sict SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DO IFG

ANÁLISE TEÓRICA DA ESTABILIDADE E PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FULERENOS C_{60} CO-DOPADOS COM NITROGÊNIO E BORO VIA CÁLCULOS DFT

SILVA, Isaac Rodrigues[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, rodriguesisaac632@gmail.com.

COUTO, Hugo Leonardo Carvalhaes[2]

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

LEMOS SILVA, Rodrigo Aparecido[3]

[3]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.

O fulereno C_{60} é uma gaiola carbônica de alta simetria cujas propriedades físico-químicas podem ser finamente ajustadas pela inserção de heteroátomos em sua rede conjugada. A dopagem substitucional com Boro, um aceptor de elétrons (tipo-p), e Nitrogênio, um doador de elétrons (tipo-n), surge como uma estratégia promissora para modificar o comportamento eletrônico da molécula. Contudo, a co-dopagem simultânea com o par N-B pode induzir a formação de dipolos locais e alterar drasticamente a reatividade e a estabilidade da nanomolécula. Este trabalho investigou teoricamente, via Teoria do Funcional da Densidade (DFT), a influência da co-dopagem N-B na estabilidade termodinâmica e nas propriedades eletrônicas do heterofulereno $C_{58}NB$, comparando-o aos sistemas monodopados ($C_{59}B$ e $C_{59}N$) e ao C_{60} puro. Os cálculos computacionais de estrutura eletrônica foram conduzidos no nível teórico ωB97XD/6-31G(d). Foram calculadas as energias totais (E_{total}), a energia de substituição (E_{sub}) dos heteroátomos na gaiola, as energias dos orbitais moleculares de fronteira HOMO (E_H) e LUMO (E_L), o gap de energia (E_{Gap}) e o momento de dipolo permanente (P). Os resultados revelaram que a inserção de um único átomo de Boro ou

Nitrogênio na superfície é energeticamente desfavorável, apresentando energias de substituição endotérmicas de +4,229 eV para o $C_{59}B$ e de +2,393 eV para o $C_{59}N$. Em contrapartida, a co-dopagem no sistema $C_{58}NB$ mostrou-se altamente exotérmica, com uma energia de substituição fortemente negativa de -5,267 eV, demonstrando que a presença simultânea do par N-B estabiliza termodinamicamente a estrutura. Quanto aos orbitais de fronteira, o $C_{58}NB$ exibiu uma redução expressiva no gap HOMO-LUMO para 4,475 eV em comparação aos 6,041 eV do C_{60} puro, conferindo-lhe caráter semicondutor e maior reatividade química. Além disso, a quebra de simetria molecular induzida pelos dopantes resultou em um elevado momento de dipolo permanente de 6,849 D no $C_{58}NB$, valor drasticamente superior ao do C_{60} , que pela simetria de carga e de estrutura apresenta um momento de dipolo de 0,000 D. Destaca-se ainda que o valor do dipolo permanente do $C_{58}NB$ também é consideravelmente maior que o valor observado para os sistemas monodopados. Conclui-se que a co-dopagem N-B altera profundamente o perfil quântico do fulereno. A elevada estabilidade termodinâmica aliada ao menor gap energético e à acentuada polaridade fazem do $C_{58}NB$ um promissor material para aplicações tecnológicas avançadas, tais como nanossensores, componentes nanoeletrônicos e sistemas responsivos a campos elétricos externos.

Palavras-chave

Heterofulerenos; Co-dopagem N-B; Teoria do Funcional da Densidade; Gap HOMO-LUMO; Nanotecnologia.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás. Agradecemos ao CNPq pela bolsa concedida. 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.