

**Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos**

**XII Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos**

**Livro de Resumos**

**São Carlos  
2022**

# Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

## Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

## Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

## Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Titulo

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

## PG13

### Análise da inclusão de grupos periféricos na resposta óptica não linear em derivados de imidazo[4,5-b]piridina

OSPINA, Orlando Marbello; MENDONÇA, Cleber; VALVERDE, João Victor; BONI, Leonardo de; PELOSI, André; COCCA, Leandro Zucolotto; PIGUEL, Sandrine

omarbelo@usp.br

A absorção de dois fótons é um fenômeno não linear que tem sido utilizado em diversos tipos de aplicações e dispositivos fotônicos, que incluem armazenamento óptico 3D, microscopia de fluorescência, limitação óptica e comutação óptica, para citar alguns. (1) Com o desenvolvimento da ciência dos materiais, foi possível sintetizar e explorar materiais com características que facilitam esse processo. Além disso, estudos anteriores mostram que as propriedades óticas não lineares do material e a seção de choque de absorção de dois fótons (2PA) aumentam com a conjugação eletrônica da molécula e com a presença de estruturas de carga simétricas e antissimétricas (estruturas push-pull). (1-2) Muitos trabalhos mostram que compostos orgânicos com estrutura eletrônica pi-conjugada têm grande eficácia em processos de absorção de multifótons. A imidazo[4,5-b]piridina é um grupo de compostos orgânicos heterocíclicos com estrutura química com características semelhantes às do material ativo de dois fótons. Além disso, essa molécula permite a incorporação de diferentes grupos periféricos. Assim, é possível explorar a relação entre a estrutura molecular com as propriedades eletrônicas e ópticas em função da configuração geométrica e a força de retirada ou liberação de elétrons (que é determinada pelo parâmetro de Hammet). (2-3) Por esta razão, a caracterização óptica de seis derivados de imidazo[4,5-b]piridina foi realizada utilizando a técnica Z-scan, assim como outras técnicas de espectroscopia óptica. Portanto, neste trabalho foi investigado a variação das propriedades fotofísicas e a resposta óptica não linear do material devido à adição de grupos periféricos que atuam como receptores e doadores de elétrons. Além disso, simulações estruturais e energéticas usando química quântica (Gaussian16) e o modelo teórico de soma de estados essenciais (SOS) foram aplicados para dar suporte aos resultados experimentais. Como resultado principal, verificou-se que as moléculas com uma maior conjugação eletrônica ou uma estrutura dipolar definida (D-pi-A ou A-pi-A) mostram uma melhor resposta nos processos de transferência de carga, assim como uma maior seção de choque de dois fótons.

**Palavras-chave:** Absorção de dois fótons. Compostos orgânicos. Propriedades óticas não lineares.

**Agência de fomento:** CAPES (Não se aplica)

#### Referências:

- 1 ZHANG , Q. *et al.* Nonlinear optical response and two-photon biological applications of a new family of imidazole-pyrimidine derivatives. **Dyes and Pigments**, v. 126, p. 286–295, 2016.
- 2 BRENLLA, A. *et al.* Photoinduced proton and charge transfer in 2-(2'-Hydroxyphenyl) imidazo[4,5-b]pyridine. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 117, n. 3, p. 884–896, 2013.
- 3 PELOSI, A. G. *et al.* Influence of electron-withdrawing groups in two-photon absorption of

imidazopyridines derivatives. **Dye Pigment**, v. 198, 2022, DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.109972.