PROCEDIMENTO PARA CALCULAR A QUANTIDADE DE UMECTANTE DENTRO DE FORMULAÇÕES AGRÍCOLAS*

INGOMAR WERNER DOERING**

Procurou-se estabelecer procedimento que permita o cálculo da quantidade teórica de umectante dentro de formulações agrícolas (PM, MG, WDG). Comparou-se os produtos Cobre Sandoz^R (base: óxido cuproso) e Recop^R (base: oxícloreto de cobre), testando o umectante laurilsulfato de sódio. A técnica de cálculo utilizada divide-se em sete etapas, envolvendo o volume e a massa por partícula, a quantidade de partículas contidas em 100 g, a área superficial por partícula, a área superficial total, a quantidade de moléculas de umectante e a quantidade teórica do mesmo. O modelo combinado com o gasto de umectante para os inertes permite minimizar o consumo de umectante na formulação.

1 INTRODUÇÃO

O formulador de defensivos agrícolas busca recursos para seu trabalho nas mais diversas ciências, tais como, química orgânica e inorgânica, biologia, matemática, informática e físico-química. Muitas vezes encontra dificuldades para extrair, do grande volume de informações disponíveis, algo que possa ser transformado em dados práticos. Este artigo é uma dessas tentativas, sem pretender aprofundar-se na complexidade da umectação, estudando apenas o tamanho da partícula e conseqüentemente a área superficial que precisa ser coberta pelo umectante no momento de contato do produto com

*Trabalho apresentado no I Seminário Brasileiro de Agrotóxicos. Curitiba, 27 a 29 de novembro de 1990.

**Gerente de Formulações da Sandoz S/A.

a água. Desta forma, basta conhecer o valor da área interfacial que o umectante pode cobrir na interface sólido/líquido para calcular sua quantidade mínima.

2 PROBLEMA DA UMECTAÇÃO

Ao misturar uma formulação agrícola com água observa-se um fenômeno interessante e importante para a qualidade da dispersão, ou seja, a umectação. As partículas sólidas do produto apresentam diferenças na molhabilidade pela água, quanto a sua intensidade e rapidez.

O processo de preparar uma calda agrícola (via calda concentrada/empastamento/diluição/dosagem de aplicação) é em primeiro lugar, um processo de umectação e em segundo lugar um processo de desaglomeração. Pela definição, a umectação acontece quando uma face sólida e uma líquida entram em contato entre si de tal forma que a interface sólida-ar é substituída pela interface sólida-líquida (1). A física envolvida neste processo é a de superfície e interface (1,5).

A umectação acontece em 3 etapas (Figura 1), ou seja, adesão, imersão e espalhamento.

FIGURA 1 - ETAPAS DA UMECTAÇÃO

A = adesão   B = imersão   C = espalhamento

Posteriormente, para se obter a dispersão, diferenciam-se mais 3 etapas (Figura 2). Na primeira fase o agregado é molhado formando um aglomerado, na segunda, o tamanho do aglomerado vai sendo reduzido ou pela ação do dispersante ou mecanicamente, resultando numa dispersão "estável" (terceira fase).

FIGURA 2 - ETAPAS DA DISPERSÃO

Para que a umectação aconteça, destaca-se a importância do contato da interface sólido-líquido, pois a força de adesão da água orientada para o sólido precisa exceder as suas próprias forças de coesão.

Quando a umectação acontece, os líquidos e gases absorvidos vão sendo deslocados ou dissolvidos na água. O sólido portanto, apresenta comportamento normal somente na ausência de substâncias absorvidas. Caso existam substâncias (ar, CO₂, etc.) na superfície do sólido, estas assumem suas próprias propriedades e mudam o comportamento do sólido em contato com a água.

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Produtos testados

3.1.1 Cobre Sandoz^R - CS (Óxido cuproso 50 mg, Sandoz - Brasil)

Densidade real = 2,3 g/l

Faixa de partículas primárias = 0,1 - 3 μm

Tamanho médio $Q_3 \times 50\% = 0,8 \mu\text{m}$

3.1.2 Recop^R (Oxicloreto de cobre 50 mg, Sandoz - Brasil)

Densidade real: 2,60 g/ml

Faixa de partículas primárias: 0,5 - 3 μm

Tamanho médio: 1,5 μm .

3.2 Umectante testado

Laurilsulfato de sódio

Nome comercial: Surfax 250, Aquatec - Brasil

Peso molecular: 288,38

Área interfacial: $20^\circ \text{A}^2 = 20 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ por molécula na interface sólido/líquida.

