

## Síntese e caracterização estrutural de composto imínico com potencial para aplicação em Ótica Não-Linear

Alexandre de O. Legendre\* (PG)<sup>1</sup>, Talita E. Souza (IC)<sup>1</sup>, Felipe T. Martins (PG)<sup>2</sup>, Ihosvany Camps (PQ)<sup>1</sup>, Javier Ellena (PQ)<sup>2</sup>, Antonio C. Doriguetto (PQ)<sup>1</sup>. [aolegendre@yahoo.com.br](mailto:aolegendre@yahoo.com.br)

<sup>1</sup> Departamento de Ciências Exatas - Universidade Federal de Alfenas, Alfenas - MG.

<sup>2</sup> Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos - SP.

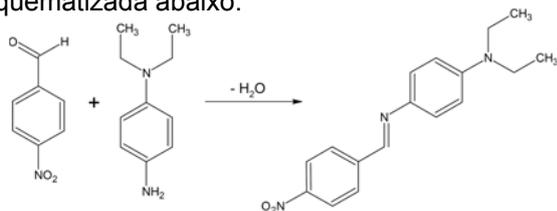
Palavras Chave: Compostos imínicos, Cristalografia de raios X, Ótica Não-Linear.

### Introdução

Materiais orgânicos na forma de polímeros, monocristais e filmes cristalinos estão sob investigação devido ao seu eficiente e significativo potencial para aplicação em ótica não-linear (ONL) quando comparados aos materiais inorgânicos.<sup>1</sup> Para isto, devem apresentar dois pré-requisitos: o primeiro é molecular, uma vez que a molécula deve ter um grupo doador (D) e um grupo receptor (R) separados por um sistema  $\pi$  conjugado, e o segundo é estrutural, pois é imperativo que esses materiais cristalizem em um grupo espacial não-centrossimétrico. Com o objetivo de atender esses requisitos, foi planejado e sintetizado o composto 4-[(E)-((4-dimetil)fenilimino)metil]-1-nitrobenzeno, o qual foi caracterizado por difratometria de raios X (DRX) por monocristal.

### Resultados e Discussão

Um composto imínico, apresentando grupos cromóforos que viabilizassem o requisito molecular à ONL foi sintetizado segundo a reação esquematizada abaixo.



O produto obtido apresentou ponto de fusão de 133°C. Pelo espectro no infravermelho confirmou-se a presença de bandas características de NO<sub>2</sub> (1514 e 1390 cm<sup>-1</sup>), C=N (1564 e 1597 cm<sup>-1</sup>) e NR<sub>3</sub> (1339 cm<sup>-1</sup>). Monocristais adequados para DRX, Figura 1, foram obtidos por recristalização lenta em acetona.



Figura 1. Monocristais do composto imínico.

As análises por DRX foram realizadas à temperatura ambiente utilizando o difratômetro Kappa-CCD da Nonius com radiação MoK $\alpha$  ( $\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$ ). As estruturas foram resolvidas utilizando métodos diretos e refinadas por meio de mínimos quadrados de matriz completa. Os principais parâmetros cristalográficos são: sistema cristalino monoclinico, grupo espacial P2<sub>1</sub>/a, a = 12,6201(3) Å, b = 7,6517(2) Å, c = 16,2866(5) Å,  $\beta = 92,848(2)^\circ$ , V = 1570,78(2) Å<sup>3</sup>,  $\sigma = 1,26 \text{ Mg}\cdot\text{m}^{-3}$ , R1 = 0,0736 e wR2 = 0,1093. A representação ORTEP do complexo é mostrada na Figura 2. O empacotamento cristalino é estabilizado por interações fracas de Van der Waals. A estrutura é centrossimétrica o que dificulta sua aplicação, na forma de monocristais, em ONL.

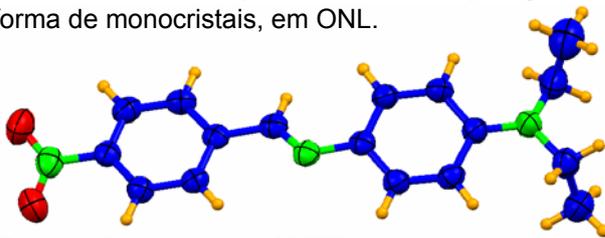


Figura 2. Representação ORTEP do composto imínico.

A partir de cálculos *ab initio*, os valores para o momento de dipolo elétrico ( $\mu = 6,1534 \text{ ua}$ ) e para a primeira hiperpolarizabilidade ( $\beta = -277,31 \times 10^{-30} \text{ cm}^5 \text{ esu}^{-1}$ ) foram determinados. Verifica-se uma hiperpolarizabilidade relevante devido à estrutura apresentar um sistema conjugado bem como um forte grupo doador e outro receptor de densidade eletrônica.

### Conclusões

Cálculos teóricos apontam que o composto obtido tem potencial para aplicação em ONL. Contudo, a determinação da estrutura, reportada pela primeira vez nesse trabalho, mostra uma estrutura centrossimétrica, o que vai de encontro ao requisito estrutural para aplicação em ONL.

### Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES, FINEP e FAPEMIG

<sup>[1]</sup> Timofeeva, T.V.; Nesterov, V.N.; Clark, R.D.; Penn, B.; Frazier, D.; Antipin, M.Y.; *J. M. Structure*. **2003**, 647, 181-202.