

## **Análisis de la interacción de glifosato con “graphdiyne” prístino y con defectos**

Rossi Fernández, Ana C.; Jiménez, M. Julia; Juan, Julian; Sandoval, Mario G.; Belleli, Patricia G.;  
Jasen, Paula V.; González, Estela A.; Juan, Alfredo

1. Instituto de Física del Sur (IFISUR-CONICET) UNS. Av. Alem 1253 Bahía Blanca, Bs As

julia.jimenez@uns.edu.ar

Área temática: D. Fenómenos de Superficies

“Graphdiyne” (GDY), nuevo miembro de la familia del carbono bidimensional, que exhibe interesantes propiedades fisicoquímicas y electrónicas. Su estructura pi-conjugada con enlaces sp-sp<sup>2</sup> junto con los poros altamente distribuidos han atraído considerable atención en campos como electrocatálisis, separación de gases, remediación de agua, detección de humedad y aquellos relacionados con la energía. Por otro lado, vemos una profunda problemática ambiental en relación al uso generalizado de pesticidas para la producción agrícola que ha conducido a la contaminación de la superficie del suelo y el agua. El herbicida organofosforado glifosato (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>NO<sub>5</sub>P), de amplio espectro, es uno de los más utilizados y se ha vuelto tema de máxima preocupación en relación al impacto en el medio ambiente y la salud humana (responsable de efectos tóxicos agudos, endocrinos, efectos mutagénicos, carcinogénicos, genotóxicos y neurológicos). Por lo tanto, la contaminación del agua por el glifosato y su remoción se han vuelto temas centrales. El estudio a nivel molecular, mediante la utilización de métodos químico-cuánticos, es de gran importancia para comprender el proceso de adsorción del glifosato sobre GDY con el objetivo de comprender las interacciones existentes entre ambos y poder diseñar estrategias para su eliminación. Para el estudio se utilizó el código VASP, que se basa en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Los sistemas se modelaron mediante superceldas 2x2, de 72 y 71 átomos de C para GDY prístino y GDY con defecto (vacancia simple), respectivamente, con un vacío de 20 Å en la dirección normal. Se emplearon potenciales de correlación intercambio GGA-PBE con polarización de espín y la corrección de van der Waals (vdW) mediante el método DFT-D3 de Grimme. Se probaron distintas posiciones de la molécula, tanto en forma lateral como vertical a las superficies, acercando el grupo funcional fosfónico del glifosato o su grupo carboxílico. Las energías de adsorción (E<sub>ads</sub>) fueron todas de carácter exotérmico. Sobre GDY prístino prevalecen interacciones de carácter fisisortivo (fuerzas de vdW) las cuales fueron verificadas a través del programa Critic2; mientras que, sobre GDY con vacancia las E<sub>ads</sub> fueron de mayor magnitud evidenciando interacciones quimisorptivas. Se realizó un análisis de las cargas atómicas (método DDEC6) y cálculos de diferencias de densidad de cargas atómicas. En ambos casos se produce una transferencia de carga hacia la molécula.