

<b>Título</b>	Compostos organometálicos para aplicação em OLEDs de elevada eficiência: interpretação e previsão de propriedades luminescentes utilizando métodos computacionais
<b>Resumo (incluindo objetivos a atingir)</b>	<p>A elevada eficiência energética dos ecrãs baseados em díodos emissores de luz (LED) tornou-os muito apetecíveis para esta indústria. Mais recentemente, com o objetivo de diminuir as perdas de calor, foram desenvolvidos díodos emissores de luz orgânicos (OLEDs) que aliam a pouca produção de calor a uma alta eficiência e a um reduzido impacto ambiental. Neste contexto, a interpretação e previsão das propriedades óticas de moléculas luminescentes, é um passo essencial no desenvolvimento de OLEDs mais eficientes.</p> <p>Neste projeto de mestrado, serão feitos cálculos teóricos (DFT e TD-DFT) para interpretar e prever as propriedades óticas em compostos com potencial para ser utilizados em OLEDs. Numa primeira fase iremos testar vários métodos para prever as propriedades referidas em compostos já conhecidos e, posteriormente, propor novos compostos de forma a tornar os primeiros mais eficientes.</p> <p>Este trabalho encontra-se inserido no âmbito de um projeto de colaboração com investigadores do IST que estão a sintetizar novos compostos e a construir os respectivos OLEDs.</p> <p>O trabalho será realizado num laboratório computacional (C8) e pretende-se alguém com entusiasmo para trabalhar na área da Química Computacional. O uso de técnicas computacionais requer naturalmente motivação para o uso de meios informáticos.</p>
<b>Local de trabalho</b>	Chemistry for Biological Systems Group, BioISI Grupo de Química Inorgânica e Teórica, CQB
<b>Orientador (s)</b>	<p>Diogo Vila Viçosa</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <a href="mailto:diogo.vicosa@fc.ul.pt">diogo.vicosa@fc.ul.pt</a></li> <li>- <a href="https://orcid.org/0000-0001-6620-0484">https://orcid.org/0000-0001-6620-0484</a></li> </ul> <p>Paulo J. Costa</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <a href="mailto:pjcosta@fc.ul.pt">pjcosta@fc.ul.pt</a></li> <li>- <a href="https://orcid.org/0000-0002-0492-6666">https://orcid.org/0000-0002-0492-6666</a></li> </ul>
<b>Informações</b>	<a href="http://intheochem.fc.ul.pt/compchem.html">http://intheochem.fc.ul.pt/compchem.html</a> (Sala 8.5.53)