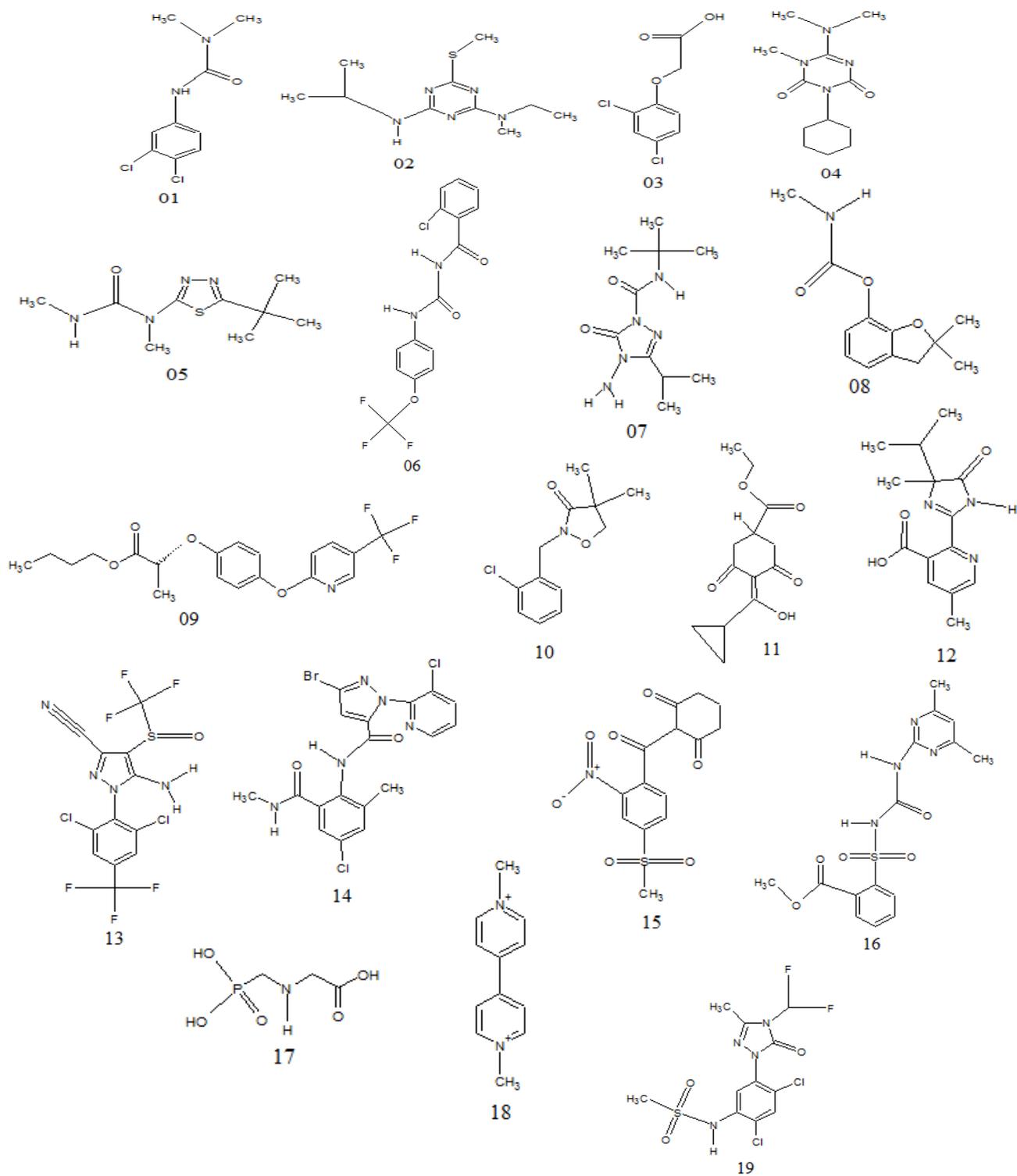
Com relação ao descritor **nHAcc**, este também apresenta contribuição negativa para o Koc, e pertence ao bloco de **grupos funcionais**, calculando o número de átomos aceptores de ligação de hidrogênio, somando-se qualquer átomo de nitrogênio, oxigênio e/ou flúor, a partir da representação gráfica da molécula em 1 dimensão, sendo um descritor molecular simples definido como o número de grupos funcionais específicos em uma molécula<sup>30</sup>. Este foi o descritor menos relevante do modelo para esta série de moléculas, pois entre os átomos aceptores de ligação de hidrogênio, especificamente o flúor, se fez presente nas moléculas que apresentam maiores valores de Koc, assim essa característica físico-química não foi determinante nesta série de moléculas para contribuir negativamente com o Koc.

Por último o descritor **VED1** que contribui positivamente para o Koc, e pertence ao bloco de descritores de **índices baseados em autovalores**, calculando a soma dos coeficientes de autovetor obtidos a partir da matriz de distância topológica da molécula representada por um grafo molecular, sem a presença de átomos de hidrogênio, em 2 dimensões, quantificando

características estruturais da molécula, tais como tamanho e ramificações presentes neste<sup>30</sup>. Os compostos **6** “Certero” (triflumurom), **9** “Fusilade 250 EW” (fluazifope-p-butílico), **13** “Regent 800 WG” (fipronil) e **14** “Altacor” (clorantraniliprol), apresentaram os valores mais altos deste descritor, assim como os valores de Koc mais elevados, devido a estes serem os maiores e mais complexos da série.

**Tabela 2.** Listagem de defensivos agrícolas utilizados pela empresa Miriri Alimentos e Bioenergia, seus respectivos valores, Kow experimental e logaritmo e Koc experimental em (mL g-1), logaritmo e log. estimado utilizando o modelo de Gramatica e colaboradores em 2007<sup>14</sup>.

