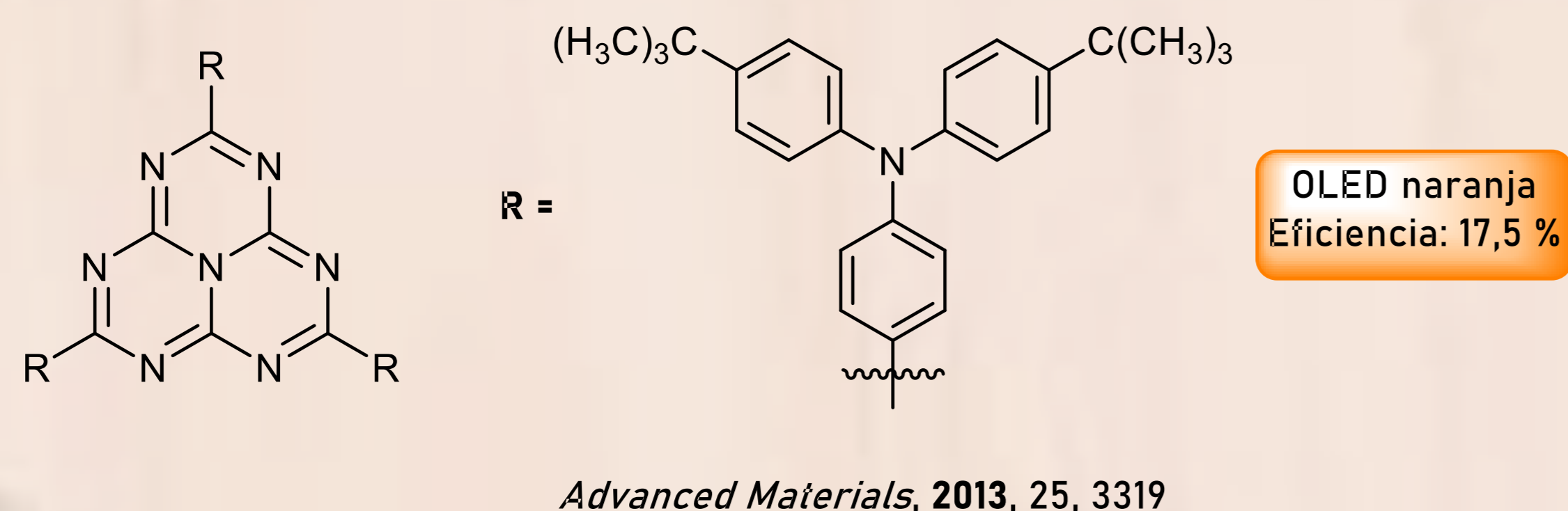
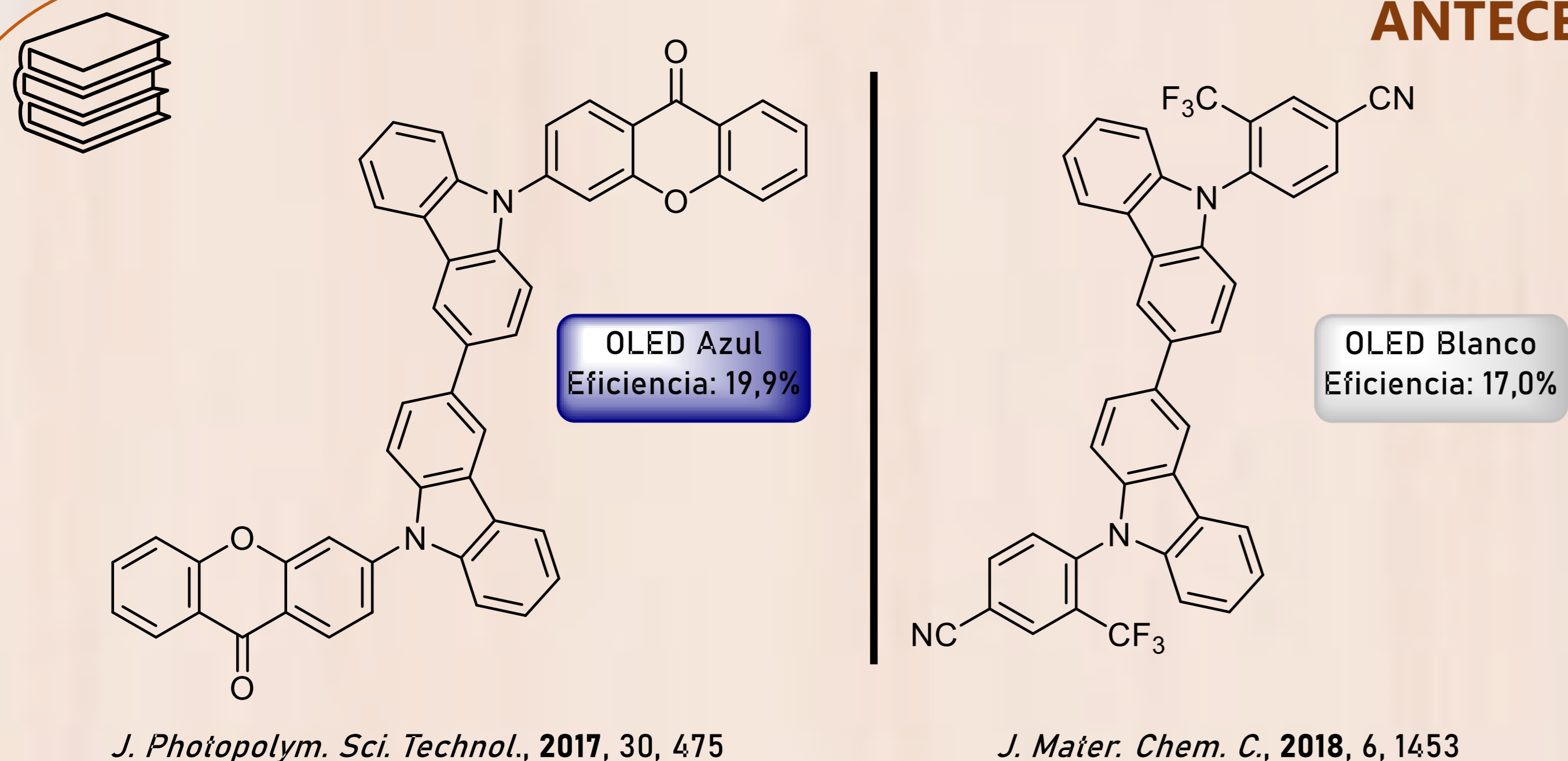


