



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

Propriedades de SONLO de complexos organometálicos de Ni e Fe com vista à possibilidade de comutação molecular

Ana M. Santos^{1,2}, Paulo J. Mendes², Tiago J. L. Silva^{1,2}, M. H. Garcia¹, M. P. Robalo³

¹*Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho 59 7000-671 Évora*

²*Centro de Ciências Materiais e Moleculares, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Campo Grande 1796-016 Lisboa*

³*Centro de estudos de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1959-007 Lisboa
margaridaggs@gmail.com*

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 Hyper Rayleigh. 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.

[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.

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