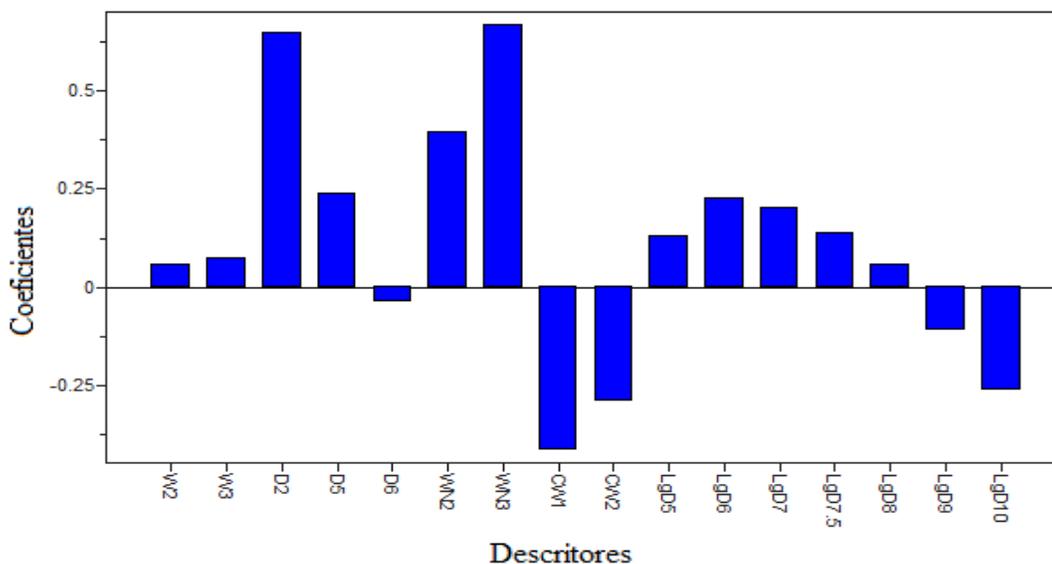
<b>Id</b>	<b>Nome/Princípio ativo</b>	<b>Log K<sub>OC</sub> estim.</b>	<b>Log Koc Experim.</b>	<b>Koc Experim.</b>	<b>Kow Experim.</b>	<b>Log Kow Experim.</b>
1	Advance (diuron)	2,4	2,7	480,00 <sup>31</sup>	697,5 <sup>42</sup>	2,84
2	Gesapax 500 (Ametrina)	2,7	2,5	316 <sup>37</sup>	426,5	2,63 <sup>37</sup>
3	Aminol 806 (2,4 D Amina)	2,6	1,7	56 <sup>32</sup>	138,03	2,14 <sup>43</sup>
4	Broker 750 (Hexazinona)	1,8	2,8	610 <sup>38</sup>	15,0 <sup>38</sup>	1,17
5	Butiron (tebutiurom)	1,8	1,9	80 <sup>41</sup>	671 <sup>40</sup>	2,82
6	Certero (Triflumurom)	2,9	4,0	11981 <sup>33</sup>	81283	4,91 <sup>44</sup>
7	Dinamic (Amicarbazone)	1,4	1,4	26,7 <sup>35</sup>	16 <sup>35</sup>	1,20
8	Furadan (carbofurano)	2,3	1,4	29,4 <sup>36</sup>	30,90 <sup>36</sup>	1,48
9	Fusilade 250 EW (fluazifope-p-butílico)	3,2	3,7	5836 <sup>33</sup>	31622	4,5 <sup>46</sup>
10	Gamit star (clomazona)	2,5	2,5	300 <sup>36</sup>	346,73 <sup>36</sup>	2,54
11	Moddus (trinexapaque-étílico)	2,2	2,5	344 <sup>34</sup>	39,8	1,60 <sup>47</sup>
12	Plateau (Imazapique)	2,4	2,3	206 <sup>36</sup>	0,01 <sup>36</sup>	-2
13	Regent 800 WG (Fipronil)	2,9	2,9	803 <sup>36</sup>	10232,9 <sup>36</sup>	4,0
14	Altacor (Clorantraniliprole)	3,7	2,7	509 <sup>49</sup>	645,65	2,81 <sup>48</sup>
15	Callisto (Mesotriona)	-	1,9	80 <sup>32</sup>	1,28	0,11 <sup>32</sup>
16	Curavial (sulfometuron metil)	-	1,9	96,5 <sup>41</sup>	2,2	0,35 <sup>41</sup>
17	Roundup WG (Glifosato)	-	4,3	21,699 <sup>32</sup>	6,30	-3,20 <sup>32</sup>
18	Helmozone (Paraquat)	-	6	1.000.000 <sup>32</sup>	3,16	-4,50 <sup>32</sup>
19	Boral 500 SC (Sulfentrazone)	-	2,2	169 <sup>34</sup>	9,8 <sup>45</sup>	0,99



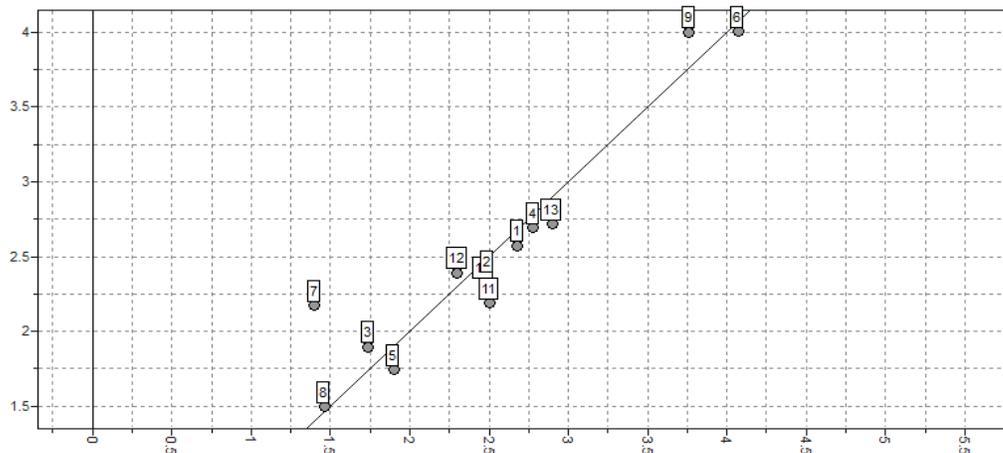
**Figura 1.** Princípios ativos dos agrotóxicos utilizados pela empresa Miriri.

## Resultados utilizando o programa VolSurf

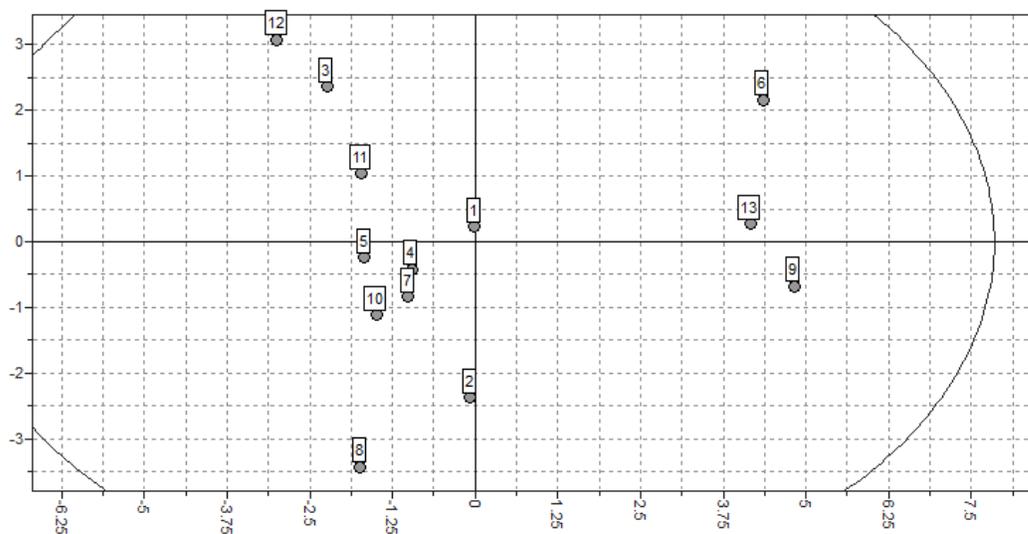
Foi selecionado o modelo com o maior valor de coeficiente de correlação de predição interna ( $Q_{cv}^2$ ), que correlacionou o valor de Koc com as estruturas dos princípios ativos de **1-13** (**figura 1**) dos agrotóxicos, onde foram selecionados 16 descritores. O modelo apresentou  $r^2=0,94$  (coeficiente de correlação), com cinco variáveis latentes (LV) que explicaram 97% da variância dos dados, SDEC=0,18 (desvio padrão do erro de cálculo), SDEP=0,40 (desvio padrão do erro de predição), e  $Q_{cv}^2=0,72$  (coeficiente de correlação de predição interna), valor significativo que demonstra a capacidade de predição do modelo<sup>28</sup>. Após a segunda visita a Empresa Miriri foi adicionada uma nova molécula ao modelo 1-14 (figura 1), e pelo novo modelo PLS gerado foram selecionados 28 descritores, apresentando  $r^2=0,82$ , com três variáveis latentes (LV) que explicaram 84,2% da variância dos dados, assim como SDEC=0,30, SDEP=0,52, e um ( $Q_{cv}^2$ )=0,50.



