

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.

Complexos Organometálicos de Ruténio(II) para 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 crescente das tecnologias que utilizam fótons na transmissão e armazenamento de informação levou a um aumento da procura de novos materiais com potencial aplicação em electro-óptica e óptica integrada. A óptica não linear (NLO) trata da interacção da matéria com feixes intensos de radiação, de forma a serem obtidos novos feixes cujas propriedades serão diferentes das propriedades do feixe incidente, nomeadamente a sua frequência, fase ou amplitude.^[1] Tal alteração é conseguida através da utilização de materiais hiperpolarizáveis, cuja estrutura deverá obedecer a um sistema conjugado π do tipo “push-pull”. Dentro destes sistemas, a família dos monociclopentadienilos metálicos, conjugados com derivados acetilénicos de tiofeno, tem provado ser uma das mais eficazes na geração de sinais de NLO, nomeadamente na geração de segundas harmónicas (SHG), uma vez que a linearidade do sistema e a versatilidade redox do metal de transição permite uma deslocalização electrónica acentuada, favoráveis aos fenómenos de SHG.^[2] Serão apresentadas as sínteses e caracterizações de compostos monociclopentadienilruténio(II), de formula geral $\eta^5\text{-CpRu(PP)-C}\equiv\text{C-(C}_4\text{H}_2\text{S)}_n\text{A}$ (Cp= C₅H₅; PP = DPPE, 2PPh₃; A =NO₂, CHO), desenvolvido no âmbito do mestrado em Química Aplicada. A caracterização espectroscópica foi correlacionada com estudos de DFT (*Density Functional Theory*), sendo comparados os resultados obtidos experimentalmente com resultados simulados. Os mesmos estudos permitiram obter os valores de hiperpolarizabilidade (β) para os compostos sintetizados, onde se provou a promissora utilização destes compostos para geração de sinais de NLO. Os resultados mostram a dependência β com a presença de diferentes fosfinas e grupos aceitadores bem como com a extensão do sistema conjugado.

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

[2] - Powel, C.; Humphrey, M.; *J. Coord. Chem. Rev.*, 248, 725-756, 2004; Mendes, P.; Carvalho, A. J. P.; Ramalho, J. P.; *Journ. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 900, 110-117, 2009