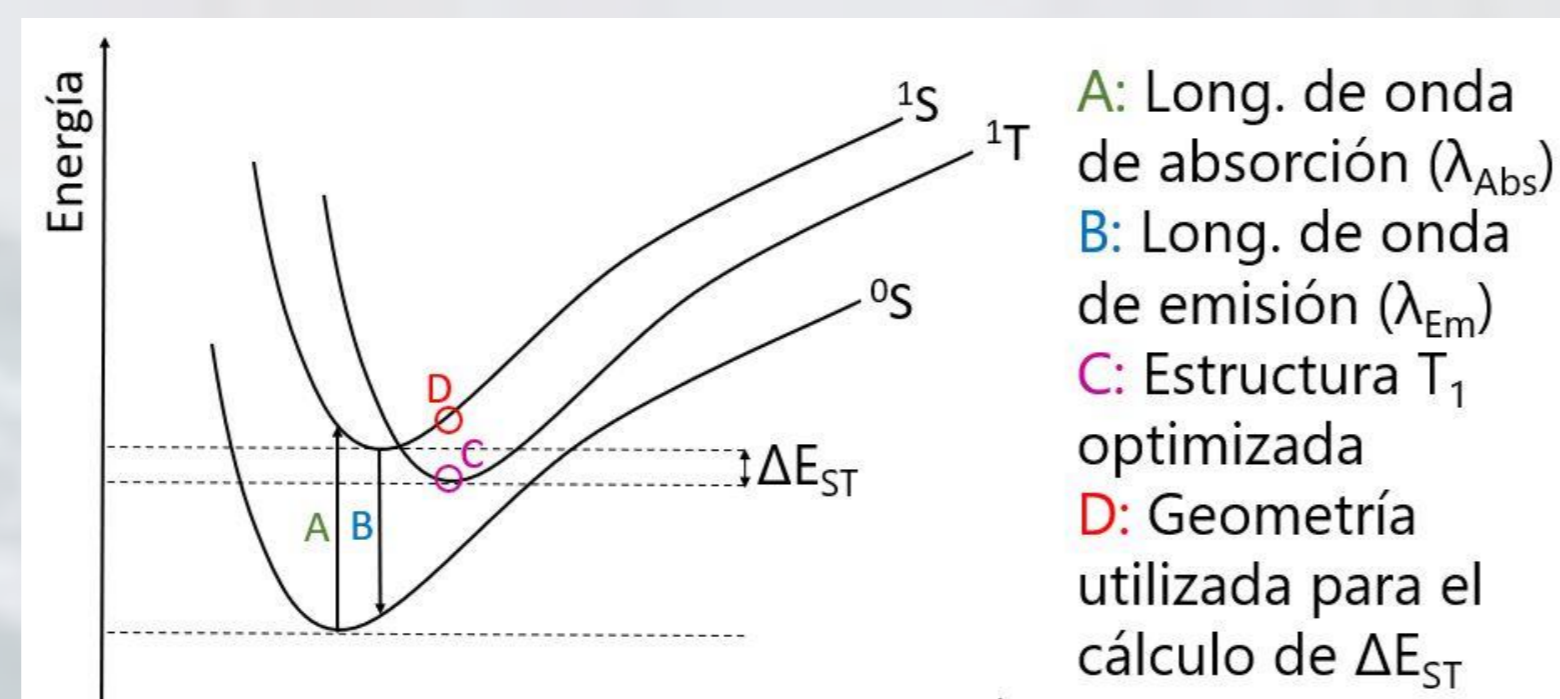
María Alexia El Ain, Laureano Marín Oliva, María Eugenia Budén, Ricardo Ariel Fernández, Marcelo Puiatti
Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba (INFIQC), Facultad de Ciencias Químicas,
Universidad Nacional de Córdoba, XHUA5000, Argentina
maelain@unc.edu.ar

