

ESTUDIO DE ESTADOS EXCITADOS Y DESLOCALIZACIÓN DE CARGA EN OLIGOTIOFENOS RAMIFICADOS

M. Carmen Ruiz Delgado*¹, Rafael C. González Cano¹, Juan Casado¹, J.T. López Navarrete¹

¹Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga.; e-mail: carmenrd@uma.es

Nanociencia y Nanotecnología

Los politiofenos ramificados tridimensionales (3D) y oligotiofenos dendriméricos han sido recientemente desarrollados en la búsqueda de mejoras en los materiales para aplicaciones fotovoltaicas (por ejemplo, un mayor área de contacto entre dador y aceptor, absorciones moduladas hacia el visible-NIR, etc) [1-2]. El síntón clave en la estructura de estos dendrímeros de tiofeno consiste en la combinación de tiofenos consecutivos en conexión alpha-alpha (α - α , que presenta una mejor conjugación) con conexiones alpha-beta (α - β , que permite la disposición 3D), ver Figura 1. Este trabajo trata de elucidar el efecto “competitivo” que presentan la conjugación en posición α - β sobre la de tipo α - α , tanto en la estabilización de estados excitados (singlete y triplete) como en la deslocalización de carga en especies oxidadas; ambos mecanismos son de vital importancia para optimizar el funcionamiento de estos sistemas en células solares. Para ello, proponemos un estudio de tres sistemas oligotiofénicos ramificados (ver Figura 1),[3-4] cuyas propiedades fotofísicas serán comparadas con la de sus homólogos lineales (α - α), haciendo uso de técnicas espectroscópicas de absorción y emisión, medidas de laser flash fotólisis y cálculos químico-cuánticos tipo DFT.

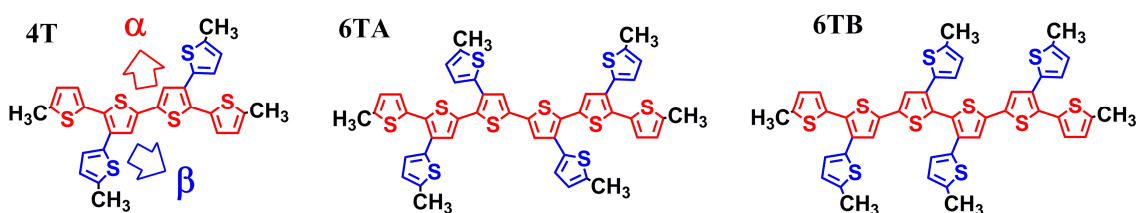


Figura 1. Estructura química de los oligotiofenos ramificados sometidos a estudio.

Referencias:

- [1] S. Link, T. Richter, O. Yurchenko, J. Heinze, S. Ludwigs, *J. Phys. Chem. B*, Vol. 114, 10703-10708, 2010. [2] H.S. Mangold, T. V. Richter, S. Link, U. Würfel, S. Ludwigs, *J. Phys. Chem. B*, Vol. 116, page 154-155, 2012. [3] G Saini, N. T. Lucas, J. Jacob, *Tetrahedron Letters*, Vol. 114, 10703-10708, 2010. [4] G Saini, J. Jacob, *Macromol. Symp.*, Vol. 298, 154-159, 2010.