



ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ESPECTROSCÓPICAS DE NUEVOS DERIVADOS DE CHALCONAS.

Luz María Rodríguez Valdez¹, José Carlos Espinoza-Hicks¹, Alejandro Camacho Dávila¹.

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Chihuahua.

C. P. 31125. Chihuahua, México.

lmrodrig@uach.mx

En este trabajo se presenta el análisis teórico y experimental de cuatro nuevos derivados de chalconas con diferentes substituyentes unidos a los anillos A y B, tales como: grupos hidroxil, metoxil, geranil y prenil; para su posible aplicación como materiales semiconductores orgánicos.

Los compuestos obtenidos fueron caracterizados experimentalmente mediante técnicas de resonancia magnética nuclear (RMN), espectrometría de masas (MS), espectrometría de masas de alta resolución (HR-MS), infrarrojo (IR) y ultravioleta visible (UV-Vis).

Para el análisis teórico se empleó la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) con los funcionales B3LYP, PBE0 y M06-2X en combinación con el conjunto de base 6-311G(d,p). Las propiedades de estado excitado fueron calculadas mediante DFT dependiente del tiempo empleando las mismas metodologías que para estado basal.

Las longitudes de onda de absorción vertical (λ_{\max}), calculadas en fase gas y usando etanol como solvente, fueron consistentes con los valores experimentales obtenidos, siendo las metodologías TD-DFT:B3LYP/6-311G(d,p) and PCM-TD-DFT:PBE0/6-311G(d,p) las que registran una mejor correlación con datos experimentales. Las propiedades electrónicas calculadas: energía de reorganización, localización de orbitales moleculares frontera y energía de gap, indican que los cuatro derivados analizados muestran características de semiconductores *tipo-n*.