ORGANIZAÇÃO ESTRUTURAL DO GLIFOSATO EM ÁGUA: UM ESTUDO VIA DINÂMICA MOLECULAR CLÁSSICA

Abner Vinicius Oles de Mello (FA), Lucas Stori de Lara (Orientador), e-mail: lslara@uepg.br.

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física.

Ciências exatas e da Terra – Física da Matéria Condensada

Palavras-Chave: *glifosato, Dinâmica Molecular, herbicidas.*

Resumo

O mau uso do glifosato pode levar ao desequilíbrio de ecossistemas, direta ou indiretamente, em especial os aquáticos e microrganismos, portanto estudar propriedades como solubilidade torna-se para o monitoramento do impacto sobre a fauna e flora torna-se continuamente necessário. Técnicas computacionais, como a utilizada em nosso trabalho, foram utilizadas para a execução das simulações, do glifosato, da água e da mistura de ambas, até alcançar a equilibração dos sistemas, deste momento em diante usou-se o VMD (Visual Molecular Dynamics), para o cálculo da função radial de pares, g(r) a qual permite a caracterizar as substâncias a partir dos dados das simulações. Dada a concordância, concluiu-se que o glifosato possui alta solubilidade em água, em conformidade com a literatura, o que destaca a eficácia do método da dinâmica molecular clássica (DMC).

Introdução

Glifosato, $C_3H_8NO_5P$, herbicida não seletivo, sistêmico, pós-emergente e o mais vendido no mundo. Estudos indicam em geral sua baixa toxicidade, com exceção de anfíbios, bem como sua alta solubilidade em água [1,2]. O presente trabalho buscou analisar tal propriedade através de técnicas computacionais, modelando, tanto o glifosato quanto a molécula de água pelo método da DMC (Dinâmica Molecular Clássica), onde os átomos e moléculas, através da aproximação de Born-Oppenheimer, podem ser tratados como esferas rígidas [3,4]. Desse modo, conhecendo os parâmetros da substância desejada, por meio da literatura presente, configura-se softwares como Ambermd, Gromacs, Lammps etc. Os quais, por meio do cálculo de potenciais de interação das partículas, determinam as forças do sistema e consequentemente as equações de movimento clássicas

Materiais e Métodos

Para a execução das simulações computacionais foram usados os softwares livres LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) e VMD (Visual Molecular Dynamics). Para a molécula de água, realizou-se uma fase de equilibração das energias no ensemble NVT (ensemble canônico) por 10 ps passando para NPT (ensemble isotérmico-isobárico) por 990z ps, já o glifosato de modo semelhante executou-se uma fase no NVT de 10 ps e uma NPT, mas de 490 ps, assim obtendo os valores para variáveis mecânicas e termodinâmicas do sistema. Então, usou-se o VMD para estimar a função de distribuição radial de pares, g(r) de cada molécula individualmente. Em seguida, criou-se um arquivo de topologia, mas da mistura das substâncias. E de maneira semelhante, foi usado LAMMPS nas simulações para a equilibração das energias, com uma fase no ensemble NVT de 5 ps e uma fase NPT de 495 ps. E por fim calculou-se no VMD as g(r) da mistura.

Resultados e Discussão

A partir das simulações computacionais foi possível inferir uma propriedade estrutural para as moléculas de glifosato em água. Na figura 1 verifica-se que na distância P-O (P do Glifosato e O da água) uma curva do tipo harmônica amortecida com picos: 1º em 4,1 Å e 2º em 7,5 Å. Curva característica de um líquido ou de solução com alta solubilidade em água.

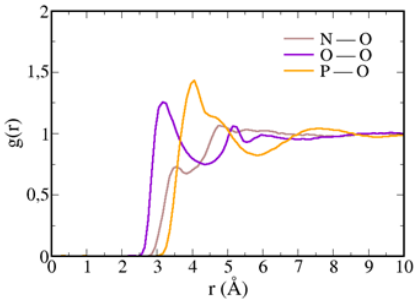


Figura 1. Distribuição radial de pares no sistema glifosato/água: Distâncias N, O e P do Glifosato em relação ao O da água.

Conclusão ou Conclusões

Conclui-se que conforme a literatura o glifosato apresenta alta solubilidade em água, portanto, a vigilância sobre a possível contaminação de afluentes é imprescindível. E fica clara a acurácia de técnicas computacionais e seu emprego mostra-se uma alternativa interessante no estudo de sistemas, como os aqui apresentados.

Agradecimentos

Agradeço a UEPG pelo uso de suas instalações, a Fundação Araucária (FA) pela bolsa concedida.

1. AMARANTE JUNIOR, O. P. DE et al. **Glifosato: propriedades, toxicidade, usos e legislação**. Química Nova, v. 25, n. 4, p. 589–593, 2002.
2. MORAES, P. V. D.; ROSSI, P. **Comportamento ambiental do glifosato**. Scientia Agraria Paranaensis, v. 9, n. 3, p. 22–23, 2010.
3. DE LARA, L. S. **DINÂMICA MOLECULAR E APLICAÇÕES** - Prof. Dr. Lucas S. de Lara. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=z7wRKyhn9bc>.Acesso em: 26 mar. 2024.
4. MADEIRA, L.; VITIELLO, S. A. **A função radial de distribuição de pares para sistemas Lennard-Jones bidimensionais**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 34, n. 4, dez. 2012.