

CIÊNCIA
QB

**1º Encontro de Alunos
do DQB-FCUL**

Livro de Resumos
DQB-FCUL, 7 de Junho 2011



Ano Internacional da
QUÍMICA
2011



Comissão Organizadora

Prof. Maria José Calhorda
(DQB-FCUL)

mjc@fc.ul.pt

Prof. Maria de Deus Carvalho
(DQB-FCUL)

mdcarvalho@fc.ul.pt

MSc. Ana Paula Ribeiro
(DQB-FCUL)

apribeiro@fc.ul.pt

MSc. Ana Filípa Cristino
(DQB-FCUL)

afcristino@fc.ul.pt

MSc. Salomé Vieira
(DQB-FCUL)

sivieira@fc.ul.pt

MSc. Teresa Santos
(DQB-FCUL)

teresajpsantos@gmail.com

MSc. Tiago Silva
(DQB-FCUL)

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^{a,b}, Paulo J. Mendes^a, Tiago J. L. Silva^{a,b}, M. H. Garcia^b, M. P. Robalo^c

^aCentro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora

^bCentro de Ciências Materiais e Moleculares, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Campo Grande 1796-016 Lisboa

^cCentro 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 2ª ordem (SONLO), tem grande interesse em consequência das suas potenciais aplicações em dispositivos ópticos no domínio das comunicações, computação e armazenamento de dados.^[1] 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.^[2] 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 pretenderam 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.

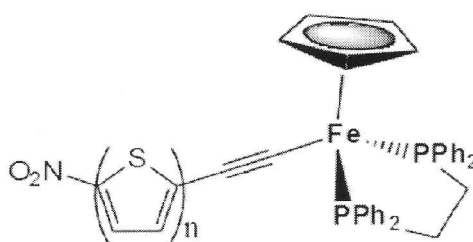


Figura 1- Complexos de Ferro(II) com potenciais aplicações em SONLO (n=1,2).

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.