MODOS VIBRACIONAIS DO PPP E DO PPV

Neste trabalho, apresentamos um estudo das propriedades estruturais e dinâmicas de oligômeros, das cadeias isoladas e das formas sólidas com simetria completa do Poli (*para*-fenileno) (PPP) e do Poli (*para*-fenileno-vinileno) (PPV). Para tal, utilizamos dois métodos "ab initio": a teoria do Orbital Molecular (MO) dentro do Método de Hartree-Fock e a Teoria do Funcional Densidade na Aproximação da Densidade Local (LDA). Para obter as propriedades dinâmicas em ambiente cristalino, usamos a Teoria da Perturbação Adiabática do Funcional Densidade (DFPT). Checamos a eficiência dos modelos moleculares e unidimensionais para a descrição das propriedades dinâmicas dos sistemas poliméricos tridimensionais. Demonstramos, neste trabalho, que é fortuito conseguir, através da extrapolação dos modos vibracionais localizados nos oligômeros, descrever as propriedades dinâmicas dos sistemas tridimensionais. Mostramos, também, que os modelos unidimensionais têm tido sucesso em descrever os modos vibracionais destes polímeros no ponto G da Zona de Brillouin, região em que se obtêm dados experimentais de Raman e Infravermelho. Para os outros pontos *k* da zona, estes modelos falham completamente, pois não levam em conta as interações entre as cadeias poliméricas, imprescindíveis para uma completa caracterização dos modos vibracionais destes materiais.