



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.

Complexos Organometálicos de Ferro(II) e Ruténio(II) como comutadores moleculares: um estudo prático e computacional

Tiago J. L. Silva¹, Paulo J. G. Mendes², M. Helena Garcia¹

¹Centro de Química de Évora e Departamento de Química da ECTUE, Univ. de Évora,

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

tjlsilva@fc.ul.pt ; pjgm@uevora.pt ; mhgarcia@fc.ul.pt

A Óptica não-linear (NLO) é um ramo do conhecimento que trata da interação da matéria com feixes intensos de radiação, e onde podem ser obtidos novos feixes cujas propriedades serão diferentes das propriedades do feixe incidente.[1] Tal alteração é conseguida através da utilização de materiais hiperpolarizáveis, onde se destacam os complexos organometálicos, em particular monociclopentadienilos de elementos dos primeiros períodos do grupo VIII. A comutação molecular (molecular switching) está relacionada com o processo pelo qual existe alteração entre duas estados de uma molécula. Recentemente surgiu um novo conceito de comutação molecular, que tem por base a óptica não linear, através da alteração de propriedades como a primeira hiperpolarizabilidade (β). [2]

Este trabalho trata da síntese e caracterização espectroscópica e electroquímica de uma família de complexos de ferro (II) e ruténio (II) contento como cromóforo com atividade em NLO um derivado de 1,3-ditienilisotonaftaleno. São apresentados também os valores das hiperpolarizabilidades de primeira ordem (β), medidas por dispersão de Hyper Rayleigh em solução de clorofórmio. Estudos computacionais por DFT (Density Functional Theory) mostram também ser bastante úteis para deslindar os factores electrónicos por detrás das propriedades de NLO.[3] Os nossos resultados mostram que os compostos sintetizados podem ser potencialmente utilizados como comutadores moleculares em sistemas de nanoelectónica: ainda que os valores de β sejam moderados no “estado fundamental”, quando sujeitos a processo redox para remoção ou adição de um electrão, os valores de β aumentam por um factor de cerca de 175 vezes.

1. Gooverts, E.; Garcia, M. H.; *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials*, Academic Press.

Cap. 3, 2001

2. Coe, B.; *Chem. Eur. J.*, 1999, 5, 9, 2464-2471

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