ANTECEDENTES



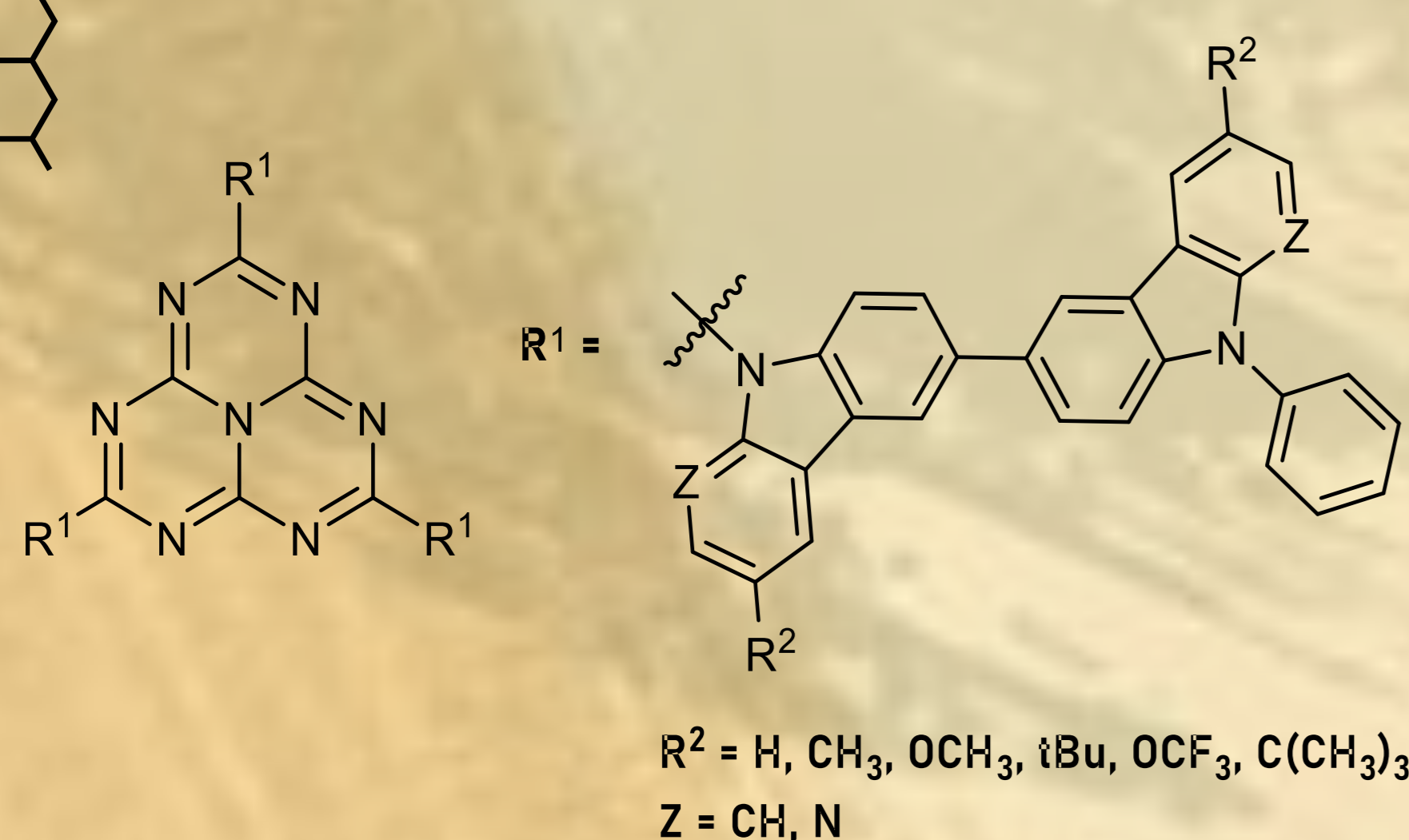
METODOLOGÍA

Método DFT:
B3LYP/6-31G
TD-DFT para S_1
Fase gaseosa



Programa: Gaussian 016

RESULTADOS HAP-BiCBZ



$\Delta E (S-T) \rightarrow$
aproximación, diferencia de energía entre los puntos **A** y **C**

