

Simulações espectroscópicas de fulerenos hidrogenados

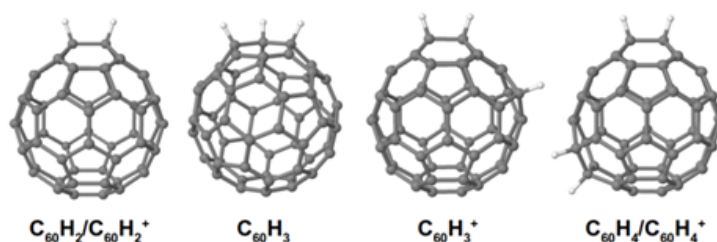
Ricardo R. Oliveira (PQ),^{1*} Germán Molpeceres (PQ),² Ricardo Montserrat (PG),¹ Felipe Fantuzzi (PQ),³ Alexandre B. Rocha (PQ)¹ e Johannes Kästner (PQ).⁴

rodrigues.iq@gmail.com

¹Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil. ²Department of Astronomy, Graduate School of Science, The University of Tokyo, Tokyo 113 0033, Japan. ³School of Chemistry and Forensic Science, University of Kent, Canterbury CT2 7NH, UK. ⁴Institute for Theoretical Chemistry, University of Stuttgart, Stuttgart, Germany

A presença do fulereno (C_{60}) no meio interestelar (*interstellar medium*, ISM) foi proposta a partir de duas bandas de absorção (9632 Å e 9577 Å) relativas ao espectro eletrônico da espécie ionizada (C_{60}^+). Essas transições estão na região do infravermelho próximo e fazem parte do conjunto das bandas interestelares difusas (*diffuse interstellar bands*, DIBs). Devido a presença de uma grande quantidade de átomos de hidrogênio no ISM, é esperado que fulerenos hidrogenados e seus cátions, $C_{60}H_n^{+q}$, sejam formados. Em particular, o $C_{60}H_4$ já foi detectado em laboratório junto com o $C_{60}H_{18}$ e $C_{60}H_{36}$.^{1,2} Dessa forma, o objetivo do presente trabalho é a simulação de propriedades estruturais e espectroscópicas de fulerenos hidrogenados com a composição $C_{60}H_n^{+q}$ ($n=0-4$, $q=0,+1$) para auxiliar na detecção dos mesmos. As estruturas dos isômeros de baixa energia foram geradas a partir da rotina de obtenção de sítios de protonação implementada a rotina *Conformer-Rotamer Ensemble Sampling Tool* (CREST) acoplado ao programa *extended tight-binding* (xtb) em nível GFN2-xTB. As geometrias foram refinadas realizando cálculos de otimização de geometria e frequências vibracionais para a simulação do espectro na região do infravermelho e também para o cálculo do potencial de ionização (PI) e afinidade por prótons (AP). Esses cálculos foram realizados em nível DFT com o funcional B3LYP e a base def2-TZVP. A partir das geometrias otimizadas, cálculos de transição vertical em nível TDDFT utilizando o funcional r²SCAN foram realizados com 300 estados para a simulação do espectro de absorção com a mesma base. Todos os cálculos *tight-binding* e DFT foram realizados nos programas xtb 6.4 e ORCA 5.0, respectivamente. A partir dos resultados dos cálculos de PI e AP foi possível concluir que todas as espécies hidrogenadas apresentam PI menor e AP maior do que o C_{60} . Na Figura 1 estão presentes as estruturas de mínimo global obtidas neste trabalho.

Figura 1 – Estruturas de mínimo global.



Diversos derivados do C_{60} apresentam transições eletrônicas na região do infravermelho próximo e são candidatos à detecção astronômica.

Referências

- ¹ Y. Zhang, S. Kwok e S. Sadjadi, J Phys Conf Ser, 2016, 728 052004.
- ² Y. Zhang, S. Sadjadi, C. Hsia e S. Kwok, Astrophys. J., 2017, 845, 76.

Agradecimentos

RRO agradece ao CNPq, a CAPES e a FAPERJ (JCNE, N° DO PROCESSO E-26/200.249/2023). Agradece também ao LNCC por fornecer recursos computacionais via supercomputador SDumont.