



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

Complexos Organometálicos de Ferro (II) e Ruténio (II) como comutadores moleculares: um estudo prático e computacional

Tiago J.L. Silva, Paulo J.G. Mendes, M. Helena Garcia

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

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

tjlsilva@fc.ul.pt

A Óptica não-linear (NLO) é um ramo do conhecimento que trata da interação da matéria com feixes intensos de radiação, e onde podem ser obtidos novos feixes cujas propriedades serão diferentes das propriedades do feixe incidente.^[1] Tal alteração é conseguida através da utilização de materiais hiperpolarizáveis, onde se destacam os complexos organometálicos, em particular monociclopentadienilos de elementos dos primeiros períodos do grupo VIII. A comutação molecular (*molecular switching*) está relacionada com o processo pelo qual existe uma alteração de propriedades entre dois estados de uma molécula. Recentemente surgiu um novo conceito de comutação molecular, que tem por base a óptica não linear, através da alteração do valor da primeira hiperpolarizabilidade (β) entre uma forma “on” e uma forma “off”.^[2]

Este trabalho trata da síntese e caracterização espectroscópica e electroquímica de uma família de complexos de ferro (II) e ruténio (II) contendo como cromóforo com atividade em NLO um derivado de 1,3-ditienilisotonaftaleno. São apresentados também os valores das hiperpolarizabilidades (β), medidas por dispersão de Hyper Rayleigh em solução de clorofórmio. Estudos computacionais por DFT (Density Functional Theory) mostram também ser bastante úteis para deslindar os factores electrónicos por detrás das propriedades de NLO.^[3] Os nossos resultados mostram que os compostos sintetizados podem ser potencialmente utilizados como comutadores moleculares em sistemas de nanoelectrónica: quando sujeitos a processo redox para remoção ou adição de um electrão, os valores de β diferem de um factor de cerca de 175 vezes.

[1] – Gooverts, E.; Garcia, M. H.; *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials*, Academic Press. Cap. 3, 2001

[2] – Coe, B.; *Chem. Eur. J.*, 5, 9, 2464-2471, 1999

[3] – Mendes, P.; Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 900, 110-117, 2009

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.