



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

Síntese e estudo de compostos organometálicos/coordenação para as tecnologias da optoelectrónica e fotónica

Célia Serrano¹, Paulo J. Mendes²

¹Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

²Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora
cs-celia_serrano@hotmail.com

Devido às suas potenciais aplicações como nano-componentes na área do processamento digital e comunicações, os compostos organometálicos que possuem propriedades ópticas não lineares de 2ª ordem tem sido muito investigados [1]. Compostos de η^5 -monociclopentadienilo metálicos, contendo vários cromóforos derivados de benzenos e tiofeno tem vindo a ser objecto de estudo dentro desta área. Cálculos quânticos usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), em particular métodos Time-Dependent (TD) tem sido usados para perceber os factores electrónicos responsáveis pelos fenómenos ópticos não lineares a nível molecular, nomeadamente em derivados de η^5 -monociclopentadienilo metálicos [2,3].

Neste trabalho estudaram-se os complexos-modelo [η^5 -CpNi(PH₃)(CC{SC₄H₂}_nY)], [η^5 -CpFe(H₂PC₂H₄PH₂)(CC{SC₄H₂}_nY)] e [η^5 -CpRu(H₂PC₂H₄PH₂)(CC{SC₄H₂}_nY)] (Y=CN, CHO, NO₂ ou C=C(CN)₂) por cálculos quânticos de DFT/TD-DFT. Os resultados dos cálculos teóricos por DFT foram usados no sentido de tentar prever os comportamentos dos complexos no que se refere às propriedades ópticas não lineares de segunda ordem, em particular a primeira hiperpolarizabilidade, β . Sintetizaram-se ainda ligandos de tiofeno e complexos derivados das famílias anteriores para complementar o estudo. Os compostos sintetizados foram caracterizados espectroscopicamente por I.V., RMN ¹H e UV-Visível. O presente trabalho foi realizado no período de uma Bolsa de Integração na Investigação (BII), no âmbito do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433 (FCT PTDC/QUI/67362/2006).

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

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

[3] – Mendes, P.; Silva, T.J.L., Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 946 (2010) 33-42

Agradecimentos. Os autores agradecem à FCT por financiamento do projecto FCOMP-01-0124-FEDER-007433. A autora Célia Serrano agradece ainda a BII UE|CQE|BII6|2009 concedida.