



SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS DE HERBICIDAS ORGANO-SINTÉTICOS: UTILIZANDO MÉTODOS DE DINÂMICA MOLECULAR E DFT

Antônio Francisco José¹, Maria Clara das Graças²

RESUMO

O avanço da ciência é algo que vem mudando cada vez mais as sociedades em si, diversas áreas estão em crescente desenvolvimento, devido à adoção dessas inovações proporcionadas pela ciência, uma delas é à agricultura que passou de uma simples forma de sobrevivência para comércio. Atualmente, o uso da mecanização do trabalho, produtos químicos, entre outras coisas são comuns nesta área. Ao se tratar de produtos químicos, os herbicidas são os produtos que mais vêm se destacando no mercado agrícola, por combater parcialmente ou totalmente certos tipos de plantas, comumente conhecidas como plantas daninhas, que são plantas que prejudicam as produções agrícolas, colocando-as em total risco. No entanto, esses produtos também geram alguns problemas para o ecossistema ao serem usados de maneira incorreta, e inseqüente. Dessa forma, este trabalho traz um estudo estrutural da molécula de um herbicida conhecido como *Linuron*, comumente utilizado em plantações como as de soja e milho. O estudo é feito por método *in silico*, como: mecânica molecular (MM) clássica e cálculos quânticos (QM) de primeiros princípios no formalismo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), realizado no software computacional *Materials Studio*. Inicialmente realizamos a otimização geométrica, com o intuito de obter a mínima energia das estruturas moleculares, como isso foi possível extrair as propriedades de medidas estruturais (comprimento de ligação, ângulo de ligação, e ângulo de torção), além da determinação das propriedades optoeletrônicas. Assim, conseguimos proceder a caracterização completa da molécula do *Linuron*, sugerindo a possibilidade da criação de um mecanismo inteligente de purificação de reservatórios e mananciais de água.

Palavras-chave: DFT, *Linuron*, modelagem molecular.

¹Damião Franceilton Marques de Sousa, Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica Física e Matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: franceiltonmarques@gmail.com

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



LOREM IPSUM DOLOR SIT AMET, CONSECTETUR ADIPISCING ELIT. NULLAM ACCUMSAN NEQUE SED DUI ULTRICES ELEIFEND.

ABSTRACT

The advancement of science is something that has been changing more and more as societies themselves, several areas are in increasing development, due to the adoption of these innovations provided by science, one of them is agriculture that has changed from a simple form of trade to commerce. Currently, the use of work mechanisms, chemicals, among other things common in this area. When it comes to chemicals, herbicides are the most prominent products in the agricultural market because they partially or totally combat certain types of plants, commonly known as weeds, which are plants that hinder agricultural production, putting them in total risk. However, these products also create some problems for the ecosystem when used incorrectly and inconsistently. Thus, this work brings a structural study of the molecule of a herbicide known as Linuron, commonly used in crops such as soybean and corn. The study is done by in silico method, such as: classical molecular mechanics (MM) and quantum calculations (QM) of first principles in the formalism of the Density Functional Theory (DFT), performed in the computer software Materials Studio. Initially we performed the geometric optimization in order to obtain the minimum energy of the molecular structures, as it was possible to extract the properties of structural measurements (bonding length, bonding angle, and torsion angle), as well as determining the optoelectronic properties. Thus, we were able to proceed with the complete characterization of the Linuron molecule, suggesting the possibility of creating an intelligent mechanism for purification of reservoirs and water sources.

Keywords: DFT, *Linuron*, molecular modelling.