**Figura 2.** Gráfico dos valores de coeficientes de PLS para os descritores gerados no VolSurf.



**Figura 3.** Valores de Koc experimental versus calculado.



**Figura 4.** Gráfico de “scores” do PLS obtido para série de 13 compostos mostrando a distribuição dos compostos, nos quadrantes superior e inferior direito estão presentes os que apresentam altos valores de Koc, compostos **6**, **9** e **13**, e os que se encontram nos quadrantes superior e inferior direito são as que apresentam valores baixos e intermediários de Koc.

Ao analisar o gráfico de “scores” do PLS (**figura 4**) verificamos que as moléculas que se encontram nos quadrantes superior e inferior direito são as que apresentam os altos valores de Koc, e as que se encontram no superior e inferior esquerdo são as que apresentam valores baixos e intermediários de Koc.

Os descritores gerados a partir do VolSurf possuem significados simples que se referem a distribuição de regiões hidrofóbicas e hidrofílicas, e a formação de ligações de hidrogênio<sup>27</sup>.

De acordo com o gráfico dos coeficientes de PLS (**figura 2**), utilizando o modelo com 13 compostos, verificou-se a contribuição positiva de maior relevância dos descritores **D2** e **D5** (volumes hidrofóbicos), **WN3** e **WN2** (volumes aceptores de ligação de hidrogênio). Observou-se também a contribuição negativa mais significativa dos descritores **CW1** e **CW2** (fator de capacidade).

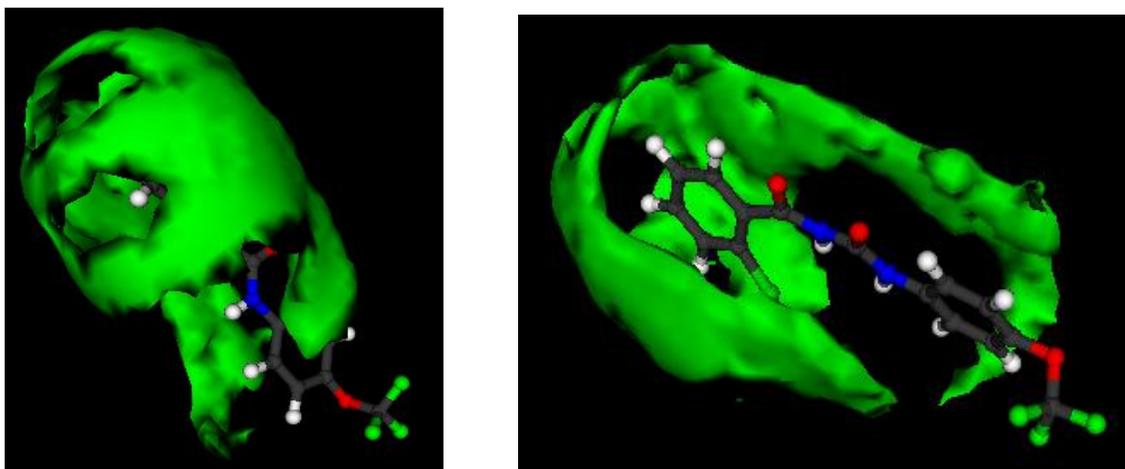
Para os volumes hidrofóbicos (**D1-D8**), o GRID usa a sonda *DRY* para gerar campos lipofílicos em 3 dimensões. Essas regiões hidrofóbicas podem ser definidas como o envelope molecular gerando interações de atração hidrofóbicas. O VolSurf computa descritores hidrofóbicos em 8 diferentes níveis de energia adaptados a uma usual série de energia de interações hidrofóbicas de -0,2 a -1,6 kcal/mol. O descritor **D2** exibiu uma significativa contribuição positiva para o Koc, com a sonda hidrofóbica em -0,4 kcal/mol, o composto **6** “Certero” (triflumurom) (**figura 5**), que possui um dos maiores valores de Koc, apresenta alto valor deste descritor, e neste pode-se observar a presença de dois anéis aromáticos que são muito hidrofóbicos. Por outro lado, o composto **7** “Dinamic” (amicarbazona) (**figura 6**), que possui o menor valor de Koc da série, por sua vez, também possui o menor valor para este descritor, exibindo, portanto fracas interações hidrofóbicas.

Para os volumes aceptores de ligação de hidrogênio (**WN1 - WN6**), o *GRID* usa a sonda **N1** (nitrogênio de amida) para gerar ligantes aceptores de campos de ligação de hidrogênio em 3 dimensões. O volume do aceptor de ligação de hidrogênio pode ser definido como o envelope molecular gerado pelas interações de atração aceptoras de ligação de hidrogênio. VolSurf computa descritores aceptores de ligação de hidrogênio em 6 diferentes níveis de energia adaptados a uma série de interações de -1 a -6 kcal/mol. Sendo mais expressiva a contribuição positiva para o Koc do descritor **WN3** em -0,3 kcal/mol de energia, o composto **13** “Regent 800 WG” (fipronil) (**figura 7**) apresentou o maior valor para este descritor, assim como possui um dos maiores valores de Koc da série. Enquanto que o composto **1** “Advance” (diuron) (**figura 8**) exibiu o menor valor para este descritor e um valor intermediário de Koc.