$R^2 = H / Z = CH$

$\Delta E (S-T) = 20,7 \text{ meV}$

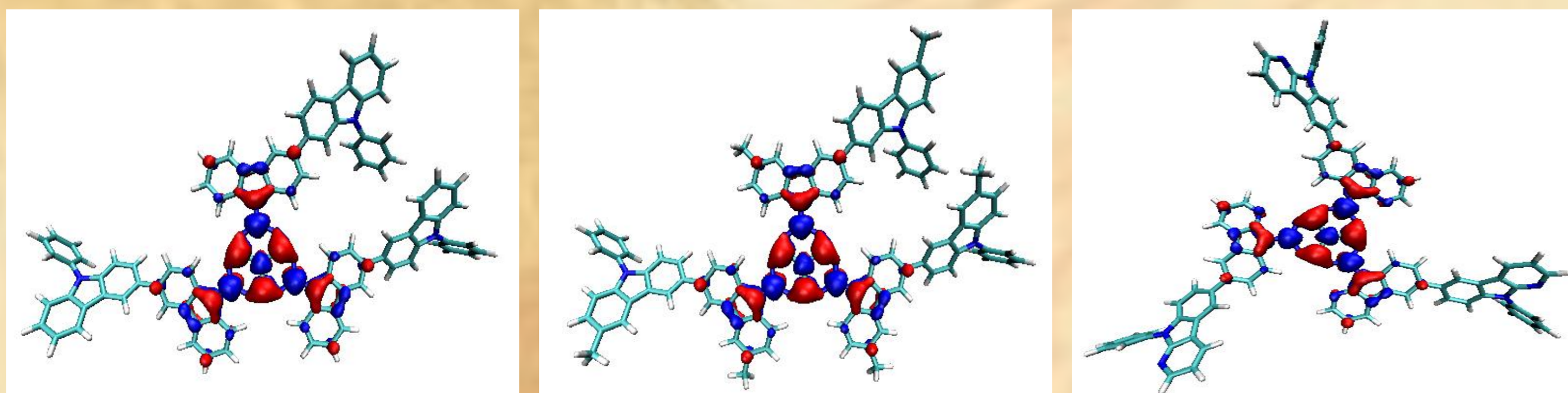
$R^2 = CH_3 / Z = CH$

$\Delta E (S-T) = 28,4 \text{ meV}$

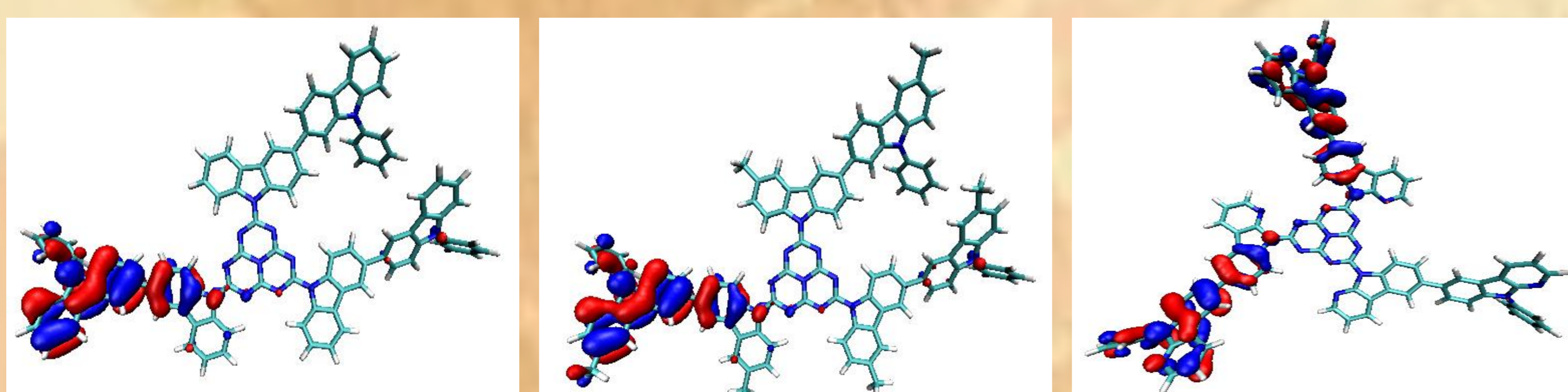
$R^2 = H / Z = N$

$\Delta E (S-T) = 97,9 \text{ meV}$

L
U
M
O



H
O
M
O



CONCLUSIÓN y PROYECCIONES

BiCBZ

