

TRANSFERENCIA COMPETITIVA EN UNIONES α - α Y α - β DE OLIGOTIOFENOS PRECURSORES DE MODELOS DENDRIMÉRICOS

Rafael C. González Cano¹, M. Carmen Ruiz Delgado¹, Juan Casado¹, J.T. López Navarrete¹

¹Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga.

e-mail: rafacano@uma.es

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]. Este trabajo trata de elucidar el efecto “competitivo” que presentan la conjugación en posición α - β sobre la de tipo α - α ^[3], mediante la caracterización de estados excitados y de diferente carga de tres oligotiofenos ramificados (ver Figura 1)^[4-5], evaluando mecanismos de vital importancia para optimizar el funcionamiento en células solares. Este estudio se lleva a cabo mediante una amplia variedad de técnicas (como espectroscopías de absorción, emisión y de estados de transición triplete, así como electroquímica) en combinación con cálculos en DFT, y comparando dichos resultados con los de sus homólogos α -lineales. De este modo se podrá indicar la contribución de la conjugación α - β respecto de la α - α en la deslocalización de cargas en diferentes estados de oxidación y en estados electrónicos singlete y triplete^[6].

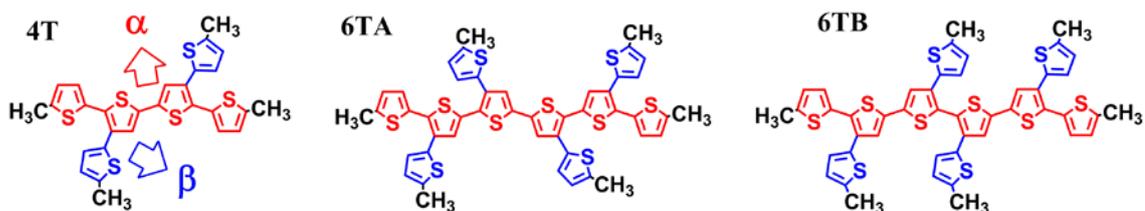


Figura 1. Estructura química de los oligotiofenos ramificados sometidos a estudio.

[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 154-15, 2012.

[3] R. C. González Cano, H. Herrera, J. L. Segura, J. T. López Navarrete, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, ChemPhysChem Vol. 13, 3893-3900 2012

[4] G Saini, N. T. Lucas, J. Jacob, Tetrahedron Letters, Vol. 114, 10703-10708, 2010.

[5] G Saini, J. Jacob, Macroml. Symp., Vol. 298, 154-159, 2010.

[6] R. C. González Cano, G. Saini, J. Jacob, J. T. López Navarrete, J. Casado, M. C. Ruiz Delgado, Chem Eur J, DOI: 10.1002/chem.201302244