



CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE DERIVADOS DE TRIAZOCICLOPENTAFLUOREN-CUMARINA

Isis Aguilar¹, Marco García², Juvencio Robles¹, Miguel Vázquez¹

^{1,2}Departamento de Química, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato. Noria Alta S/N,
CP 36050. Guanajuato, Gto; México

e-mail: ig.aguilargarduno@ugto.mx

Debido al gran avance científico y tecnológico en el campo de la óptica no lineal, es necesario sintetizar nuevas moléculas que pueden funcionar como materiales electroópticos, estables y con buena respuesta óptica no lineal de tercer orden. Los heterociclos de cumarinas¹ y benzo-indolizinas, por sus características fisicoquímicas documentadas de forma independiente, constituyen núcleos interesantes para ser aplicados en óptica. Es por ello que en este proyecto se modelaron moléculas que contienen núcleos de triazociclopentafluoren-cumarina y se estudiaron sus propiedades ópticas lineales tanto en fase gas como en un medio solvatado obteniéndose resultados para las energías y longitudes de onda de absorción y de emisión, fuerzas del oscilador, entre otros, que están en muy buen acuerdo con los conseguidos de manera experimental. Mediante la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) se encontraron los mínimos en la superficie de energía potencial de los compuestos mientras que para calcular los estados electrónicos excitados que tienen la posibilidad de participar en el proceso de fluorescencia, se utilizó la Teoría de los Funcionales de la Densidad Dependiente del Tiempo (TD-DFT). Los cálculos efectuados en el presente proyecto, que conllevan a la caracterización de la estructura molecular, se realizaron utilizando el software GAUSSIAN² y AIMALL³.

Referencias:

(1) Sethna, S. M.; Shah, N. M., *Chem. Rev.*, **1945**, 36, 1, 1-62.

(2) Frisch, M. J., et. al. *Gaussian 09, Revision A.02*, Gaussian Inc Wallingford CT, vol. 34. p. Wallingford CT, 2009.

(3) Todd A. Keith, *AIMAll, Version 16.01.09*, TK Gristmill Software, Overland Park KS, USA, 2016 (aim.tkgristmill.com)