

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS NÃO LINEARES DE UM DERIVADO DE CHALCONA USANDO A METODOLOGIA DE SUPERMOLÉCULA (APOIO SANTANDER/UNIP)

Alunos: Mikaela Resplande Almeida e Alene Pardino de Souza

Orientador: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

Curso: Engenharia Civil

Campus: Goiânia - Flamboyant

As chalconas são compostos orgânicos com notáveis propriedades ópticas não lineares, despertando grande interesse científico. Este estudo analisa as propriedades ópticas do composto (E)-3-(4-hydroxyphenyl)-1-p-tolylprop-2-en-1-one usando a abordagem de supermolécula. Foram realizados cálculos dos orbitais moleculares HOMO e LUMO e elaborado um mapa de potencial eletrostático para identificar os sítios de reatividade química da molécula. Observou-se uma diferença de energia HOMO-LUMO de 150,02 kcal/mol, indicando que a molécula possui potencial como agente oxidante, capaz de participar em processos oxidativos à temperatura ambiente ou com leve aquecimento. Essa reatividade amplia seu espectro de aplicabilidade tecnológica. Os descritores químicos indicam que a molécula possui baixa dureza global, tornando-a mais polarizável, o que justifica os valores encontrados para energia de gap e seu potencial de ionização. A presença de anéis aromáticos na estrutura indica alta absorção no espectro ultravioleta, enquanto o espectro infravermelho mostra alta absorção nos álcoois. Conclui-se que a metodologia de supermolécula é eficaz para avaliar propriedades ópticas não lineares, mostrando que a molécula estudada tem grande potencial em aplicações tecnológicas, especialmente como agente oxidante. A análise dos descritores químicos sugere que a molécula possui alta estabilidade e é capaz de interagir significativamente com outras espécies químicas, especialmente em termos de aceitação e doação de elétrons.