

## ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN DE AGROQUÍMICOS ADSORBIDOS EN SUPERFICIES GRAFÉNICAS Y DE SÍLICA MEDIANTE SIMULACIONES MOLECULARES

**Diego Carvalho<sup>a</sup>, Jorge Cantero<sup>a,b</sup>, Rodrigo Manassi<sup>a</sup>, Claudia Pereyra<sup>a</sup>, Elena Alvareda<sup>c</sup>, Federico Iribarne<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Área Matemática, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, [fede@fq.edu.uy](mailto:fede@fq.edu.uy)

<sup>b</sup>Centro de Investigaciones Médicas (CIM), Facultad de Ciencias de la Salud - Universidad Nacional del Este. Ciudad del Este, Paraguay

<sup>c</sup>Water Department, CENUR, Universidad de la República, Salto, Uruguay, [alvareda@fq.edu.uy](mailto:alvareda@fq.edu.uy)

**Palabras clave:** Grafeno, sílica, agroquímicos, adsorción, ABF.

**Resumen.** La eliminación de agroquímicos del entorno es una de las principales metas de cuidado ambiental a nivel mundial. Su uso indebido deteriora la calidad de los alimentos y fomenta la aparición de diversas patologías. La remediación física mediada por adsorción es la técnica más utilizada para la depuración de vías fluviales, gracias a su alta eficiencia, estabilidad, escalabilidad y bajo costo. En este contexto, el estudio a nivel molecular de las interacciones entre herbicidas y superficies bidimensionales, incluyendo mediciones de energía de adsorción, puede proporcionar información relevante para la optimización del proceso de remediación. En este trabajo, se realizó un estudio teórico de dinámica molecular de equilibrio, en particular simulaciones de fuerza adaptativa sesgada (ABF) para evaluar la afinidad de los agroquímicos atrazina, clorpirifos, glifosato, ácido aminometilfosfónico (AMPA), glufosinato, rotenona y paraquat, hacia superficies de grafeno, óxido de grafeno y sílica hidroxilada, uno de los principales componentes de los suelos. Las trayectorias de equilibrio tuvieron una duración de 200 ps y las trayectorias ABF posteriores se extendieron durante al menos 200 ns. Todas las simulaciones se realizaron utilizando el programa NAMD. Para cada sistema, se calcularon las constantes de adsorción/desorción y el potencial de fuerza media (PMF) como un estimador de la energía libre de adsorción. Los resultados obtenidos ilustran la preferencia de las superficies grafénicas por compuestos poco polares como el paraquat y la atrazina, así como un ordenamiento de compuestos similares entre ambas superficies. Además, se observa en general una menor afinidad de los ligandos por la superficie de sílica.