

## ESTUDIO TEÓRICO DE LA INTERACCIÓN DE CONTAMINANTES AGRÍCOLAS ADSORBIDOS EN SUPERFICIES GRAFÉNICAS MEDIANTE SIMULACIONES MOLECULARES

### THEORETICAL STUDY OF THE INTERACTION OF AGRICULTURAL POLLUTANTS ADSORBED ON GRAPHENE SURFACES BY MOLECULAR SIMULATIONS

Rodrigo Manassi<sup>a</sup>, Jorge Cantero<sup>a</sup>, Diego Carvalho<sup>a</sup>, Claudia Pereyra<sup>a</sup>, Federico Iribarne<sup>a</sup> y Elena Alvareda<sup>b</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>c</sup>Water Department, CENUR, Universidad de la República, Salto, Uruguay, [alvareda@fq.edu.uy](mailto:alvareda@fq.edu.uy)

**Palabras clave:** Grafeno, herbicidas, adsorción, ABF.

**Resumen.** La remoción de pesticidas del ambiente constituye desde hace tiempo uno de los objetivos medio ambientales a nivel mundial. La remediación física mediada por el proceso de adsorción es la técnica más comúnmente utilizada para la purificación de cursos de agua, gracias a su alta eficiencia, estabilidad, escalabilidad y bajo costo (Ahmad et al., *Journal of Environmental Science and Health*, 28:231–271, 2010). En este trabajo, se realizó un estudio teórico basado en simulaciones de Dinámica Molecular de equilibrio y de fuerzas adaptivas sesgadas (ABF), con el fin de evaluar la afinidad de los herbicidas atrazina, paraquat glifosato, y aminometilfosfónico (ampa) hacia superficies bidimensionales de grafeno y óxido de grafeno. Se calculó la constante de adsorción y el potencial de fuerza media (Darve et al., *Molecular Simulation*, 28(1-2):113–144, 2002). Los resultados preliminares indican que la atrazina y el paraquat en ambas superficies, posee una mayor afinidad de unión que el glifosato y el ampa y se constata que la adsorción es más estable en grafeno que en su variante oxidada.

**Keywords:** Graphene, herbicide, adsorption, ABF.

**Abstract.** The removal of pesticides from the environment has long been one of the world's environmental objectives. Physical remediation mediated by the adsorption process is the most commonly used technique for the purification of watercourses, thanks to its high efficiency, stability, scalability and low cost (Ahmad et al., *Journal of Environmental Science and Health*, 28:231–271, 2010). In this work, a theoretical study based on equilibrium Molecular Dynamics and adaptive biased force (ABF) simulations was performed to evaluate the affinity of the herbicides atrazine, paraquat glyphosate, and aminomethylphosphonic acid (ampa) towards two-dimensional graphene and graphene oxide surfaces. The adsorption constant and potential mean force (Darve et al., *Molecular Simulation*, 28(1-2):113–144, 2002) was calculated. Preliminary results indicate that atrazine and paraquat on both surfaces have a higher binding affinity than glyphosate and ampa and adsorption is found to be more stable on graphene than on its oxidized variant.