

GRUPO DE PESQUISA:

GRUPO DE PESQUISA EM ENGENHARIA DE MATERIAIS

LÍDER: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

INTEGRANTES: Dr. Basílio Baseia, Dr. Francisco Aparecido Pinto Osorio, Prof. Adailton Neres de Castro, Profa. Daphne Cristine Fernandes, Profa. Erlucivânia Bueno da Silva, Prof. Florisberto Garcia dos Santos, Prof. Rosemberg Fortes Nunes Rodrigues, Prof. Sixelizio Alves de Lima e Castro, Andre Duarte da Silva, Gabriela Rodrigues Vaz, João Victor Batista Soares e Ítalo Nuta Ribeiro

O “Grupo de Pesquisa em Engenharia de Materiais” (GPEM) surgiu em 2018, em Goiânia, Goiás, ainda restrito à área da Engenharia, Química e Física, com o objetivo de atuar no desenvolvimento e aplicação de métodos de mecânica quântica molecular na modelagem de sistemas orgânicos que apresentem interesse tecnológico. O GPEM está envolvido na síntese, na determinação experimental, na modelagem e desenvolvimento de métodos de cálculos que permitem a descrição meticulosa das propriedades de sistemas moleculares reais. Nossa atenção está direcionada, principalmente, na simulação de dinâmica molecular quântica usando DFT via Gaussian ou ondas planas via SIESTA ou VASP. Também trabalhamos na determinação experimental de estruturas cristalinas usando a difração de raios-X, com impacto direto no desenvolvimento de novos compostos e nas ciências dos materiais.

O GPEM tem por objetivo dar continuidade aos nossos estudos recentemente desenvolvidos, submetidos e publicados: neles nos envolvemos nos cálculos de propriedades lineares e não lineares de novos cristais orgânicos produzidos em laboratório, preparados por diversas técnicas e determinados estruturalmente por raios-X, usando variadas técnicas tratando diversos tipos de cristais. O escopo desses cálculos tem duas vertentes: uma

delas consiste em entender as características de novos cristais orgânicos, a partir de primeiros princípios, bem como seu comportamento ante a ação de campos elétricos externos, estáticos e dinâmicos, e como eles afetam o cristal com respeito ao seu caráter anisotrópico; a segunda vertente consiste na procura de propriedades de destaque, de interesse aplicativo. Acreditamos que esse projeto posto em execução contribuirá para um desenvolvimento ainda maior do Grupo de Pesquisa que já opera nessa área há algum tempo, dispondo de alguma tradição na determinação das propriedades não lineares mencionadas.