

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, ELETRÔNICAS, ÓPTICAS E VIBRACIONAIS DO METAMIDOFÓS

II Encontro de Iniciação Acadêmica

Francisco Lucas Lopes de Sousa, Valder Nogueira Freire

Pesticidas organofosforados apresentam graus significativos de toxicidade, apresentando alta eficácia no combate as pragas e malefícios à saúde neurológica, isso pelo poder inibidor da colinesterase que tais substâncias possuem, fator pelo qual pode levar a diversas reações desagradáveis até a morte. Tal consequência provém da interação covalente da ligação entre fósforo (P) - enxofre (S), parte central do composto e sua alta estabilidade química os faz ser resistente a decomposição natural e a biodegradação. Como apresentam alta polaridade e são solúveis em água, podem facilmente infiltrar o solo e espalhar-se. Um destes compostos neurotóxicos amplamente utilizado é o metamidofós (O,S-Dimethyl phosphoramidothioate - C₂H₈NO₂PS), um dos inseticidas mais estudados, com o objetivo de compreender os diversos efeitos que eles podem causar no sistema nervoso, o processo que decorre do contato e/ou ingestão a eliminação pelo organismo vivo e possíveis quantidades toleráveis para sua utilização em plantio a fim de evitar danos a saúde humana. O foco deste trabalho é realizar estudos de propriedades estruturas, eletrônicas, ópticas e vibracionais do inseticida metamidofós através da modelagem computacional, via teoria funcional da densidade (DFT), para análise do perfil físico-químico deste inseticida, como exemplo, o comportamento dos elétrons na ligação covalente P-S que o caracteriza como composto tóxico.

Palavras-chave: Metamidofós. Organofosfato. Inseticidas tóxicos. Neurotóxicos.