



INTERAÇÕES QM/MM PARA O ESTUDO DE MOLÉCULAS HERBICIDAS E NANOESTRUTURAS DE CARBONO: CARACTERIZAÇÃO OPTOELETRÔNICA, VIBRACIONAL E TERMODINÂMICA

José Moreira Martins Filho¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

Este projeto visa contribuir para a formação acadêmica, com foco em pesquisa, de alunos do curso de licenciatura em Física no Centro de Educação e Saúde (CES) da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), campus Cuité. A iniciação à pesquisa será realizada nas áreas de Física da Matéria Condensada, com aplicação em Biofísica, principalmente em tópicos relacionados à nanotecnologia e ao uso de herbicidas. A proposta busca integrar pesquisadores e alunos das áreas de educação e saúde da UFCG-CES-Cuité. O projeto possui duas vertentes principais, estruturadas em metodologias teóricas nas áreas de Física da Matéria Condensada e Biofísica. A primeira vertente é a caracterização física, química e biológica dos herbicidas, na qual serão estudadas as propriedades estruturais, conformacionais, eletrônicas, ópticas, termodinâmicas e vibracionais das nanomoléculas de herbicidas utilizadas no combate ou controle químico de plantas daninhas. Esses estudos serão realizados por meio de métodos de bioquímica quântica, com o objetivo de entender o mecanismo de ação química, a resposta física e a atividade biológica dos herbicidas. A segunda vertente envolve a funcionalização de herbicidas com nanoestruturas de carbono. Esse estudo irá explorar a adsorção de nanomoléculas de herbicidas em nanoestruturas de carbono, com base nas suas estruturas cristalinas e eletrônicas, a fim de desenvolver um sistema moderno de detecção e coleta em meio aquoso. Esse sistema será analisado por meio de abordagens teórico-computacionais. O projeto oferece uma oportunidade única de formação para os alunos, integrando teoria e prática em áreas de alta relevância, além de fortalecer a interação entre diferentes áreas de conhecimento.

Palavras-chave: Herbicidas, DFT, Simulações computacionais.

¹José Moreira Martins Filho, Unidade Acadêmica de Física e matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: jose.moreira@estudante.ufcg.edu.br

²Doutor, professor da Unidade Acadêmica de Física e Matemática do Centro de Educação e Saúde - CES, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: nilton.ferreira@professor.ufcg.edu.br

QM/MM INTERACTIONS FOR THE STUDY OF HERBICIDE MOLECULES AND CARBON NANO-STRUCTURES: OPTOELECTRONIC, VIBRATIONAL, AND THERMODYNAMIC CHARACTERIZATION

ABSTRACT

This project aims to contribute to the academic development of undergraduate Physics students at the Center for Education and Health (CES) of the Federal University of Campina Grande (UFCG), Cuité campus, with a focus on research. The research initiation will be conducted in the areas of Condensed Matter Physics, with applications in Biophysics, primarily related to nanotechnology and the use of herbicides. The project seeks to integrate researchers and students from the education and health fields at UFCG-CES-Cuité. It is structured around two main theoretical methodologies: Condensed Matter Physics and Biophysics. The first aspect involves the physical, chemical, and biological characterization of herbicides, focusing on the structural, conformational, electronic, optical, thermodynamic, and vibrational properties of herbicide nanomolecules used in the chemical control of weeds. These studies will employ quantum biochemistry methods to understand the chemical mechanisms, physical responses, and biological activities of the herbicides. The second aspect explores the functionalization of herbicides with carbon nanostructures, studying the adsorption of herbicide nanomolecules onto carbon nanostructures based on their crystalline and electronic structures. This aims to develop a modern detection and collection system in aqueous environments, using theoretical and computational approaches. The project provides a unique learning opportunity, integrating theory and practice in highly relevant fields and enhancing interdisciplinary collaboration.

Keywords: Herbicides, DFT, Computational simulations.