3.3 Cálculo teórico - Procedimento

A Tabela 1 demonstra o procedimento para se obter a quantidade mínima de umectante para Cobre Sandoz e Recop em gramas, sem considerar os demais inertes contidos na formulação e a natureza do princípio ativo.

Como os resultados consideram apenas a área superficial da partícula, a quantidade de umectante parece bastante pequena, o que não ocorre quando se avalia partículas menores que 0,5 μm . Surgem aqui mais duas dificuldades, a primeira refere-se a parâmetros que são desconsiderados como, polaridade, carga iônica superficial e componentes aderidos ou absorvidos. A segunda envolve a umectação teoricamente garantida a qual não significa que o produto venha a ter comportamento semelhante em aplicações de campo, podendo ou não apresentar boa molhabilidade da massa foliar.

Para formar um filme monomolecular, cada cm^2 necessita de $10^{14} - 10^{16}$ moléculas. Na hora da aplicação esta quantidade duplica em razão do umectante dispersar-se no ar. Relacionando o número de avogrado com a quantidade de moléculas necessárias para a formação do filme monomolecular po-

de-se dizer que 1 mol de umectante em média cobre uma área de 3 hectares (P.M. Faixa: 200-2000). Tendo-se 6 Ha de área foliar/Ha e supondo-se que 50% da calda chega até a planta, precisar-se-ia de 4 moles de umectante para se obter um filme contínuo, isto é, 0,8 - 8 kg/Ha (quantidade que poderia eventualmente ser fitotóxica).

Efeitos físico-biológicos eficientes de espalhamento, penetração, solubilização, osmose, etc, são obtidos com quantidades em torno de 0,05 - 0,5% de umectante na calda de aplicação. Estas quantidades incluem os tensoativos da formulação (dispersante, umectante, emulgador, aditivos) capazes de baixar a tensão superficial da formulação em água.

A avaliação dos resultados, com os demais inertes e substâncias ativas pressupõe que a adição numa faixa de 0,5-3% seria suficiente para a umectação completa de todas as formulações testadas. Certos herbicidas e fungicidas sistêmicos necessitam de nível de umectante um pouco mais elevado (entre 2 - 3%) quando comparados com inseticidas e demais fungicidas que consomem, via de regra, quantidades entre 0,8 - 1,5%. Em vários casos portanto, torna-se inevitável o uso de espalhantes (via mistura de tanque) para manter a tensão superficial de calda na faixa de 35 - 40 mN/m.

4 APROXIMAÇÃO PRÁTICA

Observou-se que a quantidade teórica de umectante pode ser pequena ou grande, sendo estes valores definidos em relação aos aspectos de aplicação do produto no campo.

Os estudos relativos ao produto Cobre Sandoz^R - CS expressos na Tabela 2, pressupõem que a demanda final seria o resultado da coluna 6.

Antes de aprimorar a aplicação prática do produto deve-se transformar o valor teórico num valor um pouco mais adaptado às condições reais da formulação. Isto pode ser feito em duas etapas:

TABELA 1 - QUANTIDADE TEÓRICA DE UMECTANTE

FÓRMULA/OPERAÇÃO*	TIPO FORMULAÇÃO	DIÂMETRO μm					
		3,0	2,0	1,5	1,0	0,5	0,1
$V = \frac{\pi \times D^3}{6}$	CS R	1,41E-11 1,41E-11	4,19E-12 4,19E-12	1,77E-12 1,77E-12	5,26E-13 5,26E-13	6,54E-14 6,54E-14	5,24E-16 5,24E-16
$M = V \times d$	CS R	3,25E-11 3,96E-11	9,63E-12 1,17E-11	4,07E-12 4,96E-12	1,21E-12 1,47E-12	1,51E-13 1,83E-13	1,21E-15 1,47E-15
$N = \frac{100}{M}$	CS R	3,08E+12 2,53E+12	1,04E+13 8,55E+12	2,46E+13 2,02E+13	8,26E+13 6,80E+13	6,62E+14 5,46E+14	8,26E+16 6,80E+16
$A = \pi \times D^2$	CS R	2,83E-07 2,83E-07	1,26E-07 1,26E-07	7,07E-08 7,07E-08	3,14E-08 3,14E-08	7,85E-09 7,85E-09	3,14E-10 3,14E-10
$A_T = A \times N$	CS R	87,2E+04 71,6E+04	13,1E+05 10,8E+05	17,4E+05 14,3E+05	25,9E+05 21,4E+05	52,0E+05 42,9E+05	25,9E+06 21,3E+06
$N_{\mu\text{m}} = \frac{A_T}{A_{\text{INT}}}$	CS R	4,36E+20 3,58E+20	6,55E+20 5,39E+20	8,70E+20 7,14E+20	1,30E+21 1,07E+20	2,60E+21 1,07E+20	1,29E+22 1,07E+20
$Qu = \frac{N \times 288,28}{N_A}$	CS R	0,21 0,17	0,31 0,26	0,42 0,34	0,62 0,51	1,25 1,03	6,2 5,12

