

Química

Interação de glifosato com modelos de óxido de grafeno

Stephano Daniel Santos - 9º módulo de Química Licenciatura Plena, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

Cleber Paulo Andrada Anconi - Orientador DQI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

A indústria agrícola é um dos setores mais rentáveis da economia brasileira, o PIB (Produto Interno Bruto) dos Estados produtores cresceu muito acima da economia do país como um todo nos últimos anos. O Glifosato (GLYP), descoberto pela Monsanto em 1970, é o herbicida mais utilizado no mundo atualmente. Usado para eliminação de ervas daninhas na agricultura, é nocivo aos seres humanos. O óxido de grafeno (GO) tem se mostrado como um bom adsorvente pela sua área de superfície e pela presença de grupos oxigenados que são capazes de promover interações entre o GO e outros compostos. Esta pesquisa tem como objetivo estudar teoricamente a interação entre glifosato e modelos de óxido de grafeno (GO). A execução da proposta implica na obtenção de estruturas de partida de GO mediante emprego do GO-MODEL, obtenção de diversos sistemas supramoleculares mediante emprego do UD-APARM e obtenção de dados teóricos mediante uso do método GNF2-xTB. O estudo foi realizado no Laboratório de Química Fundamental (LQF) do Departamento de Química da Universidade Federal de Lavras. O presente estudo foi realizado mediante uso de dois modelos de GO, contendo 150 átomos de carbono, com composição coerente a dados experimentais. Os modelos de GO foram denominados GO-I e GO-II. O GO-I foi construído com 53% de recobrimento, 43 hidroxilas, 18 epóxidos, razão O/C de 40,7%. O GO-II foi construído com 48% de recobrimento, 42 hidroxilas, 15 epóxidos, razão O/C de 38%. Os modelos foram obtidos com distribuição aleatória de grupos funcionais. Foram realizadas 364 otimizações utilizando o método semi-empírico GNF2-xTB, onde os sistemas foram avaliados com água como solvente, mediante emprego do método contínuo ALPB. Cada um dos 364 sistemas de partida corresponde a um arranjo espacial específico, obtido pelo uso do UD-APARM. No presente estudo, apesar das similaridades entre as estruturas de GO-I e GO-II em números de grupos epóxidos e hidroxilas, os valores obtidos de energia de interação foram muito diferentes, portanto as geometrias encontram-se em análise para identificação da causa das diferenças observadas. A pesquisa indicou que a interação entre GLYP e o GO é bastante dependente do tipo de GO empregado, pois foram encontrados 78 e 68 sistemas otimizados com delta G negativo para os sistemas de GLYP com GO-I e GO-II, respectivamente. Espera-se ainda realizar otimizações com outras estruturas de GO, além de comparar os dados obtidos com dados experimentais encontrados na literatura.

Palavras-Chave: GNF2-xTB, Adsorção, Contaminante.

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/s6hKMBKZnDk>