

## ESTUDO COMPUTACIONAL DA ESTABILIZAÇÃO DE PENTACENOS PELA PRESENÇA DE ÁTOMOS DE ENXOFRE, OXIGÊNIO E AMINAS

Janlucca B. Mirasol<sup>1</sup>, Leonardo T. Ueno<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Universidade do Vale do Paraíba, Av. Shishima Hifumi

<sup>2</sup> Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Praça Marechal Eduardo Gomes

**Introdução.** Os n-acenos são compostos com elevado potencial para aplicações em células voltaicas, destacando-se o pentaceno, sendo caracterizados como semi-condutores orgânicos.

**Objetivos.** O aumento no número de anéis benzênicos na cadeia dos acenos aumenta seu caráter radicalar, ou seja, sua instabilidade, portanto, o presente trabalho busca avaliar a estabilização do pentaceno, por meio da dopagem química em posições específicas de átomos de carbono na cadeia por dois átomos de enxofre, oxigênio ou nitrogênio (isolado ou ligado ao hidrogênio).

**Metodologia.** O estudo computacional foi desenvolvido utilizando o *software Gaussian09* para a otimização das geometrias das estruturas moleculares, a partir do funcional B3LYP e base atômica Def2-TZVP, assim, obteve-se os *gaps* HOMO-LUMO e singleto-triplete, os quais são indicadores de estabilidade. Ademais, o *software Multiwfn* foi usado para cálculo do HOMA (*harmonic oscillator model of aromaticity*), que oferece uma estimativa da aromaticidade para cada anel da estrutura.

**Resultados.** As substituições na posição *para*, ou seja, diametralmente oposta, para substituintes O, S e NH, aumentam os valores de *gap* HOMO-LUMO e singleto-triplete, já os valores de HOMA diminuem para o anel em que se encontram, porém aumenta o valor da aromaticidade para os anéis adjacentes. Entretanto, não foi verificada nenhuma diferença significativa para substituições N.

**Conclusão.** As substituições que ocorrem no mesmo anel, em posição *para*, para substituintes O, S e NH, resultam em um aumento da estabilidade e “isolamento” do anel em relação ao resto da cadeia, por exemplo, caso ocorra no anel central, os demais anéis comportam-se como naftalenos.

**Palavras-chave:** Acenos, estabilidade, dopagem.

**Área de Concentração:** Nanotecnologia