



ESTUDIO TEÓRICO DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ÓPTICAS DE OLIGÓMEROS DERIVADOS DE BENCENO Y TIOFENO

Luis A. Zárate¹, Julián Cruz¹, José M. Vásquez¹, Rosa A. Vázquez¹, Karina Alemán¹,
Thangarasu Pandiyan²

¹Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo; México

²Universidad Nacional Autónoma de México; México

e-mail: luiszarate93@hotmail.com

Los compuestos derivados de benceno y tiofeno muestran propiedades ópticas útiles como es fluorescencia, absorción en el rango UV-Visible y tienen capacidad semiconductor. Entre sus aplicaciones más importantes se pueden utilizar como componentes de la capa activa en celdas solares orgánicas (1), son parte del componente principal de los diodos orgánicos emisores de luz “OLED” (2) y son utilizados como biomarcadores fluorescentes (3). En este trabajo se realizó el estudio teórico de dos oligómeros derivados de benceno y tiofeno, con grupos terminales indol y ferroceno.

Se aplicó el método de recocido molecular mediante el programa DFTB+ para obtener el conformero más estable, utilizando los parámetros trans3d ya que incluyen al átomo de Fe. Se realizaron cinco repeticiones del cálculo para posteriormente tomar las geometrías obtenidas y refinar los resultados mediante el programa Gaussian09 con el funcional PBE y las bases def2-SVP y def2-TZVP. Se seleccionaron los conformeros más estables y se calcularon sus propiedades electrónicas y ópticas incluyendo el gap HOMO-LUMO, la afinidad electrónica, el potencial de ionización, las energías de excitación (gap óptico) y espectros de IR, UV y visible.

Referencias:

1. Scharber M.C., Sariciftci N.S. (2013) Efficiency of bulk-heterojunction organic solar cells *Prog. Polym. Sci.* 38, 1929–1940, doi:10.1016/j.progpolymsci.2013.05.001
2. Turkoglu G., Cinar M. E., Buyruk A., Tekin E., Mucur S. P., Kaya K. and Ozturk T. (2016) Novel organoboron compounds derived from thieno[3,2-b]thiophene and triphenylamine units for OLED devices *J. Mater. Chem. C* 4, 6045–6053, doi: 10.1039/c6tc01285j
3. Rasmussen S. C., Evenson S. J. and McCausland C. B. (2015) Fluorescent thiophene-based materials and their outlook for emissive applications *Chem. Commun.* 51, 4528-4543, doi: 10.1039/C4CC09206F