

Hiperpolarizabilidades Quadráticas de Acetiletos Metálicos Contendo Derivados Nitrotiofénicos

T.J. Silva¹, P.J. Mendes², M. H. Garcia¹, J. Heck³

¹Departamento de Química e Bioquímica e Centro de Ciências Moleculares e Materiais, Universidade de Lisboa; ²Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE; ³Institut für Anorganische und Angewandte Chemie, Universität Hamburg, Alemanha
tjlsilva@gmail.com

A óptica não-linear (NLO) lida com a modificação das propriedades de um material sob a influência de feixes de luz intensos, resultando em processos que alteram a amplitude, fase, polarização e frequência de feixes ópticos emergentes [1]. Os materiais com estas propriedades podem encontrar aplicações importantes em várias tecnologias fotónicas como dispositivos de comutação de electroóptica para telecomunicações e processamento e armazenagem de informação. A pesquisa e o *design* de moléculas altamente eficazes para aplicações em NLO, nomeadamente a geração de segunda harmónica (SHG) é, portanto, uma área de investigação importante.

Os nossos estudos em complexos organometálicos contendo metais do grupo VIII combinados com cromóforos heterocíclicos π -conjugados de forma assimétrica, mostraram-se promissores para a Geração de Segundas Harmónicas. [2,3]. Na continuação destes estudos, apresentamos aqui as hiperpolarizabilidades quadráticas de acetiletos metálicos de ferro (II), ruténio (II) e níquel (II) contendo derivados nitrotiofénicos. As hiperpolarizabilidades quadráticas foram medidas a 1500 nm, em soluções de clorofórmio, por meio da técnica de Hyper-Rayleigh Scattering (HRS). Os resultados mostram que as hiperpolarizabilidades quadráticas são fortemente dependentes do centro metálico e do sistema conjugado π do cromóforo orgânico. Para avaliar a possível correlação entre estrutura-actividade, os dados espectroscópicos, juntamente com os resultados electroquímicos por voltametria cíclica, são examinados à luz dos valores obtidos das hiperpolarizabilidades quadráticas.

[1] H.S. Nalwa, S. Niyata, "Nonlinear Optics of Organic Molecules and Polymers", CRC Press, Boca Raton, FL, 1997

[2] a) M. H. Garcia *et al.* J. of Organomet. Chem., 694 (2009) 2888; b) Paulo J. G. Mendes *et al.* J. Mol. Struct.: THEOCHEM, 900 (2009) 110.

[3] M. H. Garcia *et al.*, Organometallics, 21 (2001) 2107

Agradecimentos: Os autores agradecem à FCT o financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433. Tiago Silva também agradece o financiamento da sua bolsa de Doutoramento.
