



# ESTUDO DA INTERAÇÃO DE HERBICIDAS COM GRAFENO PARA PRODUÇÃO DE AGENTES FILTRANTES

Shirley Soares de Oliveira<sup>1</sup>, Cássio Stein Moura<sup>2</sup> (orientador), Ivi Valentini  
Lara<sup>2</sup>(orientadora).

*Escola de Ciências, Curso de Física*<sup>1</sup>, PUCRS; *Instituto do  
Petróleo e dos Recursos Naturais, PUCRS*<sup>2</sup>

## Resumo

Neste trabalho, foram realizados cálculos de simulação computacional de primeiros princípios para analisar a interação entre os herbicidas ácido diclorofenoxiacético (2,4-D), glifosato e imazetapir com o grafeno para verificação do potencial de aplicação desta nanoestrutura na produção de agentes filtrantes. Utilizando o programa SIESTA, testes de convergência foram executados para análise da estrutura relaxada das três moléculas e do grafeno individualmente. A partir da obtenção dos parâmetros de cálculo otimizados, foram avaliadas as distâncias de interação e posições relativas mais favoráveis para a interação entre as moléculas de herbicidas e a rede cristalina do nanomaterial. A interação entre as três moléculas e o grafeno foi estudada através de diferentes grupos funcionais, sendo eles: hidroxila (ligado ao P), hidroxila (ligado ao C) e o nitrogênio mais próximo do grafeno, para o glifosato. Para o imazetapir foram estudados os ácidos carboxílicos, anel aromático, carbono e oxigênio. E para o 2,4-D, os grupos estudados foram os ácidos carboxílicos, anel aromático deitado sob o grafeno, Cl e Cl+O+COOH. Para o glifosato, observou-se que a molécula interage preferencialmente através dos grupos funcionais contendo átomo de fósforo. Neste caso, a molécula atua como doadora de carga para o grafeno. Para o imazetapir, a interação ocorreu preferencialmente com os anéis aromáticos, que atuam como receptores de carga a partir do grafeno. No caso da molécula 2,4-D, observou-se também melhor interação com o anel aromático, indicando que esta molécula atua como receptora de carga na interação com o grafeno. Na avaliação das bandas de energia para os três herbicidas interagindo com a monocamada de grafeno, observou-se que houve uma pequena

modificação na simetria da estrutura eletrônica do grafeno e os níveis de energia das moléculas permaneceram localizados. Não foi observada polarização de spin nos três sistemas e as interações apresentam-se em um regime de adsorção física. Estão sendo realizados cálculos para avaliar a localização da carga nos sistemas relacionados aos níveis de energia de interesse. Os mesmos procedimentos estão sendo adotados para analisar as propriedades químicas e físicas da interação dos respectivos herbicidas com o óxido de grafeno.

**Palavras-chave:**

Nanomateriais; Grafeno; Herbicidas; DFT.