

XXII Encontro Nacional SPQ



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

1911-2011

100 ANOS

100 anos
de Química
em Portugal



3 a 6
Julho de 2011

Universidade do Minho · Braga



Ano Internacional da
QUÍMICA
2011

XXII ENCONTRO NACIONAL DA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

100 ANOS DE QUÍMICA EM PORTUGAL

Livro de Resumos

3 a 6 de Julho de 2011
Universidade do Minho
Departamento de Química

Parque de Exposições de Braga

XXII ENCONTRO NACIONAL DA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA – 100 ANOS DE QUÍMICA EM PORTUGAL

Depósito legal nº 329450/11

ISBN: 978-989-8124-08-1

© Sociedade Portuguesa de Química

Editores: João Paulo André
Mário Berberan e Santos

Edição: Sociedade Portuguesa de Química

Capa: Nicolau Moreira
Gabinete de Comunicação, Informação e Imagem
UMinho

Montagem: Comissão Organizadora do XXII ENSPQ

Publicação parcialmente subsidiada pela
Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Este livro foi produzido a partir dos resumos de comunicações submetidos pelos autores. Foram introduzidas apenas pequenas alterações de edição que não modificaram os conteúdos científicos. O modelo final de impressão foi definido para o XXII ENSPQ de acordo com as normas divulgadas publicamente nos anúncios deste evento. A responsabilidade dos conteúdos científicos é dos respectivos autores.

Organometallic Acetylide Complexes for Nonlinear Optics: Revealing their behavior as possible molecular switching devices

A. M. Santos^a, P. J. G. Mendes^b, M. H. Garcia^c, M. P. Robalo^{c,d}, T. Silva^{a,b}

^a Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Campo Grande 1049-001 Lisboa, Portugal

^b Centro de Química de Évora, Escola de Ciências e Tecnologia da Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

^c Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1959-007 Lisboa, Portugal

^d Centro de Química Estrutural, Complexo I, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal
margaridaggs@gmail.com

The development of new organometallic compounds with second order nonlinear optical (SONLO) properties has a great interest nowadays due to their possible applications in optical devices for communications, computation and data storage. [1] The concept of molecular switching in SONLO is based on the idea of commuting between different molecular states. This will infer a different response amplitude for the first hyperpolarizability of the compounds. [2] This can be accomplished either by external chemical, optical or electrochemical stimulus. In the case of organometallic complexes the modification in the oxidation state of the metal center by electrochemical means is the most easy and straightforward method to evaluate the molecular switching properties of a molecule. [3] The present study concerns the synthesis and characterization of iron (II), ruthenium (II) and nickel(II) thienyl monocyclopentadienyl acetylide complexes, which were characterized by the usual spectroscopic techniques (NMR, Uv-Vis, FTIR) and cyclic voltammetry. The SONLO properties were calculated by DFT calculations and later measured by Hyper Rayleigh Scattering. In order to evaluate their switching properties, electrochemical and DFT data were correlated. Results prove that, despite some stability problems, the complexes possess good NLO switching properties. Of all the complexes synthesized, iron (II) complexes are the most feasible for such applications.

Acknowledgements: The authors thank the FCT for funding of the project FCOMP-01-0124-FEDER-007433. Tiago Silva is also grateful for his PhD grant.

References

- [1] Garcia, M. H., Florindo, P., Nova Science Publishers, Inc. New York, 2009 (accepted)
- [2] Asselberghs, I. Clays, K., Persoons, A. Ward, M., McCleverty, J., *J. Mater. Chem.*, 14 (2004) 2831-2839;
- [3] Paul, F., Costuas, K., Ledoux, I., Deveau, S. Zyss, J. Halet, J-F., Lapinte, C. *Organometallics*, 21 (2002), 5229-5235.