

CÁLCULO DAS PROPRIEDADES ELÉTRICAS DA THIOUREA EM MEIO SOLVENTE

Leonardo de Oliveira Borges¹
Clodoaldo Valverde²

Resumo (ou Abstract, ou Resumen):

Os compostos orgânicos possuem vantagem sobre os materiais inorgânicos pois, as propriedades ópticas não-lineares (NLO) podem ser manipuladas, mudando os substituintes e os grupos funcionais nos reagentes de partida. O interesse na investigação de compostos orgânicos que exibem propriedades NLO vem crescendo nos últimos anos, motivados pela sua importância tecnológica para aplicações em dispositivos fotônicos. Neste trabalho vamos utilizar o estudo de orbitais moleculares que é uma ferramenta poderosa quando o assunto é reatividade química em nível atômico. Dentre os orbitais de uma molécula destacam-se os orbitais de fronteira, HOMO (Orbital Molecular Ocupado de maior energia, do inglês *Highest Occupied Molecular Orbital*) e o LUMO (Orbital Molecular Desocupado de menor energia, do inglês *Lowest Occupied Molecular Orbital*). Um dos estudos desses orbitais serve como uma medida da excitabilidade da molécula em que o HOMO se encontra na banda de valência região ocupada por elétrons semilivres e o LUMO na banda de condução parcialmente preenchida. Para transitar entre esses orbitais o elétron precisa obter ou liberar uma determinada energia que é definida como energia de Gap ou Gap de energia. Com base nessas informações realizamos um estudo utilizando a Teoria do Funcional Densidade (DFT), para obtermos os valores dos orbitais de fronteira, do Gap de energia e assim compreender melhor a estrutura eletrônica da Thiourea.

Palavras-Chave (ou Keywords, ou Palabras Clave): NLO; Teoria do Funcional Densidade; Compostos orgânicos.

CALCULATION OF ELECTRICAL PROPERTIES OS THIOUREA IN SOLVENT MEDIUM

Abstract (Ou Resumo):

Organic compounds have an advantage over inorganic materials since the nonlinear optical properties (NLO) can be manipulated by changing the substituent's and functional groups on the starting reactants. The interest in the investigation of organic compounds that exhibit NLO properties has been growing in recent years, motivated by its technological importance for applications in photonic devices. In this work we will use the study of molecular orbital's which is a powerful tool when the subject is chemical reactivity at the atomic level. Among the orbital's of a molecule are the boundary orbital's, HOMO (Higher Occupied Molecular Orbital) and LUMO (Low Occupied Molecular Orbital). One of the studies of these orbital's serves as a measure of the excitability of the molecule in which HOMO is in the electron-occupied region valence band and LUMO in the

¹Graduando (Engenharia Agrícola, Universidade Estadual de Goiás, Brasil). leosundher@gmail.com

²Pós-Doutor (Física, Universidade Estadual de Goiás, Brasil). Universidade Estadual de Goiás, Brasil. valverde@ueg.br

partially filled conduction band. To move between these orbital's the electron needs to obtain or release a certain energy that is defined as energy Gap or Gap energy. Based on this information we perform a study using the Functional Density Theory (DFT), to obtain the values of the border orbital's , of the energy Gap and thus better understand the electronic structure of Thiourea.

Keywords(ou Palavras-Chave): NLO; Functional Density Theory; Organic Compounds.