

## GAP ELETRÔNICO DO COMPOSTO METAMIDOFÓS

III Congresso Online de Engenharia de Materiais. inscrições encerradas, 3ª edição, de 28/07/2021 a 31/07/2021  
ISBN dos Anais: 000000000000000

ROCHA; Adriano Santos da <sup>1</sup>, MODESTO; Tiago Dantas <sup>2</sup>

### RESUMO

A demanda por culturas agrícolas mais resistentes às pragas deteriorantes cresceu muito nos últimos anos, notadamente impulsionada pelo aumento da necessidade de alimentos. Essa dinâmica também pode ser observada pela intensificação do uso de pesticidas e herbicidas, como por exemplo o Brasil que se tornou o maior consumidor de agrotóxicos do mundo. Entre as formulações mais utilizadas se encontra o Acefato, um poderoso herbicida usado na proteção de colheitas como arroz, trigo, algodão, chá e tabaco. Ao interagir com o meio ambiente o Acefato sofre degradação química gerando o Metamidofós, altamente solúvel e mais tóxico que o anterior. Vale salientar que o uso dessas substâncias não ocorre sem o aparecimento de efeitos indesejáveis, se por um lado elas potencializam os ganhos na lavoura, seus efeitos toxicológicos sobre o meio ambiente e sobre as pessoas envolvidas diretamente na aplicação devem ser considerados. Nesse sentido, diversas metodologias tem sido utilizadas a fim de descrever esses efeitos. Neste trabalho, utilizou-se a técnica de química computacional, mas precisamente a Teoria do Funcional da Densidade, com o objetivo de obter os orbitais moleculares do Metamidofós citado anteriormente, por ser um produto do Acefato encontrado no meio ambiente. A obtenção desses orbitais moleculares permite o cálculo do Gap de Energia, uma quantidade que permite estimar a reatividade química do composto e até compará-lo, a outras substâncias disponíveis na literatura. Os cálculos foram realizados utilizando o software Gaussian 09 e os funcionais B3LYP, M05, MPW1PW91 e PBE1PBE. Os resultados obtidos demonstraram os seguintes valores de gap: B3LYP=6,37 eV, M05=6,82 eV, MPW1PW91=6,82 eV e PBE1PBE=6,91 eV. Resultados como esses são úteis no momento da avaliação e comparação com outros compostos, uma vez que estão ligados à reatividade e, dentro de certas análises, a sua toxicologia.

**PALAVRAS-CHAVE:** Dft, agrotóxicos, reatividade

<sup>1</sup> IFPA-Campus Castanhal, fisicaks@hotmail.com

<sup>2</sup> IFPA-Campus Castanhal, tiagokjmodestodmp90@gmail.com