



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Propriedades do estado fundamental e excitado de derivados do 1,3-benzoselenazol
Autor	BRUNO WAGNER DREGER
Orientador	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

Propriedades do estado fundamental e excitado de derivados do
1,3-benzoselenazol.

Bolsista: Bruno W. Dreger

Orientador: Paulo F. B. Gonçalves

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Grupo de Química Teórica. Av. Bento Gonçalves, 9500, Porto Alegre-RS.

O presente trabalho tem como objetivo realizar um estudo fotofísico, analisando os estados fundamentais e excitados de derivados do 1,3-benzoselenazol, em diferentes solventes. Nesse estudo, foram utilizados a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e a Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo (TD-DFT), realizados no programa Gaussian 16. O funcional utilizado nesse estudo foi o CAM-B3LYP com função de base/jun-cc-pVDZ. Os efeitos do solvente foram avaliados utilizando o Modelo do Continuum Polarizável (PCM), com Acetonitrila, Diclorometano e 1,4-Dioxano, solventes de diferentes constantes dielétricas. A transferência de carga Δr foi avaliada durante a excitação dos elétrons. É possível verificar que o estado S1 foi aquele que apresentou a maior força do oscilador entre os 10 estados excitados considerados e os orbitais envolvidos nesta transição são HOMO e LUMO para todas as estruturas. Com os cálculos de ICT, foi observado que as moléculas com o grupo nitro, apresentam ICT, por terem um valor muito elevado de Δr . Em comparação, o comprimento de onda, tanto no estado fundamental quando no S1 foram similares com o experimental, isso mostra que o CAM-B3LYP está descrevendo bem o sistema. Por outro lado, a energia de excitação mostrou uma diferença do experimental, que não conseguiu identificar uma tendência nos resultados. Uma clara tendência foi identificada, na energia de excitação em meio polar, como na Acetonitrila, foram menores do que em meio apolar como no 1-4 Dioxano. Com isso podemos afirmar que o S1 estabiliza em meio polar.