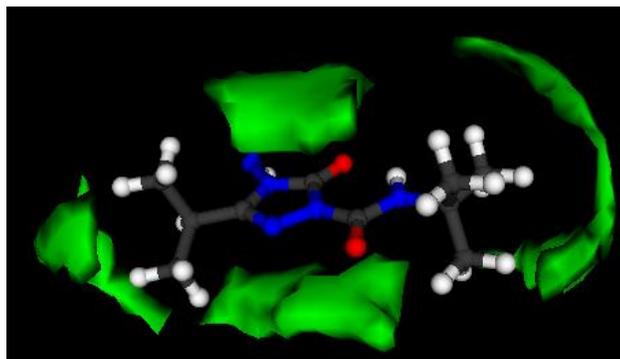
Os fatores de capacidade (**CW1 - CW8**) representam a relação de volume hidrofílico sobre a superfície total da molécula, ou seja, o volume hidrofílico por unidade de superfície, estes são calculados em 8 diferentes níveis de energia de -0,2 a -6,0 kcal/mol. Com contribuição negativa para o Koc. Dentre estes, os descritores com maior contribuição foram **CW1** e **CW2**. O

descriptor **CW1**, usando a sonda hidrofílica em  $-0,2$  kcal/mol. A molécula **7** “Dinamic” (amicarbazona) (**figura 9**), apresenta o menor valor de Koc da série, e um alto valor deste descriptor, sendo identificado nesta uma fraca interação lipofílica, devido a presença de algumas características físico-químicas importantes como, por exemplo, a ausência de anel benzênico. Com relação ao descriptor **CW2**, utilizando a sonda hidrofílica em  $-0,6$  kcal/mol, o composto **11** Moddus (trinexapaque-etílico) (**figura 10**), apresenta um valor de Koc intermediário, e obteve um alto valor para este descriptor, devido as suas características físico-químicas altamente hidrofílicas, como por exemplo, a ausência de anel benzênico. Por outro lado o composto **4** “Broker 750” (hexazinona) (**figura 11**), exibiu um valor significativo de Koc, assim como um baixo valor para este descriptor.

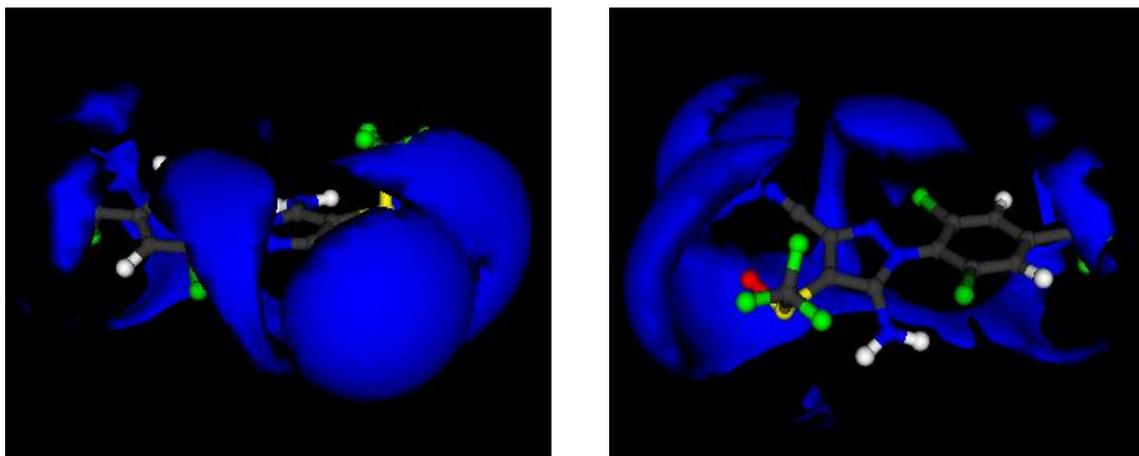
O descriptor **LogD** se refere ao valor do logaritmo do coeficiente de partição octanol/água determinado em uma faixa de variação de pH de 5-10, sendo este influenciado pelo meio ácido, neutro ou básico. Foi verificado que geralmente as estruturas dos princípios ativos tendem a serem mais sorvidas em meio ácido, e que à medida que a acidez do meio diminui, estas são mais ionizadas e se tornam mais hidrofílicas.



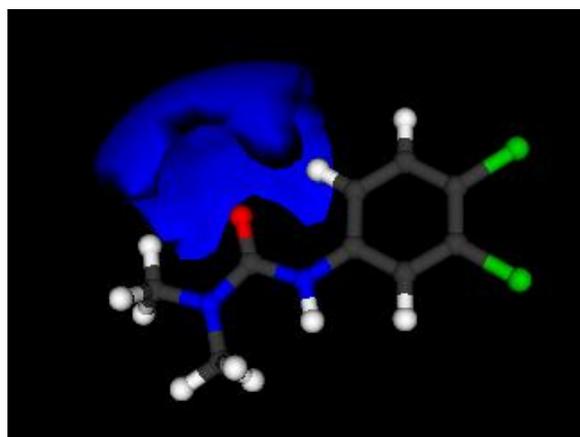
**Figura 5.** Composto **6** “Certero” (trifluorom), exibiu um dos maiores valores de Koc da série, e a sonda hidrofóbica em  $-0,4$  kcal/mol.



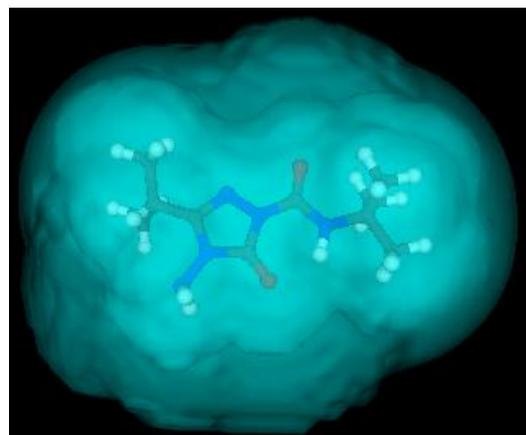
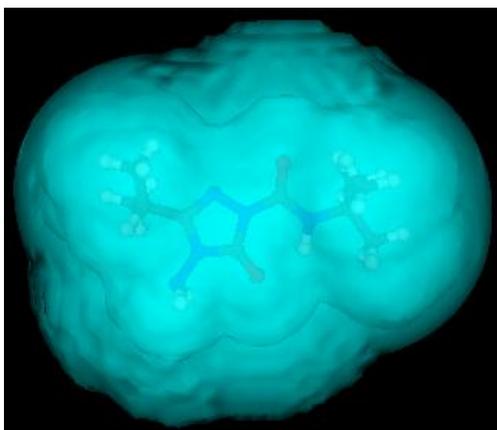
**Figura 6.** Composto 7 “Dinamic” (amicarbazona) que exibiu o menor valor para o descritor **D2** e também o menor valor de Koc.



