



## **1º Encontro de Alunos do DQB-FCUL**

**Livro de Resumos  
DQB-FCUL, 7 de Junho 2011**

# Comissão Organizadora

Prof. Maria José Calhorda  
(DQB-FCUL)

[mjc@fc.ul.pt](mailto:mjc@fc.ul.pt)

Prof. Maria de Deus Carvalho  
(DQB-FCUL)

[mdcarvalho@fc.ul.pt](mailto:mdcarvalho@fc.ul.pt)

MSc. Ana Paula Ribeiro  
(DQB-FCUL)

[apribeiro@fc.ul.pt](mailto:apribeiro@fc.ul.pt)

MSc. Ana Filípa Cristino  
(DQB-FCUL)

[afcristino@fc.ul.pt](mailto:afcristino@fc.ul.pt)

MSc. Salomé Vieira  
(DQB-FCUL)

[sivieira@fc.ul.pt](mailto:sivieira@fc.ul.pt)

MSc. Teresa Santos  
(DQB-FCUL)

[teresajpsantos@gmail.com](mailto:teresajpsantos@gmail.com)

MSc. Tiago Silva  
(DQB-FCUL)

[tjsilva@fc.ul.pt](mailto:tjsilva@fc.ul.pt)

O 1º encontro científico Ciência QB tem como principal objectivo promover a discussão científica dos trabalhos desenvolvidos pelos alunos de doutoramento do DQB-FCUL, aberto a todos os que desejem participar.

Pretende-se que os alunos de Doutoramento divulguem o seu trabalho científico, construindo pontes entre os diversos conhecimentos científicos e proporcionando aos alunos do 1º e 2º Ciclos, bem como à restante comunidade académica, uma perspectiva da investigação realizada.

## Compostos de Ni e Fe com possíveis aplicações como comutadores molecular no âmbito da óptica não linear

Ana M. Santos<sup>a,b</sup>, Paulo J. Mendes<sup>a</sup>, Tiago J. L. Silva<sup>a,b</sup>, M. H. Garcia<sup>b</sup>, M. P. Robalo<sup>c</sup>

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

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

<sup>c</sup>*Centro de estudos de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa - Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1959-007 Lisboa*

O desenvolvimento de compostos, orgânicos e organometálicos com propriedades ópticas não lineares de 2<sup>a</sup> ordem (SONLO), tem grande interesse em consequência das suas potenciais aplicações em dispositivos ópticos no domínio das comunicações, computação e armazenamento de dados.<sup>[1]</sup> O conceito de comutação molecular (molecular switching) em SONLO, consiste em alternar entre várias formas moleculares obtendo por consequência diferentes respostas na magnitude da primeira hiperpolarizabilidade. Uma das formas de obter diferentes respostas da hiperpolarizabilidade é alterar os estados de oxidação da molécula.<sup>[2]</sup> Os monociclopentadienilos de ferro(II) e níquel(II) aqui apresentados foram caracterizados por métodos espectroscópicos e electroquímicos. As propriedades moleculares de NLO foram calculadas usando a teoria do funcional da densidade (DFT) e avaliadas experimentalmente em solução pela técnica de dispersão HyperRayleigh. As técnicas electroquímicas pretendem demonstrar a viabilidade da utilização destes compostos como comutadores moleculares. Os compostos de ferro apresentam resultados de reversibilidade dos processos redox indicativos de uma possível utilização em aplicações como comutadores moleculares.

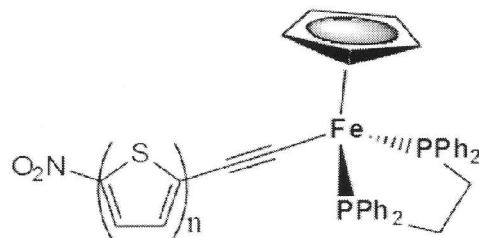


Figura 1- Complexos de Ferro(II) com potenciais aplicações em SONLO (n=1,2).

### Agradecimentos:

Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433

1. Goovaerts, E; Wenseleers W.; Garcia, M.H.; Cross G.H. Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials, Ed. H.S. Nalwa, **2001**, 9, 127.

2. Asselberghs, I.; Clays, K.; Persoons, A; Ward M.; McCleverty, J. J. Mater. Chem. **2004**, 14, 2831.