

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XIV Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos da Pós-Graduação

São Carlos
2024

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado
por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.
358p.

Texto em português.

1.Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

133

Análise de componentes principais em propriedades ópticas lineares e não-lineares de moléculas do grupo das chalconas

MENDONÇA, Cleber Renato¹; INACIO, Anna Cristina Cavallari¹; MISOGUTI, Lino¹; OSPINA, Orlando David Marbello¹

anna.inacio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na área de Fotônica, nas últimas décadas, há um grande interesse no desenvolvimento de novas tecnologias e dispositivos em diversas áreas como, por exemplo, microscopia, telecomunicações e medicina. Compostos orgânicos ganharam destaque pela sua abrangente gama de aplicações e possibilidade de modulação das características ópticas por engenharia molecular, se tornando um comum alvo de estudo na óptica não-linear. Esse tipo de estudo é complexo pois diversos fatores inter-relacionados podem influenciar a eficiência da absorção não-linear em moléculas orgânicas, entre eles, a estrutura molecular e a relação aceitador/doador de grupos periféricos, que, em geral, são analisadas manualmente de forma fenomenológica ou através de demorados cálculos quânticos. Métodos computacionais de aprendizado de máquina vêm sendo empregados com o objetivo de facilitar a análise e interpretação de dados. Análise de Componentes Principais, ou *Principal Component Analysis* (PCA) é um tipo de aprendizado de máquina não supervisionado, capaz de reduzir dimensionalmente bases de dados complexas preservando o máximo de informação, simplificando a interpretação das variáveis e possibilitando a seleção das principais características (1). Esse trabalho tem como proposta empregar PCA, em uma base de dados composta por moléculas orgânicas do grupo das Chalconas, previamente estudadas pelo Grupo de Fotônica/IFSC USP. Essa base de dados consiste em propriedades ópticas lineares, como comprimento máximo de absorção linear, e não-linear, como o valor da seção de choque não-linear de cada molécula e o espectro de absorção não-linear. O modelo de PCA foi aplicado aos espectros de absorção não-linear das moléculas e, de forma independente, às propriedades lineares das moléculas para que pudéssemos observar diferentes categorizações da nossa base de dados e obter um estudo mais detalhado sobre ela. Posteriormente, propomos desenvolver uma rede neural artificial baseada nos resultados obtidos pelo estudo de PCA como forma de otimizar a escolha de novas moléculas orgânicas para estudos de óptica não-linear.

Palavras-chave: PCA; Óptica não-linear; Moléculas orgânicas

Agência de fomento: CAPES (88887.803864/2023-00)

Referências:

1 SHE, H. Principal component analysis. In: LIU, L.; ÖZSU, M.T. (ed.) **Encyclopedia of database systems**. Berlin: Springer, 2009. p. 2136-2136.