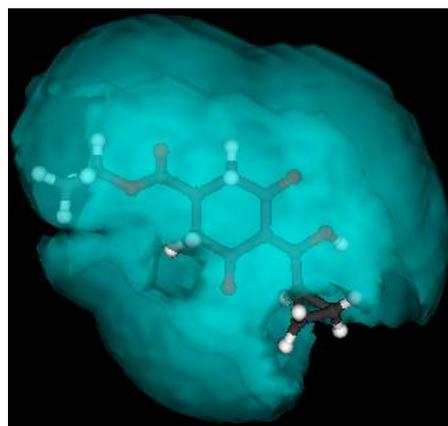
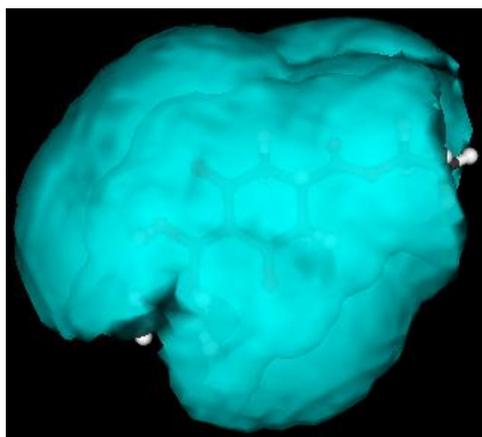
**Figura 7.** Composto 13 Regent 800 WG (fipronil), que apresenta um dos maiores valores de Koc da série, e o maior valor para este descritor com a sonda nitrogênio de amida em -3 kcal/mol.



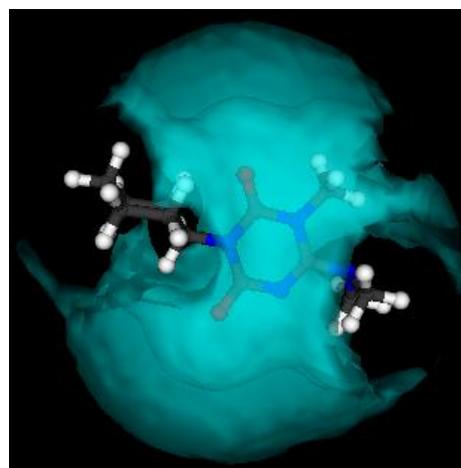
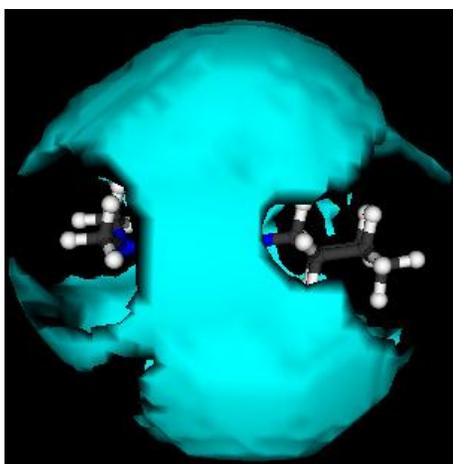
**Figura 8.** Composto 1 “Advance” (diuron) que exibiu o menor valor para o descritor **WN3** e apresenta um valor intermediário de Koc.



**Figura 9.** Molécula 7 Dinamic (amicarbazone), que apresenta o menor Koc da série com a sonda hidrofílica em  $-0,2$  kcal/mol.



**Figura 10.** O composto 11 Moddus (trinexapaque-etílico) que apresenta um valor intermediário de Koc na série, e a sonda hidrofílica  $-0,6$  kcal/mol.



**Figura 11.** O composto 4 Broker 750 (hexazinona) exibiu um valor significativo de Koc, e a sonda hidrofílica  $-0,6$  kcal/mol.

## CONCLUSÃO

O modelo publicado de Gramatica gerou valores diferentes do experimental, porém a metodologia utilizando Volsurf conseguiu gerar um modelo com alto valor de predição interna e a interpretação dos descritores selecionados pelo modelo PLS ajudaram a identificar características estruturais relevantes para o valor de Koc, como moléculas maiores, juntamente com a presença de anéis aromáticos e halogênios. O método VolSurf pode e será aplicado a base de dados maiores de defensivos agrícolas disponíveis e gerar um modelo ainda mais robusto pra esta importante propriedade na pesquisa nacional. E que na sua maioria as estruturas químicas dos princípios ativos dos agrotóxicos utilizados pela Miriri Alimentos e Bioenergia S/A, não se apresentam na faixa de log Kow de 4-7, sendo que do total de 19 estruturas apenas 3 os compostos: 6 Certero (triflumurom), 9 fusilade 250 EW (fluazifope-p-butílico) e 13 Regent 800 WG (fipronil) são capazes de se bioconcentrar em maior grau.

## REFERÊNCIAS

1. Breia, G. C.; Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Brasil, 2006.
2. Filho, L. A. B. O.; Dissertação de Mestrado, Escola de Economia de São Paulo, da Fundação Getulio Vargas de Campinas, Brasil, 2010.
3. Goldemberg, J.; *Biotechnol Biofuels*. **2008**, 1, 2.
4. [http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/indicadores/agropecuaria/lspa/lspa\\_201010.pdf](http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/indicadores/agropecuaria/lspa/lspa_201010.pdf), acessada em Março de 2012.
5. Pedrosa, R. M. B.; Santos, J. S.; Albuquerque, W.G.; Farias C.H.A.; Azevedo, H.M.; Dantas Neto, J.; *Rev. biol. ciênc. Terra*. **2005**, 5, 2.
6. Baird, C.; *Química Ambiental*. 2. ed., Editora Bookman: Porto Alegre, 2002.
7. Peres, F.; Moreira, J. C.; Dunois, G. S. É veneno ou é remédio? Agrotóxicos, saúde e ambiente. Editora Fiocruz: Rio de Janeiro, 2003.
8. Regitano, J. B.; Bonfleur, E. J.; Volume I – Palestras do II Simpósio Internacional sobre Gerenciamento de Resíduos Agropecuários e Agroindustriais – II SIGERA, Foz do Iguaçu, Brasil, 2011.
9. Krüger, R. A. Dissertação de Mestrado, Universidade Feevale, Novo Hamburgo, Brasil, 2009.
10. Townsend, C.R.; Begon, M.; Harper, J. L. *Fundamentos em ecologia*. 3. ed., Artmed: Porto Alegre, 2010.
11. Gramatica, P.; Corradi, M.; Consonni, V.; *Chemosphere*, **2000**, 41, 763.
12. Fraceto, L. F.; Silva, M. S.; Cocenza, D. S.; Rosa, A. H. *Quim. Nova*, **2011**, 10, 4.
13. D'Agostinho, A.; Flues, M. *Quim. Nova*, 2006, 29, 658.
14. Gramatica, P.; Giani, E.; Papa, E. *J Mol Graph Model*, **2007**, 25, 755.
15. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/>, acessada em abril de 2012.
16. Advanced Chemistry Development Inc., Toronto, 2008.
17. Hyperchem. Available from Hypercube Inc., Gainesville, Florida, USA, 2001.

