

**PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS E ENERGÉTICAS DO HERBICIDA PICLORAM: UMA
ABORDAGEM USANDO A TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE E LINGUAGEM PYTHON**

Araújo, Sávio Miguel da Cruz

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Anápolis

Vieira Filho, Evande Fernandes

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Anápolis

Camargo, Lilian Tatiane Ferreira de Melo

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Anápolis

Sanches Neto, Flávio Olímpio

Instituto Federal de Goiás, Câmpus Valparaíso de Goiás

O herbicida Picloram é amplamente utilizado no controle de plantas daninhas de folhas largas em diversas culturas, porém apresenta sérias preocupações ambientais. Sua alta solubilidade em água, associada à elevada persistência no solo (meia-vida de até 300 dias), favorece a contaminação de aquíferos e corpos d'água superficiais. Tais perigos para os ecossistemas e para a saúde humana justificam uma investigação de sua estrutura química. Embora existam trabalhos experimentais sobre este composto, a compreensão a nível molecular ainda é escassa. Para elucidar as características moleculares, as propriedades geométricas e eletrônicas da molécula de Picloram foram investigadas por meio da Teoria do Funcional da Densidade, utilizando o funcional de correlação e troca M06-2X. A molécula foi otimizada usando o software Gaussian 16, e a seguir foram calculadas as propriedades. As distâncias e

ângulos de ligação se mostraram consistentes com os valores esperados para compostos aromáticos halogenados e nitrogenados heterocíclicos. A maior distância de ligação observada na molécula foi a do carbono-cloro (C–Cl), com 1,73 Å, sendo um valor superior ao das demais ligações, como as de carbono-oxigênio e carbono-carbono. Essa diferença é quimicamente coerente, pois o raio atômico do cloro é maior que os raios do carbono e do oxigênio, resultando em uma maior distância entre os núcleos. Os ângulos de um anel hexagonal plano são de 120°, neste estudo os ângulos encontrados foram próximos desse valor, variando de 116,47° a 124,35°. No que tange às propriedades eletrônicas, foram obtidas o Gap (diferença entre as energias do mais alto orbital ocupado e do mais baixo orbital desocupado) e a dureza química, cujos valores foram respectivamente -7,35 eV, de 3,68 eV, apontando para um sistema com reatividade baixa a moderada, devido à sua considerável estabilidade eletrônica. As cargas também foram calculadas e se mostraram coerentes, com valores negativos para átomos mais eletronegativos como oxigênio, cloro e nitrogênio e valores positivos para átomos menos eletronegativos como carbono. Por fim as ordens de ligações encontradas foram de valores próximo de 1 para ligações simples, de 1,4 para ligações com ressonâncias de 1,77 para duplas ligações, o que também é quimicamente consistente. O processo de catalogação dos dados, foi feito primeiro manualmente e posteriormente usando a linguagem Python. A criação de scripts específicos para extrair cada propriedade obtida dos arquivos de saída se mostrou eficaz para reduzir drasticamente o tempo de catalogação e eliminar a suscetibilidade a erros humanos inerente ao processo manual. Assim, a união entre modelagem molecular e Python reforça a eficiência e precisão das análises.

Palavras-chave

Picloram, propriedades geométricas e energéticas, Teoria do Funcional da Densidade, Python.

Agradecimentos

Agradecemos ao Instituto Federal De Goiás por apoiar este projeto.