

O ESTUDO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS NÃO LINEARES EM DERIVADOS DE TIAZINA (APOIO UNIP)

Aluno: João Batista Gomes da Silva

Orientador: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

Curso: Física

Campus: Goiânia – Flamboyant

Este trabalho de pesquisa teve como objetivo principal comparar as propriedades ópticas não lineares de dois derivados de tiazina, o RDDPTO e o DDPTO, a fim de avaliar seu potencial para aplicações em dispositivos ópticos e fotônicos. Para a análise, foi empregada uma abordagem mista, que combinou métodos computacionais avançados, como a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), com técnicas experimentais, incluindo espectroscopia de infravermelho (FTIR), espectroscopia ultravioleta-visível (UV-Vis) e análise de superfície de Hirshfeld. A metodologia permitiu uma investigação detalhada das propriedades eletrônicas, estruturais e das interações intermoleculares dos compostos. Os resultados revelaram que, apesar de possuírem estruturas cristalinas muito semelhantes, a molécula RDDPTO apresentou maior deslocalização eletrônica, o que foi evidenciado por sua absorção de luz em um comprimento de onda maior (244 nm), em comparação com a DDPTO (238 nm). Adicionalmente, os cálculos teóricos apontaram a RDDPTO como mais reativa e com maior capacidade de aceitar elétrons. A análise espectroscópica e das interações intermoleculares confirmou que os dois compostos apresentam perfis de reatividade e impressões digitais estruturais únicas. Conclui-se, portanto, que a molécula RDDPTO é a mais promissora para o desenvolvimento de novas tecnologias no campo da fotônica, graças às suas propriedades eletrônicas superiores.