**Área temática:** Ciências Exatas e da Terra

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E VIBRACIONAIS DA P-AMINODIFENILAMINA POR MÉTODO DFT**

Amanda Sahory Nunes Serafim, Sophia Victoria Santos, Roner Ferreira da Costa, Eveline Matias Bezerra

A Embrapa Instrumentação Agropecuária tem investido em novas tecnologia visando a preservação do meio ambiente. A utilização dos chamados “defensivos agrícolas”, vem crescendo em todo o mundo pois conforme a população aumenta, vê-se a necessidade de produzir mais alimentos. Porém a utilização inadequada dessas substâncias pode levar a contaminação da água dos rios e lençóis freáticos. A caracterização das substâncias via modelagem computacional ajuda a reduzir custos com o desenvolvimento de projetos. Aliado a isso a fabricação de sensores poliméricos tem sido de grande interesse tecnológico, impulsionado pela possibilidade de ajustar quimicamente suas propriedades óticas e eletrônicas. Os estudos na área de material, principalmente na área de polímeros condutores mostra-se importante nesse contexto, pela possibilidade de desenvolvimento de unidades sensoriais capazes de determinar pesticidas em água. Dentre os polímeros condutores intrínsecos, a polianilina formada por monômeros de anilina, tem se destacado. Com o objetivo de utilizar ferramentas computacionais diversas , métodos quânticos semi‐empíricos e efetuar cálculos de primeiros princípios, no presente trabalho, dando continuidade à trabalhos anteriores, foi feito um estudo das propriedades vibracionais da polianilina ao longo da cadeia polimérica, através da Teoria do Funcional da Densidade com o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-311++G(d,p) no vácuo. Para isso foi realizada análise e caracterização do dímero e do trímero da polianilina. Segundo os cálculos realizados no dímero e no trímero, ambos apresentaram apenas um confôrmero de mais baixa energia. E finalmente, foram obtidos os espectros IR e Raman possuindo o dímero e o trímero respectivamente 71 e 108 modos normais de vibração.

**Palavras-chave:** DFT. Modelagem molecular. Agrotóxicos. Polímeros Condutores.

**Agência financiadora:** Bolsista IC PICI - UFERSA