

ESTUDO TEÓRICO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS NÃO LINEARES DE TERCEIRA ORDEM DE DERIVADOS DE CUMARINA (APOIO UNIP)

Aluna: Larissa Ferreira Lima

Orientador: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

Curso: Engenharia Civil

Campus: Goiânia Flamboyant

Neste trabalho estudamos as propriedades elétricas de dois derivados cumarínicos, cuja diferença decorre da mudança de substituintes na posição 3 do anel benzênico pendente ($C_{18}H_{15}NO_3$) e ($C_{18}H_{15}NO_4$). Utilizamos a abordagem supramolecular para tratar as moléculas sob o efeito do ambiente cristalino para calcular o momento dipolo, a polarizabilidade linear e a hiperpolarizabilidade de segunda ordem, para as moléculas isoladas e envolvidas, incluindo os casos estáticos e dinâmicos e a presença de solventes. As (hiper)polarizabilidades foram derivadas de um processo iterativo e de um procedimento computacional *ab initio*. Além disso, também calculamos as energias HOMO-LUMO. Neste ponto, o objetivo é verificar o efeito da troca de substituintes na energia de *Band-Gap*, um importante parâmetro relacionado às propriedades de excitação de compostos cumarínicos.