18. Hocquet, A.; Langgard, M.; J Mol Model, 1998, 4, 94 – 112.
19. Rocha, G. B.; Freire, R. O.; Simas, A. M.; Stewart, J. J.P., J. Comput. Chem. **2006**, 27, 1101.
20. Dewar, M. J. S; Zoebisch, E.G.; Healy, E.F.; Stewart, J.J.P. J Am Chem Soc, **1985**, 107, 3902.
21. Consonni V.; Todeschini R.; Pavan M.; J Chem Inf Comp Sci 42, **2002**, 682.
22. Kubinyi, H. QSAR: Hansch Analysis and Related Approaches. *Weinheim: VCH*, 1993.
23. Alcaide, Á. D. Tese de doutorado. Universitat Pompeu Fabra, Barcelona, Espanha, 2009.
24. Santoro, A. L. Dissertação de Mestrado. Universidade de São Paulo, Brasil, 2007.
25. Cruciani, G.; Crivori, P.; Carrupt, P.-A.; Testa, B.; J Mol Struct, **2000**, 503, 18.
26. Crivori, P.; Cruciani, G.; Carrupt, P.-A.; Testa, B.; J. Med. Chem. **2000**, 43, 2210.
27. Cruciani, G.; Pastor, M.; Guba, W. Eur J Pharm Sci, **2000**, 11, 30.
28. Masunari, A.; Tavares, L. C. Rev. Bras. Cienc. Farm. 2007, 43, 287.
29. Rizzi, F. R. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Ciências Agronômicas da Unesp, Botucatu, Brasil, 2003.
30. Talete, S. R. L. Dragon for windows (software for molecular descriptor calculations), Milano, Italy, 2006.
31. Ferracini, V. L.; Pessoa, M. C. Y. P.; Silva, A. S.; Spadotto, C. A. Pesticidas: R. Ecotox. Meio Ambiente, **2001**, 11, 5.
32. Milhome, M. A. L.; Sousa, D. O. B.; Lima, F. A. F.; Nascimento, R. F. *Eng Sanit Ambient*, 2009, 14, 363.
33. Andrade, A. S.; Queiroz, V. T.; Lima, D. T.; Drumond, L. C. D.; Queiroz, M. E. L.R.; Neves, A. A. Quim. Nova, **2011**, 10, 5.
34. 2007 Status report pesticide contamination prevention act. California Environmental Protection Agency, 2008. Disponível em: <http://www.cdpr.ca.gov/docs/emon/pubs/ehapreps/eh0704.pdf>. Acessado em Abril, 2012.
35. Ministerio de ambiente, vivienda y desarrollo territorial. Disponível em: [http://www.minambiente.gov.co/documentos/res\\_0487\\_260308.pdf](http://www.minambiente.gov.co/documentos/res_0487_260308.pdf). Acessado em: Março, 2012.

36. Silva, D. R. O. ; Avila, L. A.; Agostinetto, D.; Magro, T. D.; Oliveira, E.; Zanella, R.; Noldin, J. A. Ciênc. rural, **2009**, 39, n.9, 2381.
37. Silva, V. M. Dissertação de mestrado - Universidade Estadual de Maringá, Brasil, 2008.
- 38- Environmental fate of hexazinone.1996. Disponível em:  
<http://www.cdpr.ca.gov/docs/emon/pubs/fatememo/hxzinone.pdf>. Acessado em Março, 2012.
39. Enviromental Fate of Sulfometuron-Methyl, 1999. Disponível em:  
[http://www.cdpr.ca.gov/docs/emon/pubs/fatememo/sul\\_meth.pdf](http://www.cdpr.ca.gov/docs/emon/pubs/fatememo/sul_meth.pdf). Acessado em Março, 2012.
40. Souza, J. R. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual Paulista, Jaboticabal, Brasil, 2008.
41. Lourencetti, C. Tese de doutorado, Universidade Estadual Paulista, Araraquara, Brasil, 2006.
42. Environmental fate of diuron, 2004. Disponível em:  
<http://www.cdpr.ca.gov/docs/emon/pubs/fatememo/diuron.pdf>. Acessado em abril de 2012.
43. 2,4-D Technical Fact Sheet. National Pesticide Information Center. Oregon State University Extension Services, 2008. Disponível em: <http://npic.orst.edu/factsheets/2,4-DTech.pdf>. Acessado em abril de 2012
- 44- Triflurumuron. Material Safety Data Sheet, 2010. Disponível em: <http://datasheets.scbt.com/sc-205873.pdf>. Acessado em abril de 2012.
45. Pesticide Fact Sheet. United States environmental protection agency, 1999. Disponível em: <http://www.epa.gov/opprd001/factsheets/sulfentrazone.pdf> . Acessado em abril de 2012.
- 46- United States environmental protection agency. 2004. Disponível em: <http://www.fluoridealert.org/pesticides/fluazifop-p-b.opp-2004-0347-0010.pdf>. Acessado em abril de 2012.
47. Safety data sheet. Syngenta Crop Protection Limited. Moddus, 2005. Disponível em: [http://www.pggwrightson.com/assets/files/MODDUS\\_MSDS.pdf](http://www.pggwrightson.com/assets/files/MODDUS_MSDS.pdf). Acessado em abril de 2012.
48. Ministerio de ambiente, vivienda y desarrollo territorial, 2007. Disponível em: [http://www.minambiente.gov.co/documentos/res\\_2081\\_301107.pdf](http://www.minambiente.gov.co/documentos/res_2081_301107.pdf), acessado em abril de 2012.
49. Dupont<sup>TM</sup> Altacor insect control with the active ingredient Rynaxypyr. Disponível em: [http://fs1.agrian.com/pdfs/DuPont\\_Altacor\\_CA\\_\\_NY\\_Insect\\_Control\\_Label2w.pdf](http://fs1.agrian.com/pdfs/DuPont_Altacor_CA__NY_Insect_Control_Label2w.pdf), acessado em abril de 2012.

## ANEXO

### NORMAS DE PUBLICAÇÃO - QUÍMICA NOVA

**GERAL** - Serão considerados para publicação na Revista Química Nova manuscritos que cubram as áreas tradicionais da Química bem como artigos sobre Ensino de Química, História da Química, Política Científica, etc, além de artigos de áreas afins, desde que tenham acentuado conteúdo químico. Os trabalhos devem se encaixar dentro de uma das modalidades abaixo:

**Artigos Originais** (em português, inglês ou espanhol): refere-se a trabalhos inéditos de pesquisa. Devem seguir a forma usual de apresentação, contendo Introdução, Resultados e Discussão, Parte Experimental etc, de acordo com as peculiaridades de cada trabalho. Deverão ter no máximo 25 páginas, incluindo Figuras, tabelas, esquemas, etc e todas as páginas deverão ser numeradas.

**Artigos de Revisão** (em português, inglês ou espanhol): destinados à apresentação do progresso em uma área específica de Química, com o objetivo de dar uma visão crítica do estado da arte do ponto de vista do especialista altamente qualificado e experiente. Deverão ter no máximo 40 páginas, incluindo Figuras, tabelas, esquemas, etc e todas as páginas deverão ser numeradas.

