



Proyecto n° PI-03-5399-2004

Contribución de la curvatura de la superficie de energía potencial a la polarizabilidad e hiperpolarizabilidades de moléculas Push-Pull

Responsable: Squitieri Annunziata, Emilio

Etapas cumplidas / Etapas totales 1/1

Especialidad: Química teórica

Resumen: Se estimó por primera vez, en la literatura, el efecto simultáneo de la curvatura de la superficie de energía potencia molecular y del solvente en las hiperpolarizabilidades eléctricas y estáticas de moléculas bipolares Push-pull. Espera que sus resultados sean útiles para el diseño de dispositivos moleculares electro-ópticos.

Productos

Publicaciones

Artículos

E. Squitieri y C.M. Landaeta, “Solvent effect on the static nuclear relaxation and curvature hyperpolarizabilities of push-pull polyenes”, *Molecular Physics*, **77**, 1-12, 2008.

Otros

Tesis de Pregrado

Carlos M. Landaeta H, “Contribuciones nucleares a las hiperpolarizabilidades de moléculas push-pull en solución”, 2006.