

# Análise de Estruturas Exóticas Metaestáveis Ionizadas Derivadas de Anéis Heterocíclicos Aromáticos

A. Lipman Perlin<sup>1\*</sup>, R. Rodrigues de Oliveira Junior<sup>1</sup>, W. Wolff<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro – RJ - Brasil

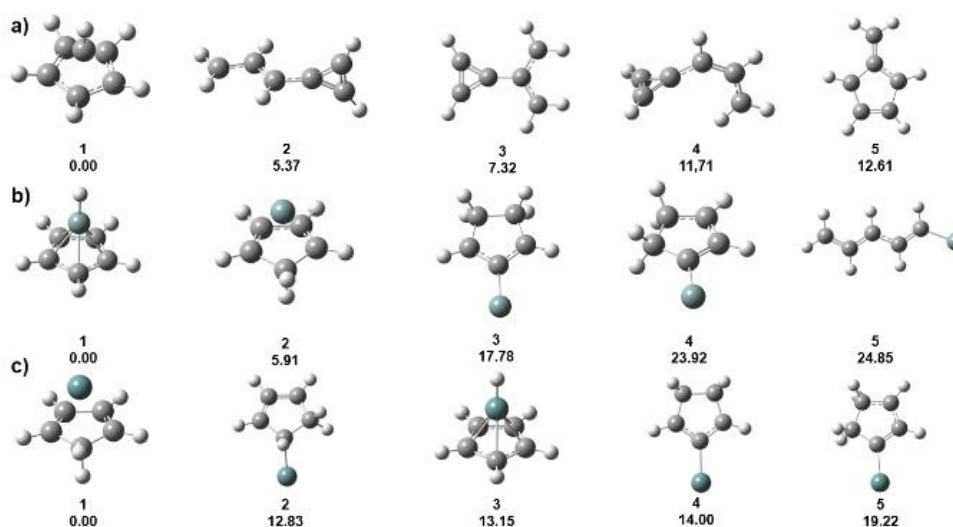
<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro – RJ - Brasil

\*email: amirperlin.94@gmail.com

A detecção de espécies duplamente ionizadas,<sup>1</sup> assim como a determinação da geometria de mínimo global do benzeno<sup>2</sup> influenciou estudos do mecanismo de fragmentação e do mapeamento das possíveis estruturas de intermediários e produtos. Em particular das espécies,  $C_6H_6^{2+}$ ,  $C_6H_5^{2+}$ ,  $C_6H_4^{2+}$  e  $C_6H_3^{2+}$ .<sup>3</sup> Nesse estudo empregou-se o programa AUTOMATON<sup>4</sup> utilizando em um algoritmo genético para a busca de estruturas mínimo global. Nesse novo estudo, busca-se verificar se há uma recorrência na produção da estrutura piramidal ao substituir um dos átomos de carbonos por outros átomos.

Inicialmente realizou-se uma busca global em nível DFT com o programa AUTOMATON acoplado ao Gaussian, utilizando o funcional PBE0 na base 6-31G(d,p). As espécies estudadas até o momento são os cátions da família 13,  $C_5H_6X^+$  ( $X = B, Al$  e  $Ga$ ) e dicátions das famílias 14 e  $C_5H_6Y^{2+}$  ( $Y = C, Si$  e  $Ge$ ). As dez estruturas de menor energias foram reotimizadas no mesmo funcional com a base cc-pVTZ, com cálculo de frequência e correção de energia de ponto zero (ZPE). Por fim, realizou-se um cálculo *single-point* CCSD(T) na mesma base. Para a análise, organizou-se as cinco estruturas de menor energia em ordem crescente na escala Kcal.mol<sup>-1</sup>.

A figura a seguir apresentam os resultados obtidos para a família 14, inicialmente estudada:



**Figura 1:** Isômeros de menor energia das espécies a)  $C_6H_6^{2+}$ , b)  $C_5H_6Si^{2+}$  e c)  $C_5H_6Ge^{2+}$

Os resultados indicam que a produção das estruturas piramidais não está limitada apenas ao benzeno, como mostrado quando se substitui por um átomo de Si ou Ge. Obteve-se outro arranjo piramidal para a espécie contendo Ge, onde todos os hidrogênios estão ligados aos carbonos da base.

## Referências

1. KROGH-JESPERSEN, K. Journal of the American Chemical Society, v. 113, n. 2, p. 417–423, 1991.
2. J. Jašík, D. Gerlich, J. Roithová, J. Am. Chem. Soc., 2014, 136, 2960–2962.
3. O. Yañez, R. Báez-Grez, D. Inostroza, W. Rabanal-León, R. Pino-Rios, J. Garza, W. Tiznado, J. Chem. Theory Comput., 2019, 15, 1463-1475.
4. W. Wania, *et al.* J. Phys. Chem. A 2020, 124, 44, 9261–9271.