É imprescindível que, na referida área, o autor tenha publicações que comprovem a sua experiência e qualificação. Antes do envio do manuscrito, o autor deverá submeter à editoria, por e-mail, um resumo da revisão pretendida, acompanhado de uma carta explicativa da pertinência do trabalho. O material será analisado pelos Editores e, uma vez aprovado, será solicitado ao autor o envio do manuscrito completo, dentro das normas de *QN*, e só então será dado início ao processo de avaliação pelos assessores.

O Corpo Editorial de *QN* poderá, eventualmente, convidar pesquisadores qualificados para submeter artigo de revisão.

**Artigos sobre Educação** (em português ou espanhol): trabalhos de pesquisas relacionadas ao ensino de Química e divulgação de experiências inovadoras no ensino de graduação e pós-graduação. Deverão ter no máximo 25 páginas, incluindo Figuras, tabelas, esquemas, etc e todas as páginas deverão ser numeradas.

**Notas Técnicas** (em português, inglês ou espanhol): trabalhos de comunicação de métodos, validação de métodos, técnicas, aparelhagens ou acessórios desenvolvidos no laboratório de origem do autor do manuscrito. Deverão ter no máximo 25 páginas, incluindo Figuras, tabelas, esquemas, etc e todas as páginas deverão ser numeradas.

**Assuntos Gerais** (em português, inglês ou espanhol): abordagem de assuntos de interesse geral dos químicos, tais como política científica, programas de graduação e pós-graduação, história da química, etc. Deverão ter no máximo 40 páginas, incluindo Figuras, tabelas, esquemas etc. e todas as páginas deverão ser numeradas.

**PREPARAÇÃO DE MANUSCRITOS** - Todos os trabalhos deverão ser digitados em espaço duplo, utilizando somente Microsoft Word. A seguir, deve ser gerado um único 48

arquivo no formato *.pdf*, do trabalho todo, para ser submetido através do sistema *on line de QN*. A revista não aceita mais a submissão de trabalhos por outra forma.

A primeira página deverá conter o título do trabalho, nome e endereço dos autores. Havendo autores com diferentes endereços, estes deverão vir imediatamente após o nome de cada autor. Os autores deverão ser agrupados por endereço. O autor para correspondência, que deverá ser o mesmo que submete o artigo *on line*, deverá ser indicado com asterisco (\*) e seu e-mail colocado no rodapé da página (um só e-mail).

A segunda página deverá conter o título e o resumo do trabalho em inglês (abstract), com no máximo 100 (cem) palavras, e a indicação de 3 palavras-chave (keywords), também em inglês. As Figuras (incluindo gráficos, esquemas, etc) deverão ser em número máximo de 7

Figuras simples e ter qualidade gráfica adequada (usar somente fundo branco). Para número maior ver o item Material Suplementar. As Figuras, tabelas, esquemas, etc deverão ser colocadas após as referências e devidamente identificadas pelo respectivo número. Se escaneadas, deverão ser em alta resolução (*800 dpi/bitmap para traços*). No caso particular de esquemas contendo estruturas químicas, estas deverão ter sempre a mesma dimensão, para que possam ser reduzidas uniformemente, além de boa qualidade gráfica. Considerar que as Figuras deverão ter largura máxima de uma coluna (8,5 cm).

Figuras coloridas terão custo de publicação repassado aos autores, quando da publicação. Esse valor só poderá ser informado aos autores quando o trabalho estiver previsto para ser publicado, ocasião em que a gráfica fornece o orçamento.

Para Figuras, gráficos, esquemas, tabelas, etc idênticos aos já publicados anteriormente na literatura, os autores deverão pedir permissão para publicação junto à empresa/sociedade científica que detenha os direitos autorais e enviá-la à editoria de *QN* junto com a versão final do manuscrito.

As referências deverão ser numeradas consecutivamente no texto, na forma de expoentes, após a pontuação (se houver). A lista de referências deverá ser colocada no final do texto. As legendas das Figuras, gráficos e esquemas deverão ser colocadas em uma única folha à parte, separadas das Figuras. A seguir, deverão ser colocadas as Figuras, os gráficos, os esquemas, as tabelas e os quadros. Colocar os títulos acima de cada tabela. No texto, deverá ser indicada apenas a inserção de cada um(a).

## **Referências**

### ***Revistas:***

Será utilizada a abreviatura da revista como definida no Chemical Abstracts Service Source Index (ver <http://www.cas.org/sent.html>). Caso a abreviatura autorizada de uma determinada revista não puder ser localizada e não for óbvio como o título deve ser abreviado, deve-se citar o título completo.

1. Varma, R. S.; Singh, A. P.; *J. Indian Chem. Soc.* **1990**, *67*, 518.

2. No caso especial da revista citada não ser de fácil acesso, é recomendado citar o seu número de Chemical Abstract, como segue: 49

Provstyanoi, M. V.; Logachev, E. V.; Kochergin, P. M.; Beilis, Y. I.; *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.; Khim. Khim. Tekhnol.* **1976**, *19*, 708. (CA 85:78051s).

3. Caso o trabalho tenha doi, mas não a referência completa, citar doi da seguinte maneira:

Vidotti, M.; Silva, M. R.; Salvador, R. P.; de Torresi, S. I. C.; Dall'Antonia, L. H.; *Electrochimica Acta* (2007), doi:10.1016/j.electacta.2007.11.029.

É recomendado o uso de referências compostas na medida do possível, em lugar de uma lista de referências individuais. O estilo das referências compostas é o seguinte:

4. Varela, H.; Torresi, R. M.; *J. Electrochem. Soc.* **2000**, *147*, 665; Lemos, T. L. G.; Andrade, C. H. S.; Guimarães, A. M.; Wolter-Filho, W.; Braz-Filho, R.; *J. Braz. Chem. Soc.* **1996**, *7*, 123; Ângelo, A. C. D.; de Souza, A.; Morgon, N. H.; Sambrano, J. R.; *Quim. Nova* **2001**, *24*, 473.

#### **Patentes:**

Devem ser identificadas da seguinte forma (na medida do possível o número do Chemical Abstracts deve ser informado entre parênteses).

5. Hashiba, I.; Ando, Y.; Kawakami, I.; Sakota, R.; Nagano, K.; Mori, T.; *Jpn. Kokai Tokkyo Koho 79 73,771* **1979**. (CA 91:P193174v)

6. Kadin, S.B.; *US pat.* 4,730,004 **1988**. (CA 110:P23729y)

7. Eberlin, M. N.; Mendes, M. A.; Sparrapan, R.; Kotiaho, T. *Br PI* 9.604.468-3, **1999**.

#### **Livros:**

*com editor(es):*

8. Regitz, M. Em *Multiple Bonds and Low Coordination in Phosphorus Chemistry*; Regitz, M.; Scherer, O. J., eds.; Georg Thieme Verlag: Stuttgart, 1990, cap. 2.

