

## Caracterização e Testes *in vitro* de Complexos de Inclusão entre Atrazina e Ciclodextrinas Funcionalizadas em Sílica.

Adneia de F. Abreu Venceslau<sup>1\*</sup>, Aline de F. Silva<sup>2</sup>, Denise A. Rocha<sup>3</sup>, Daniela L. Ambrósio<sup>4</sup>, Luciana de M. A. Pinto<sup>5</sup>

1. Doutoranda da Universidade Federal de Lavras – DQI/UFLA Lavras-MG; \*adneiafabreu@yahoo.com.br

2. Iniciação Científica da Universidade Federal de Lavras – DQI/UFLA Lavras-MG

3. Pós-doutora da Universidade Federal de Lavras – DQI/UFLA Lavras-MG

4. Pós-doutora da Universidade Estadual Paulista – IQ-UNESP/ Araraquara-SP

5. Professora da Universidade Federal de Lavras – DQI/UFLA Lavras-MG

Palavras Chave: *Herbicida, liberação modificada, liberação in vitro.*

### Introdução

A atrazina (ATZ) é um dos agroquímicos mais difundidos e utilizados no mundo todo, especialmente em culturas de milho e cana-de-açúcar. Faz-se importante na chamada lavoura de conservação, aumentando a produtividade ao mesmo tempo que diminui a erosão. Entre os principais inconvenientes, destacam-se: a persistência no ambiente, a lixiviação e sua alta toxicidade. Ciclodextrinas (CD) e ciclodextrinas funcionalizadas em sílica (CDSI) tem se mostrado alternativas eficientes contra esses problemas, modificando a liberação das moléculas-hóspedes e reduzindo a toxicidade. O objetivo do trabalho foi preparar, caracterizar e avaliar a liberação *in vitro* dos complexos formados entre ATZ/CD e ATZ/CDSI.

### Resultados e Discussão

Os testes de caracterização indicaram o suporte das CDs na superfície da sílica e a inclusão da ATZ no interior da cavidade das CDs e CDSIs, enquanto que as isotermas de solubilidade (Figura 1) demonstraram que a estequiometria dos complexos (ATZ/ $\alpha$ CD; ATZ/ $\gamma$ CD; ATZ/ $\alpha$ CDSI; ATZ/ $\gamma$ CDSI) é 1:1. Foram calculadas as constantes de associação ( $K_a$ ), para a ATZ/ $\alpha$ CD = 20,3; ATZ/ $\gamma$ CD = 13,4; ATZ/ $\alpha$ CDSI = 161,1; ATZ/ $\gamma$ CDSI = 111,1. Os testes de liberação em água (Figura 2) demonstraram que não houve diferença significativa entre as liberações de  $\alpha$ -CD e  $\gamma$ -CD. Além disso, em 22 horas, de experimento, 51% da ATZ não complexada foi liberada, contra 19% ( $\alpha$ -CD e  $\gamma$ -CD) e 15% ( $\alpha$ -CDSI e  $\gamma$ -CDSI), representando uma redução de 63% e 71%, respectivamente, na velocidade de liberação. A liberação da ATZ foi, em ordem crescente, ATZ/CDSI < ATZ/CD < ATZ não complexada. Assim, de forma geral, a associação da ATZ aos materiais híbridos (CDSI), reduz em 75% a velocidade de liberação, enquanto que, nos complexos ATZ/CD, a redução é de 67%.

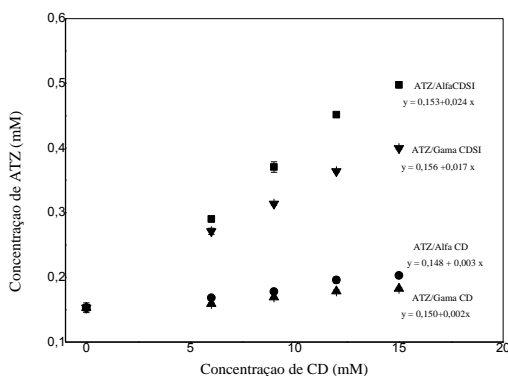


Figura 1. Isotermas de solubilidade para ATZ em presença de  $\alpha$ -CD,  $\alpha$ -CDSI,  $\gamma$ -CD e  $\gamma$ -CDSI.

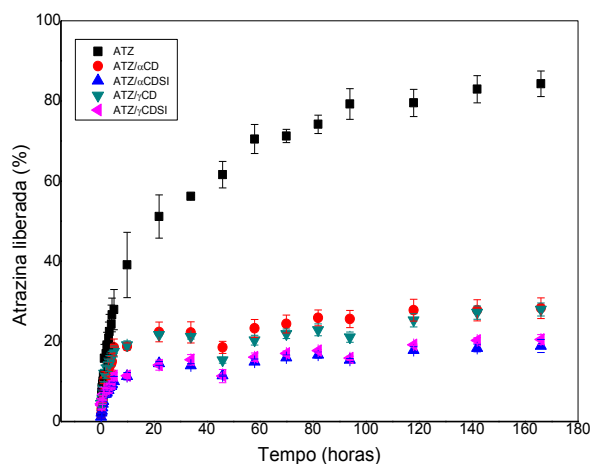


Figura 2. Curvas de liberação em água para ATZ em presença de  $\alpha$ -CD,  $\alpha$ -CDSI,  $\gamma$ -CD e  $\gamma$ -CDSI.

### Conclusões

Os testes de caracterização indicam que a funcionalização das CDs ocorreram, assim como os complexos entre a ATZ/CD e ATZ/CDSI foram formados e, também, que os complexos ATZ/ $\gamma$ CD e ATZ/ $\gamma$ CDSI foram mais eficientes na liberação modificada devido ao tamanho da cavidade interna do  $\gamma$ -CD.

### Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, CAPES e CAPQ/UFLA.

BARACHO, R. V. et al. Obtenção e caracterização de material híbrido entre sílica e ciclodextrinas. *Química Nova*, 2015. 1063-1067.

CARVALHO, L. B.; PINTO, L. M. A. Formation of inclusion complexes and controlled release of atrazine using free or silica-anchored  $\beta$ -cyclodextrin. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 2012. 375-381.