

XXII Encontro Nacional SPQ



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

1911-2011

100 ANOS

100 anos
de Química
em Portugal



3 a 6
Julho de 2011

Universidade do Minho · Braga



Ano Internacional da
QUÍMICA
2011

XXII ENCONTRO NACIONAL DA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

100 ANOS DE QUÍMICA EM PORTUGAL

Livro de Resumos

3 a 6 de Julho de 2011
Universidade do Minho
Departamento de Química

Parque de Exposições de Braga

XXII ENCONTRO NACIONAL DA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA – 100 ANOS DE QUÍMICA EM PORTUGAL

Depósito legal nº 329450/11

ISBN: 978-989-8124-08-1

© Sociedade Portuguesa de Química

Editores: João Paulo André
Mário Berberan e Santos

Edição: Sociedade Portuguesa de Química

Capa: Nicolau Moreira
Gabinete de Comunicação, Informação e Imagem
UMinho

Montagem: Comissão Organizadora do XXII ENSPQ

Publicação parcialmente subsidiada pela
Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Este livro foi produzido a partir dos resumos de comunicações submetidos pelos autores. Foram introduzidas apenas pequenas alterações de edição que não modificaram os conteúdos científicos. O modelo final de impressão foi definido para o XXII ENSPQ de acordo com as normas divulgadas publicamente nos anúncios deste evento. A responsabilidade dos conteúdos científicos é dos respectivos autores.

Second Order Hyperpolarizabilities Dependence on the Benzenic Ring Position of Organic and Organometallic Benzo[c]thiophene species: an assessment by DFT methods

A. J. Palace Carvalho^a, P. J. G. Mendes^a, J. P. Ramalho^a, T. Silva^{a,b}

^a Centro de Química de Évora, Escola de Ciências e Tecnologia da Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

^b Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Campo Grande 1049-001 Lisboa, Portugal
ajpalace@uevora.pt

Nonlinear optical (NLO) active organic chromophores find application in a wide range of technological applications, from molecular electronics to optical sensors and switches. Thus, the establishment of methods that can predict *a priori* the optical properties of organic or organometallic chromophores is indeed a crucial topic of current research. Density Functional Theory (DFT) methods are by far the most used computational methods for estimation of optical properties of molecules due to their low computational effort and accurate results. [1] and can be an useful tool for a screening of NLO chromophores prior to the synthetic labor. Among all the available DFT functionals, B3LYP is by far the most common. Others, like CAM-B3LYP are now being evaluated and they show similar or improved results concerning the prediction of optical properties. [2]

In the present work a combination of DFT with the Finite Field (FF) method was used to investigate the influence on the benzenic ring position on the magnitude of the static first hyperpolarizability of several nitro acetylene organic fragments based on benzo[c]thiophenes. Time Dependent – DFT methods (TD-DFT) were employed to determine the spectral data of all the compounds. After the screening of the organic chromophores was complete, coordination to an iron (II) and ruthenium (II) monocyclopentadienyl fragment was investigated. The chromophores for coordination were chosen according to available procedures in literature to further synthetic achievement. Results show that better NLO responses should be obtained when the benzene ring is close to the electron donor group, whilst the presence of such aromatic ring close to the acceptor group should lead to a decreasing on the NLO response. This behavior is justified, among other possibilities, in terms of HOMO-LUMO band gaps by correlation of the DFT and TD-DFT methodologies.

Agradecimentos: The authors thank the FCT for funding of the project FCOMP-01-0124-FEDER-007433. Tiago Silva is also grateful for his PhD. grant.

Referências

[1] Zhao, Y., Truhlar, D., Acc. Chem Res., 41 (2008) 157.

[2] Jacquemin, D., Perpète, E., Scuseria, G., Ciofini, I., Adamo, C., J. Chem. Theory.Comput.,4 (2008) 123.