*sem editor(es):*

9. Cotton, F.A.; Wilkinson, G.; *Advanced Inorganic Chemistry*, 5th ed., Wiley: New York, 1988.

**Programas de computação (Softwares):**

10. Sheldrick, G. M.; *SHELXL-93; Program for Crystal Structure Refinement*; Universidade de Göttingen, Alemanha, 1993.

**Teses:**

11. Velandia, J. R.; *Tese de Doutorado*, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil, 1997.

**Material apresentado em Congressos: 50**

12. Ferreira, A. B; Brito, S. L.; *Resumos da 20a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química*, Poços de Caldas, Brasil, 1998.

**Páginas Internet:**

<http://www.s bq.org.br/jbcs>, acessada em Junho 2001.

**Material não publicado:**

Para material aceito para publicação: Magalhães, U. H.; *J. Braz. Chem. Soc.*, no prelo. Para material submetido mas ainda não aceito: Magalhães, U. H.; *J. Braz. Chem. Soc.*, submetido. Para trabalho não publicado ou comunicação pessoal: Magalhães, U. H.; trabalho não publicado ou Magalhães, U. H., comunicação pessoal. Os resultados não publicados só poderão ser citados com a permissão explícita das pessoas envolvidas na sua obtenção.

Os autores devem procurar seguir, naquilo que for possível, as normas recomendadas pela IUPAC, inclusive o Sistema Internacional de Unidades. Sobre a nomenclatura de compostos (orgânicos e inorgânicos) já há traduções para a língua portuguesa publicadas em QN. Quanto aos Símbolos e Terminologias, onde não há tradução, espera-se que adaptação seja feita pelos autores, criando então, paulatinamente, um conjunto de normas em português.

**SUBMISSÃO DOS ARTIGOS** – A *QN* oferece aos autores a submissão *on line*, que pode ser acessada através do registro de Login e Senha. É possível registrar-se em nossa home page (<http://quimicanova.s bq.org.br>) usando a opção Novo Usuário. Usuários da plataforma do JBCS, já estão cadastrados na base (pois ela é comum às duas revistas), devendo utilizar o mesmo Login e Senha. Após estar cadastrado no sistema, o autor pode facilmente seguir as instruções fornecidas na tela. Será solicitada a submissão de um único arquivo do manuscrito completo, em formato *.pdf*. Está disponível uma ferramenta para gerar o arquivo *.pdf*, a partir de arquivo *.doc* ou *.rtf*, com envio automático para o e-mail do autor. Tão logo seja completada a submissão, o sistema informará automaticamente, por e-mail, o código temporário de referência do

manuscrito, até que este seja verificado pela editoria. Então será enviado e-mail com o número de referência do trabalho.

Se não for recebido o e-mail com código de submissão temporária, por algum motivo, a submissão não foi completada e o autor terá prazo máximo de 5 (cinco) dias para completá-la. Depois desse prazo, o sistema não permite o envio, devendo ser feita nova submissão.

O autor poderá acompanhar, diretamente através do sistema, a situação de seu manuscrito.

Ao fazer a submissão, solicita-se uma carta de apresentação, que deverá ser digitada no local indicado, sendo obrigatória a apresentação dos e-mails de todos os autores. Além disso, devem ser enviados também os nomes, instituições a que pertencem e e-mails de três ou quatro possíveis assessores, que não podem pertencer à(s) mesma(s) instituição(ões) dos autores.

**Material Suplementar** – Esta modalidade foi criada para que na versão impressa da revista apareça o número estritamente necessário de Figuras e tabelas (6 a 7 Figuras simples). Ressalta-se que, como este material ficará disponível apenas na versão *on line*, Figuras, tabelas e ilustrações coloridas apresentadas na forma de material suplementar não terão custo repassado aos autores, nem limite de páginas. Porém, devem ter boa qualidade gráfica. 51

O material suplementar deverá ser colocado no final do trabalho, com indicação clara. Deverá ser submetido um único documento *.pdf*, incluindo o material suplementar.

Os Editores poderão solicitar aos autores, em qualquer fase da tramitação, a separação de Material Suplementar.

**MANUSCRITOS REVISADOS** – Manuscritos enviados aos autores para revisão deverão retornar à Editoria dentro de prazo máximo de trinta dias ou serão considerados retirados, sendo que o sistema encerra o processo, não permitindo que seja reaberto. Vencido o prazo, deverá ser feita nova submissão, dando início a um novo processo.

A submissão do manuscrito revisado deverá ser feita pelo mesmo autor, usando o Login e a Senha registrados anteriormente. O autor deve seguir as instruções fornecidas na tela, para envio do documento *.pdf* completo da versão revisada e das respostas aos assessores, detalhando as alterações feitas na nova versão e justificando as alterações sugeridas nos pareceres e que não foram aceitas pelos autores. Esses dois arquivos devem ser enviados através da seção Envio de Nova Versão, na Página do Autor, no sistema de submissão *on line* de QN.

Tão logo seja completada a submissão o sistema informará automaticamente, por e-mail, o código temporário de referência do manuscrito, até que ele seja verificado pela editoria. Então será enviado e-mail contendo o número de referência do trabalho.

Se não receber o e-mail com código de submissão temporária, por algum motivo, a submissão não foi completada e o autor terá prazo máximo de 5 (cinco) dias para completá-la. Depois desse prazo, o sistema não permite o envio, devendo ser feita nova submissão.

O autor poderá acompanhar, diretamente através do sistema, o status de seu manuscrito.

**VERSÃO FINAL** – Quando for solicitada a versão final, o autor receberá instruções específicas quanto a programas para envio de arquivos (texto, Figuras, tabelas, etc) . Arquivos em formato *.pdf* não são mais solicitados nessa fase.

Se as Figuras forem escaneadas, deverão ser em alta resolução (*800 dpi/bitmap para traços*) com extensão *tif* ou *jpg*, desde que nas dimensões especificadas pelos Editores. As fotos ou desenhos com cor (*300 dpi/grayscale*) deverão ser enviadas com extensão *tif/jpg*, com largura máxima total de 8,5 cm para não haver problemas ao aplicá-las no padrão da Revista. Outras extensões possíveis: *cdr, eps, cdx ou opj*. No caso particular de esquemas contendo estruturas químicas, estas deverão ter sempre a mesma dimensão, para que possam ser reduzidas uniformemente. *A Editoria de QN reserva-se o direito de efetuar, quando necessário, pequenas alterações nos manuscritos, de modo a adequá-los às normas da revista ou tornar seu estilo mais claro, respeitando, naturalmente, o conteúdo do trabalho. Qualquer que seja a natureza do manuscrito submetido, ele deve ser original em nível de metodologia, informação, interpretação ou crítica. A qualificação do trabalho será atestada por dois consultores, indicados pela Editoria.*