



Sessão de Química
Dia 06/11/14 – 15h40 às 18h40
Unila-PTI - Bloco 09 – Espaço 03 – Sala 03

ESTUDIO TEÓRICO DEL PIRIMETANIL Y LA PERMETRINA

Gisselle María Morínigo Egusquiza
Ciencias Biológicas – Ecología y Biodiversidad
Bolsista Pibic/UNILA
E-mail: morinigo.gisselle@gmail.com

Norma Caballero
Profesora Visitante
Instituto Latinoamericano de Ciencias de la Vida y de la Naturaleza
E-mail: norma.caballero@unila.edu.br

Resumen. El trabajo desarrollado está basado en cálculos computacionales de los compuestos denominados Pirimetanil y Permetrina; cuyas moléculas son de interés ambiental, debido a las propiedades fisicoquímicas que poseen. Tanto el pirimetanil, derivado del grupo de las pirimidinas; como la permetrina; derivado del grupo de los piretroides; son pesticidas artificiales desarrollados a fin de proteger las plantas contra mohos, hongos, roedores e insectos, de esa manera ayudan a prevenir la pérdida de las cosechas. El pirimetanil es clasificado como un fungicida, cuyo uso común en la agricultura constituye una importante adición antropogénica a las comunidades naturales, alterando la composición y riqueza de especies. Se realizaron cálculos empleando la Teoría Funcional de la Densidad (DFT), incluido en el programa Gaussian 09W, para la optimización de las geometrías, longitudes de enlace, distribución de carga de las moléculas neutras, de los iones resultantes de su ionización y de los posibles fragmentos de las moléculas. Se llevó a cabo la optimización computacional de la geometría de la molécula pirimetanil con diferentes funcionales híbridos: B3LYP, B3PW91, B98 y BH&LYP, usando las bases 6-31G (d, p) y cc – pVDZ. Se calcularon las frecuencias vibracionales que posteriormente fueron comparados con un espectro vibracional del pirimetanil obtenido experimentalmente. También fueron efectuados cálculos de estructura, propiedades y correlación con métodos de estructura electrónica mediante el uso de parámetros de energía obtenidos por modelación teórica de la estructura de pirimetanil y sus principales productos de degradación. Se optó por el funcional B3LYP, por ser el funcional recomendado en la literatura para el estudio de moléculas orgánicas en fase gaseosa. Se realizaron cálculos similares para la permetrina. Los cálculos de las propiedades físico-químicas y energéticas permiten predecir los mecanismos de acción de los diferentes fragmentos asociados con la técnica de espectrometría de masas. Se agradece al Programa de Bolsas de Iniciación Científica de la Universidad Federal de la Integración Latinoamericana por la bolsa concedida.

Palabras claves: DFT, híbrido B3LYP, pesticidas, propiedades físico-químicas, tóxicos.