

Universidade de São Paulo Instituto de Física de São Carlos

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

13^a edição

Livro de Resumos

São Carlos
2023

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

PG44

Seleção de moléculas orgânicas para estudos de óptica não-linear através da ferramenta computacional MolShaCS

INACIO, Anna Cristina Cavallari¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

anna.inacio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Um dos pilares da área de Fotônica não linear é o desenvolvimento de novas tecnologias e dispositivos e, para isso, é necessário um estudo detalhado de materiais que possam ser utilizados em novas aplicações, ou seja, que apresentem boa resposta não linear. Este trabalho propõe uma maneira de selecionar moléculas orgânicas que apresentam melhor resposta não linear e, portanto, apresentam melhor aplicabilidade tecnológica, através do uso da ferramenta computacional *MolShaCS*. (Molecular Shape and Charge Similarity), desenvolvida pelo grupo de pesquisa de biotecnologia molecular do IFSC/USP. (1) Pretendemos analisar moléculas orgânicas a partir de sua estrutura e carga, obtendo um índice de similaridade entre elas e moléculas que já tiveram seus processos não lineares bem estudados e apresentaram bom resultados. Desta forma, seria possível sugerir novas moléculas com potencial para serem aplicadas em óptica não-linear. A classificação obtida computacionalmente será avaliada através da comparação de resultados obtidos com técnicas experimentais de absorção não linear já conceituadas e comumente usadas na área de Óptica não linear.

Palavras-chave: Óptica não-linear. Moléculas orgânicas. Absorção não-linear.

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

Referências:

1 DE LIMA, L. A. C. V.; NASCIMENTO, A. S. MolShaCS: a free and open source tool for ligand similarity identification based on Gaussian descriptors. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v. 59, p. 296-303, 2013. DOI: 10.1016/j.ejmech.2012.11.013.