

Ótica Não-Linear: 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona e 3-benzil-5-(2-hidroxibenzilideno)furano-2-ona

Talita E. Souza (IC)^a, Marcelo H. dos Santos (PQ)^a, Antônio C. Doriguetto(PQ)^a, Ihosvany Camps (PQ)^a, Rodrigo S. Corrêa (PG)^b, Javier Ellena (PQ)^b

^a Departamento Ciências Exatas, UNIFAL-MG, Alfenas-MG, Brasil.

^b Instituto de Física de São Carlos, USP, São Carlos-SP, Brasil.

Introdução: Cristais moleculares e a Engenharia de Cristais orgânicos com propriedades óticas não-lineares (ONL) tem sido tema de pesquisa frequente em vista da aplicação dessas moléculas em várias tecnologias foto-eletrônicas^[1]. Além de apresentarem os pré-requisitos moleculares para propriedades ONL (grupo doador e receptor separados por um sistema π conjugado), é imperativo que esses materiais cristalizem em um grupo espacial não-centrossimétrico. Neste trabalho foram estudados dois compostos orgânicos sendo um de origem natural, a 1,7-dihidroxi-3,8-dimetoxixantona (I), e outro sintético, a 3-benzil-5-(2-hidroxibenzilideno)furano-2-ona (II)^[2].

Resultados e Discussão: Os monocristais de (I) foram obtidos, após várias tentativas de recristalização em uma série de solventes, em mistura de etanol e metanol 1:1 (v/v), e os monocristais de (II), por suave aquecimento em hexano, seguido da adição em gotas de diclorometano. As estruturas foram determinadas por métodos diretos usando SHELXS-97 e refinadas usando o programa SHELXL-97 por mínimos quadrados de matriz completa em F². Os principais parâmetros cristalográficos estão representados na Tabela 1.

Tabela 1. Principais parâmetros cristalográficos de (I) e (II).

Dados	(I)	(II)
Sistema Cristalino / Grupo espacial	Ortorrômbico P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	Monoclínico P2 ₁
Parâmetros de cela	$a = 3,9982(4)$; $b = 12,8083(2)$ $c = 24,2818(4)$	$a = 6.3571(4)$; $b = 7.5692(5)$ $c = 14.9216(9)$; $\beta = 99.303(4)$
Z	4	2
R1 / wR2 (all data)	0.0608/0.1078	0.0624/0.1026

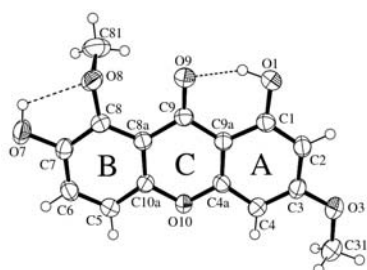


Figura 1: Representação ORTEP de (I)

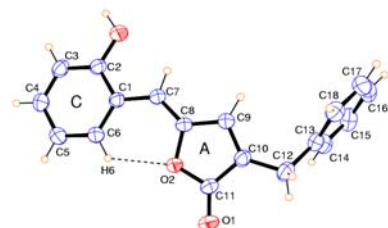


Figura 2: Representação ORTEP de (II)

As Figuras 1 e 2 ilustram a representação Ortep das moléculas (I) e (II), as quais cristalizaram nos grupos espaciais não-centrossimétrico P2₁2₁2₁ e P2₁, respectivamente. Essa característica estrutural aliado ao fato de ambas apresentarem grupos doadores e receptores de elétrons, separados por sistema π conjugado, as tornam interessantes do ponto de vista de ONL. Portanto, cálculos *ab initio* foram realizados em campo estático com o objetivo de se determinar seus momentos de dipolo elétrico e suas hiperpolarizabilidades quadráticas (β). Os resultados são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2: Cálculos de *ab initio* de momentos de dipolo e hiperpolarizabilidade quadrática

Moléculas	Momento de Dipolo	Hiperpolarizabilidade Quadrática
I	1.64051*	$-3,21 \times 10^{-30} \text{ cm}^5 \text{ esu}^{-1}$
II	2.11701 *	$-8,45 \times 10^{-30} \text{ cm}^5 \text{ esu}^{-1}$

* Unidades atômicas

[1] Waldrop, M. M., *Science*, **259**, 456 (1993).

[2] Teixeira, R. R, Barbosa, L. C. A, Carneiro, J. W. de M., Corrêa, R.S, Ellena, J., Doriguetto, A.C., *J. Molec. Struc.*, **917**, 1-9 (2009)

Agradecimentos: CNPq, PIBIC/CNPq, Unifal-MG, FAPEMIG e CAPES pelo apoio financeiro.