



Universidade Federal da Paraíba  
Centro de Ciências Exatas e da Natureza  
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

## Ciclo de Colóquios 2019.2

# *Seminário nº 14*

## “Cálculo das propriedades ópticas lineares e não lineares de monocristais, usando o método supermolécula”

**RESUMO:** Neste colóquio iremos apresentar os cálculos das propriedades ópticas lineares e não lineares de alguns monocristais, usando o método supermolécula, também iremos apresentar os resultados para o momento de dipolo ( $\mu$ ), polarizabilidade linear média ( $\alpha$ ) e segunda hiperpolarizabilidade média ( $\gamma$ ), estática e dinâmica. Os efeitos de polarização do ambiente cristalino serão inseridos através da abordagem de supermolécula (*SM*), juntamente com o processo iterativo de polarização eletrostática, o qual é baseado na convergência do momento de dipolo. O momento de dipolo foi determinado através dos métodos, Teoria de Perturbação de Møller-Plesset (*MP2*) e Teoria do Funcional da Densidade (*DFT*), usando o conjunto de funções base 6 - 311 ++ *G(d,p)*. Adicionalmente, iremos apresentar as energias do *HOMO - LUMO*, um parâmetro importante relacionado às propriedades de excitação dos compostos. Por fim, iremos falar da superfície de Hirshfeld na caracterização de monocristais

<b>Prof. Dr. Clodoaldo Valverde</b> UFGO
---

13/nov/2019	16:00
-------------	-------

Local: Auditório do PPGF (prédio novo)	
--	--