* V = volume por partícula (cm^3) M = massa por partículas (g) N = partículas produzidas por 100 g de sólidos

A = área superficial/part. (cm^2) A_T = área superficial total (cm^2) $N_{\mu\text{m}}$ = número de moléculas do umectante

Qu = consumo de umectante (g) N_A = número do avogrado ($6,02217 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$) A_{INT} = área interfacial

- Analizando-se as influências dos inertes minerais na formulação (caolinitas, sílicas, talco, atapulgitas, bentonitas, diatomeas, carbonatos, etc);
- Analizando-se a influência do princípio ativo utilizado na formulação conforme suas propriedades químicas.

TABELA 2 - CONTRIBUIÇÃO DOS INERTES MINERAIS PARA A DEMANDA DO UMECTANTE (3,4,5)

INERTE	1	2	3	4	5	6
Caolinitas						
. Terra Nova 325	2,57	1,653	7,0	0,7	0,8	1,5
. M. Leme HTM20	2,60	0,639	5,6	0,5	0,8	1,3
. Ouro Branco 325	2,60	0,957	5,6	0,5	0,8	1,3
. Lamil	2,50	0,852	4,4	0,4	0,8	1,2
Sílicas Precipit.						
. BS39AB (Rhodia)	2,2	0,846	7,4	0,2	0,8	1,0
. Wessalan S (DEgussa)	2,1	1,350	5,0	0,2	0,8	1,0
Carbonato						
. Carbonato de cálcio leve (Quimvale)	2,6	0,738	4,3	0,4	0,8	1,2

1 = Densidade real g/ml do inerte

2 = Área superficial

3 = Diâmetro médio (Shimadzu CACP3)

4 = Quantidade de inerte

5 = Quantidade parcial para óxido cuproso técnico

6 = %

5 CONCLUSÃO

Um dos fatores que devem ser levados em consideração no desenvolvimento de formulações agrícolas é a redução de custos. Umectantes são, via de regra, bem mais caros que dispersantes, sendo normalmente um dos alvos de economia por parte das empresas. O cálculo teórico permite otimização quanto a necessidade mínima de umectante, podendo ser aplica-

do também aos demais ingredientes da formulação.

Excesso de umectante não contribui para melhorar a desaglomeração do produto, nem provoca melhor desempenho biológico. Embora possibilite elevar o nível de suspensão, provoca elevação no custo final de produção. Quando o objetivo é melhorar a eficácia biológica, deve-se estudar o uso de espalhantes, adesivos, aditivos, etc, adequados para cada tipo de formulação.

ABSTRACT

A straight forward calculation determining the theoretical quantity of umectant in agricultural formulations (WP, MG, WDS) is presented. The idealized model calculates consecutively volume and mass of a given particle diameter, followed by the number of particles producible from a 100 g of solid, the surface area/particle, the total surface area, the number of the wetting agent molecules and finally minimum quantiti in g. Model substances: Coper Sandoz (cuprous oxide) and Recop (copperoxichloride). Based on this primary data it is possible to expand the experimental data to practice conditions including different active materials and inerts. The model gives an idea of how to minimize tenside costs starting with umectant need. Further work will be published.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 01 HEERTJES, P.M. Some aspects of wetting of powders. Powder Technol., v. 3, p. 339-343, 1969/70.
- 02 HOLLAWAY, P.J. Surface factors affecting the wetting of leaves. Pest.Sci., v. 1, p. 156, 1970.
- 03 DRAVES, C.Z. Evaluation of wetting agents. Amer.Dyest. Rep., v. 20, p. 201, 1931.
- 04 AATCC TECHN. Manual: evaluating of wetting agents. Method AATCC 17-1952 - 44(1968) B-168.
- 05 ASWORTH, R. Lab and field test of evaluating the efficiency of wetting agents used in agriculture. J.of Food Agric., v. 12, p. 234, 1961.