



# Jornadas do Centro de Química de Évora

25-26 Maio **2011**

Universidade de Évora



# Jornadas do Centro de Química de Évora 2011



## Programa Científico Livro de Resumos

25 - 26 | Maio | 2011  
Universidade de Évora • CLAV • Anfiteatro 4



## Entidade Organizadora

Centro de Química de Évora

## Comissão Organizadora

Peter Carrott

Cristina Galacho

Paulo Mendes

Margarida Figueiredo

Teresa Ferreira

António Teixeira



## Patrocínios



## Apoios



---

**Título:** Jornadas do Centro de Química de Évora 2011

**Editores:** Peter Carrott, Cristina Galacho, Paulo Mendes, Margarida Figueiredo, Teresa Ferreira e António Teixeira

**Edição:** Universidade de Évora

**Local, Ano de Publicação:** Évora, 2011

**Tiragem:** 30 exemplares

**Impressão:** Diana Litográfica do Alentejo

**Depósito legal nº** 328549/11

**ISBN:** 978-972-778-112-6

---

## Compostos Organometálicos contendo Anéis Aromáticos Heterocíclicos: Determinação das suas propriedades de Óptica Não Linear

Paulo J.G. Mendes<sup>1</sup>, Tiago J.L. Silva<sup>1,2</sup>, M. Helena Garcia<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

<sup>2</sup>Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Campo Grande 1796-016 Lisboa

pjgm@uevora.pt

48

A síntese de novos compostos heterocíclicos aromáticos incorporados em sistemas organometálicos tem sido um tópico abrangente em química, em particular em química de materiais uma vez que quer o centro metálico quer o ligando em si apresentam propriedades redox que permitem a sua utilização como condutores moleculares, sensores químicos, sondas fluorescentes, etc.. Sistemas contendo enxofre são muito usados em nanoelectrónica, onde são diversos exemplos de polímeros condutores que possuem anéis de tiofeno ou derivados deste.<sup>[1]</sup> Dado que, estruturalmente, estes compostos são adequados para aplicações em fotónica, o trabalho aqui apresentado pretende mostrar a aplicação de compostos heterocíclicos aromáticos baseados em tiofenos que, em conjugação com fragmentos organometálicos, possuem aplicações em Óptica Não-linear (NLO), nomeadamente nos processos de 2ª ordem.<sup>[2]</sup> Foram sintetizados diversas famílias contendo diferentes tamanhos nos sistemas conjugados e diferentes grupos aceitadores electrónicos terminais.

Os resultados mostram que as famílias estudadas possuem óptimas propriedades de NLO, nomeadamente elevados valores de hiperpolarizabilidades de segunda ordem ( $\beta$ ). Estas propriedades foram correlacionadas com dados espectroscópicos e electroquímicos para que mais tarde se possa criar um modelo que permita prever *à priori* a magnitude dos valores das hiperpolarizabilidades de moléculas estruturalmente semelhantes.

[1] – Heinze, J., Frontana-Urbe, B., Ludwigs, S. Chem. Rev. 2010, 110, 4724–4771  
4-2471, 1999

[2] – Garcia et al., Journ. Organomet. Chem., 2009, 694, 433-445; Garcia et al., Journ. Organomet. Chem., 2009, 694, 2888-2897

**Agradecimentos.** Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433. O autor Tiago Silva agradece ainda a Bolsa de doutoramento concedida.