

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA  
ESCOLA DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIVERSIDADE DE ÉVORA

**JORNADAS 2010  
DO DEPARTAMENTO DE  
QUÍMICA**

**25 e 26 de Março de 2010**

---



## **COMISSÃO ORGANIZADORA**

Júlio Cruz Morais

João Valente Nabais

António Candeias

António Teixeira

Cristina Galacho

Jorge Teixeira

## **APOIOS**

Universidade de Évora

Escola de Ciências e Tecnologia da Universidade de Évora

Delta Cafés

---

**Título:** Jornadas 2010 do Departamento de Química.

**Editores:** Júlio Cruz Morais, João Valente Nabais, António Candeias, António Teixeira, Cristina Galacho e Jorge Teixeira.

**Impressão:** FLM, Fundação Luís de Molina.

**Local, Ano de Publicação:** Évora, 2010.

**Tiragem:** 50 exemplares.

---

## Síntese de complexos de Ru(II) e Fe(II) contendo benzo[c]tiofeno com aplicações em óptica não linear

TJL Silva; PJ Mendes

Centro de Química de Évora, Rua Romão Ramalho 59, 7000-671 Évora

tjsilva@fc.ul.pt; pjgm@uevora.pt

---

O desenvolvimento da nanotecnologia trouxe à comunidade científica um novo paradigma: como incorporar nesses dispositivos componentes de dimensão molecular capazes de conduzir, processar e armazenar informação, tendo ainda em conta que todos eles envolvem a integração de funções complexas, como por exemplo a função “interruptor” (do inglês *switch*), que envolverão alterações estruturais e electrónicas nessas moléculas? <sup>[1]</sup>

A comutação molecular (*molecular switching*) está relacionada com o processo pelo qual existe alteração entre duas formas de uma molécula, genericamente designadas de forma *on* e *off*. Recentemente surgiu um novo conceito de comutação molecular, que tem por base a óptica não linear, e que envolve a alteração por meios químicos ou físicos de um composto entre uma forma *on* (correspondente a elevados valores de hiperpolarizabilidade) e *off* (correspondente a baixos valores de hiperpolarizabilidade).<sup>[2]</sup>

Prosseguindo os estudos na séries de derivados acetilénicos de tiofenos como possíveis comutadores moleculares, são apresentadas a síntese e caracterização espectroscópica de novos complexos metálicos de derivados de benzo[c]tiofenos.<sup>[3]</sup> Os compostos sintetizados foram também alvo de estudos de DFT (*Density Functional Theory*) com o intuito de, não só compreender as características electrónicas que regem o fenómeno de óptica não linear mas também prever o comportamento das espécies quando submetidas a uma oxidação. Além de discutidas algumas vias de síntese para os derivados de benzo[c]tiofenos serão também apresentados detalhes estruturais dos compostos obtidos teoricamente. A caracterização espectroscópica dos compostos mostram a existência de bandas de transferência de carga muito intensas que são associadas a elevados valores de  $\beta$  na forma “on” (não oxidada), enquanto as simulações comprovaram que deverão ser obtidos baixos valores de hiperpolarizabilidade para a forma “off” (oxidada).

[1] – Mançois, F.; Rodriguez, V.; Pozzo, J-L.; Champagne, B.; Castet, F.; *Chem. Phys. Lett.*, 427, 153-158, 2006

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

[3] – Mohanakrishnan, A.; Lakshmikantham, M.; McDougal, C.; Cava, M.; *J. Org. Chem.* 63, 3105-3112, 1998; Kiebooms, R.; Adriaensens, P.; Vanderzande, D.; Gelan, J.; *J. Org. Chem.*, 62, 1473-1480, 1997.