



XIV Seminário de Iniciação Científica
Universidade Federal de Juiz de Fora
15 a 17 de outubro de 2008



Área: Ciências Exatas e da Terra

Projeto: CÁLCULO DE PROPRIEDADES MOLECULARES E ÓPTICAS NÃO LINEARES DE DERIVADOS DE OXOCARBONOS E NANOTUBOS DE CARBONO FUNCIONALIZADOS: PROPOSIÇÃO DE NOVOS MATERIAIS COM POTENCIAL APLICAÇÃO TECNOLÓGICA

Orientador: Hélio Ferreira Dos Santos

Bolsistas:

Diego Fernando Da Silva Paschoal (XVI PIBIC)

Leonardo Aparecido De Souza (XVI PIBIC)

Participantes:

Georgia Maria Amaral Junqueira (Co-Orientador)

Resumo:

O presente projeto tem como proposta geral a utilização de métodos quânticos e clássicos para a avaliação de propriedades moleculares e ópticas não-lineares (ONL) de derivados de oxocarbonos e nanotubos de carbono funcionalizados, tendo como meta a proposição de novos materiais com aplicação tecnológica. O projeto foi dividido em duas grandes linhas de pesquisa tendo como foco central o cálculo de propriedades elétricas dos sistemas mencionados anteriormente. Nesse sentido, os estudantes envolvidos com a pesquisa no nível de IC desenvolveram seus estudos preliminares em questões mais fundamentais da proposta, relacionadas ao entendimento do formalismo e avaliação da adequação das diferentes aproximações teóricas. Os sub-projetos discutidos nesse seminário são: (i) Estudo Teórico de Propriedades Molecular e Óptico Não-Linear de Derivados Porfirínicos do Tipo Push-Pull e (ii) Cálculo de Propriedades Elétricas de Moléculas Diatômicas: Avaliação da Teoria e Desenvolvimento de Novas Funções de Base.