



MODELAGEM COMPUTACIONAL DO TIPO QM/MM APLICADA AO ESTUDO DE MOLÉCULAS HERBICIDAS INTERAGINDO COM NANOESTRUTURAS DE CARBONO.

Weverton dos Santos Lima¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

Antes do desenvolvimento da agricultura, os seres humanos dependiam da caça, pesca e coleta de vegetais para sobreviver, migrando quando os recursos se esgotavam. A agricultura trouxe uma vida sedentária com técnicas de cultivo e armazenamento de grãos, aumentando a produção de alimentos. No século XX, a agricultura comercial e as inovações tecnológicas, como a mecanização e o uso de agroquímicos, impulsionaram o crescimento e a produtividade. A Revolução Verde aumentou a produção, mas causou problemas ambientais, como poluição e perda de diversidade genética. No Brasil, o uso de agrotóxicos começou nos anos 60. O controle de plantas daninhas é feito com herbicidas, mas seu uso excessivo prejudica o ambiente. O estudo aborda a simulação molecular de herbicidas não-seletivos e sua interação com o fulereno C₆₀, analisando geometria, densidade de carga, orbitais moleculares e densidade de estados. Os resultados mostram variações nas propriedades, mas não diferenças significativas entre os funcionais LDA/PWC e GGA/PBE.

Palavras-chave: Agricultura, Herbicidas, Simulação Molecular.

¹ Graduando no curso de licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: weverton.santos@estudante.ufcg.edu.br

² Doutor, Professor do Magistério Superior, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: nilton.ferreira@professor.ufcg.edu.br



COMPUTATIONAL MODELING OF QM/MM TYPE APPLIED TO THE STUDY OF HERBICIDE MOLECULES INTERACTING WITH CARBON NANOSTRUCTURES.

ABSTRACT

Before the development of agriculture, humans relied on hunting, fishing, and the gathering of vegetables to sustain themselves, migrating when resources became depleted. Agriculture ushered in a sedentary lifestyle with cultivation and grain storage techniques, leading to increased food production. In the 20th century, commercial agriculture and technological innovations such as mechanization and the use of agrochemicals drove growth and productivity. The Green Revolution further boosted production but gave rise to environmental issues such as pollution and genetic diversity loss. In Brazil, the use of pesticides began in the 1960s. Weed control is accomplished through herbicides, but their excessive use poses environmental harm. This study delves into the molecular simulation of non-selective herbicides and their interaction with the C60 fullerene, analyzing geometry, charge density, molecular orbitals, and density of states. The results indicate variations in properties but no significant differences between the LDA/PWC and GGA/PBE functionals.

Keywords: Agriculture, Herbicides, Molecular Simulation.