sict SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DO IFG

ESTUDO DA ESTABILIDADE E PROPIEDADES ELETRÔNICAS DE FULERENOS C60 DOPADOS COM UM ÚNICO ÁTOMO ALCALINO (ENDOÉDRICO VS EXOÉDRICO) VIA CÁLCULOS DFT

VILELA, Allaor Pereira[1]

[1]Grupo de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares – GMCFAM, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás/Câmpus Jataí/Bacharelado em Engenharia Elétrica – Aluno, allaorvilela1@gmail.com.

LEMOS SILVA, Rodrigo Aparecido[2]

[2]Grupo de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares – GMCFAM, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás/Câmpus Jataí- Orientador, rodrigo.aparecido@ifg.edu.br.

Os fulerenos, em especial a nanomolécula de C_{60}, despertam grande interesse científico e tecnológico devido às suas propriedades estruturais e eletrônicas singulares. A modulação dessas propriedades por meio da dopagem com heteroátomos viabiliza avanços em nanotecnologia, permitindo a concepção de dispositivos nanoeletrônicos e nanossensores. Neste contexto, compreender o impacto da posição do átomo dopante, seja no interior da cavidade (dopagem endoédrica) ou na superfície externa (dopagem exoédrica), é fundamental para o *design* racional de novos nanomateriais. Este trabalho investigou teoricamente, por meio de cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), a influência da posição e do tipo de dopante (Lítio e Boro) na estabilidade energética e nas propriedades eletrônicas do fulereno C_{60}. A metodologia empregou o pacote de química quântica Gaussian 16. As estruturas foram pré-otimizadas via método semiempírico PM6 e posteriormente refinadas pelo nível teórico DFT/ωB97XD/6-31G(d)1415. A verificação dos mínimos locais de energia foi confirmada por cálculos de frequências vibracionais, ausentes de frequências imaginárias. Foram avaliadas a energia total (E_{total}), a energia dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), o gap de energia $\left(E_{\text{Gap}} = E_L - E_H\right)$, o momento de dipolo (P) e a transferência de carga parcial pelo método de população de Merz-Singh-Kollman (ESP). Os resultados obtidos demonstraram que a dopagem endoédrica proporciona maior estabilidade

energética aos sistemas, apresentando valores de energia total mais negativos para os composto B@C_{60} (-62861,303 eV) quando comparados ao sistema exoédrico $C_{59}B$ (-61829,278 eV). Em relação aos orbitais de fronteira, observou-se uma redução significativa do gap HOMO-LUMO nos sistemas endoédricos, atingindo 3,574 eV para o Li@C_{60} e 3,902 eV para o B@C_{60}, o que favorece o aumento da condutividade elétrica e da reatividade química em comparação ao C_{60} puro. A análise da distribuição de carga revelou que o Lítio atua como forte doador de elétrons (+0,773e). Contudo, o sistema B@C_{60} apresentou um momento de dipolo substancialmente superior (1,229 D) em relação ao Li@C_{60} (0,039 D), atribuído à maior separação de carga induzida pela eletronegatividade do Boro (2,04). Conclui-se que a dopagem endoédrica altera substancialmente o perfil eletrônico do C_{60}. Enquanto o sistema Li@C_{60} apresenta maior potencial para aplicações que demandam alta condutividade elétrica, o B@C_{60} destaca-se como a estrutura mais equilibrada, combinando elevada estabilidade energética, condutividade e notável polarização, consolidando-se como um excelente candidato para integração em nanossensores e dispositivos nanoeletrônicos orientados por campos elétricos externos.

Palavras-chave

Fulereno C_{60}; Teoria do Funcional da Densidade; Dopagem endoédrica; Físico-química computacional; Propriedades eletrônicas.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás. Agradecemos ao Centro de Computação de Alto Desempenho da UEG, e ao Laboratório de Modelagem Computacional de sistemas Físicos, Atômicos e Moleculares (LMCFAM) do IFG - Câmpus de Jataí, pelo apoio. O presente trabalho foi realizado com o apoio financeiro da Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), por meio do PROGRAMA DE RECUPERAÇÃO E EXPANSÃO DA INFRAESTRUTURA DE PESQUISA CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM UNIVERSIDADES E ICTS – PRÓ-INFRA 2023 /Edital, PROINFRA 2023 EXPANSÃO, sob o convênio nº 0463/2023 - projeto REF.: 0653/24 e por meio da CHAMADA PÚBLICA MCTI/FINEP/FNDCT/AÇÃO TRANSVERSAL - PROINFRA DESENVOLVIMENTO REGIONAL - NORTE, NORDESTE E CENTRO-OESTE - NNECO 2024 - projeto REF.: 0173/25.