- Optimizar el estado excitado (S_1) para encontrar el mejor candidato a sintetizar
- Estimar longitud de onda de emisión

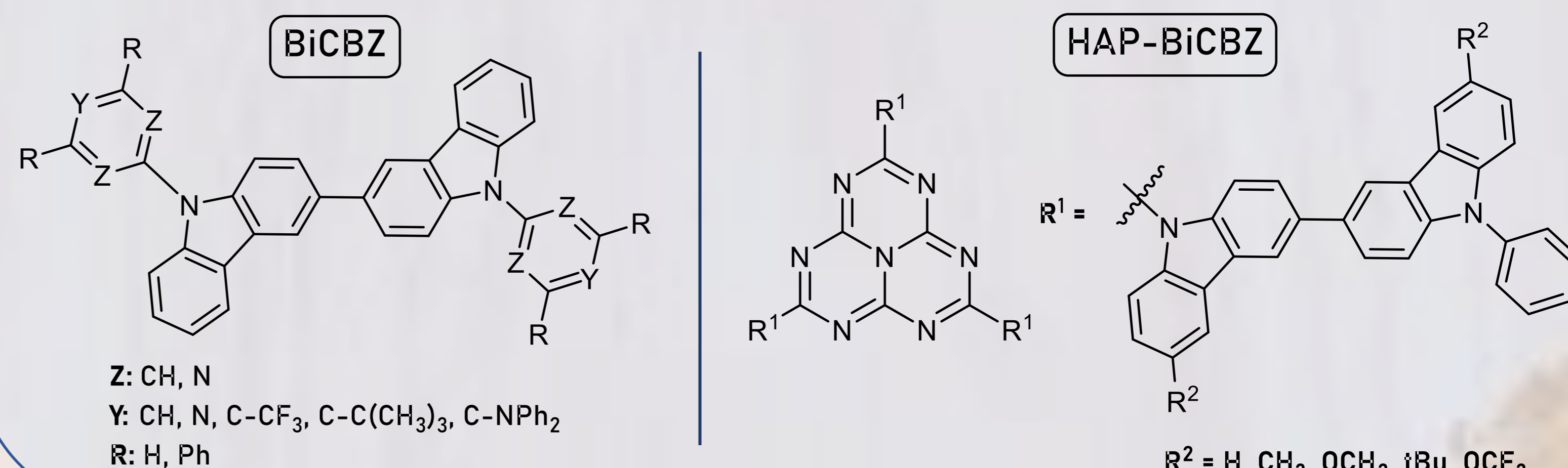
HAP - BiCBZ

- Continuar con las determinaciones de las energías
- Elegir el mejor candidato para sintetizar
- Estimar longitud de onda de emisión

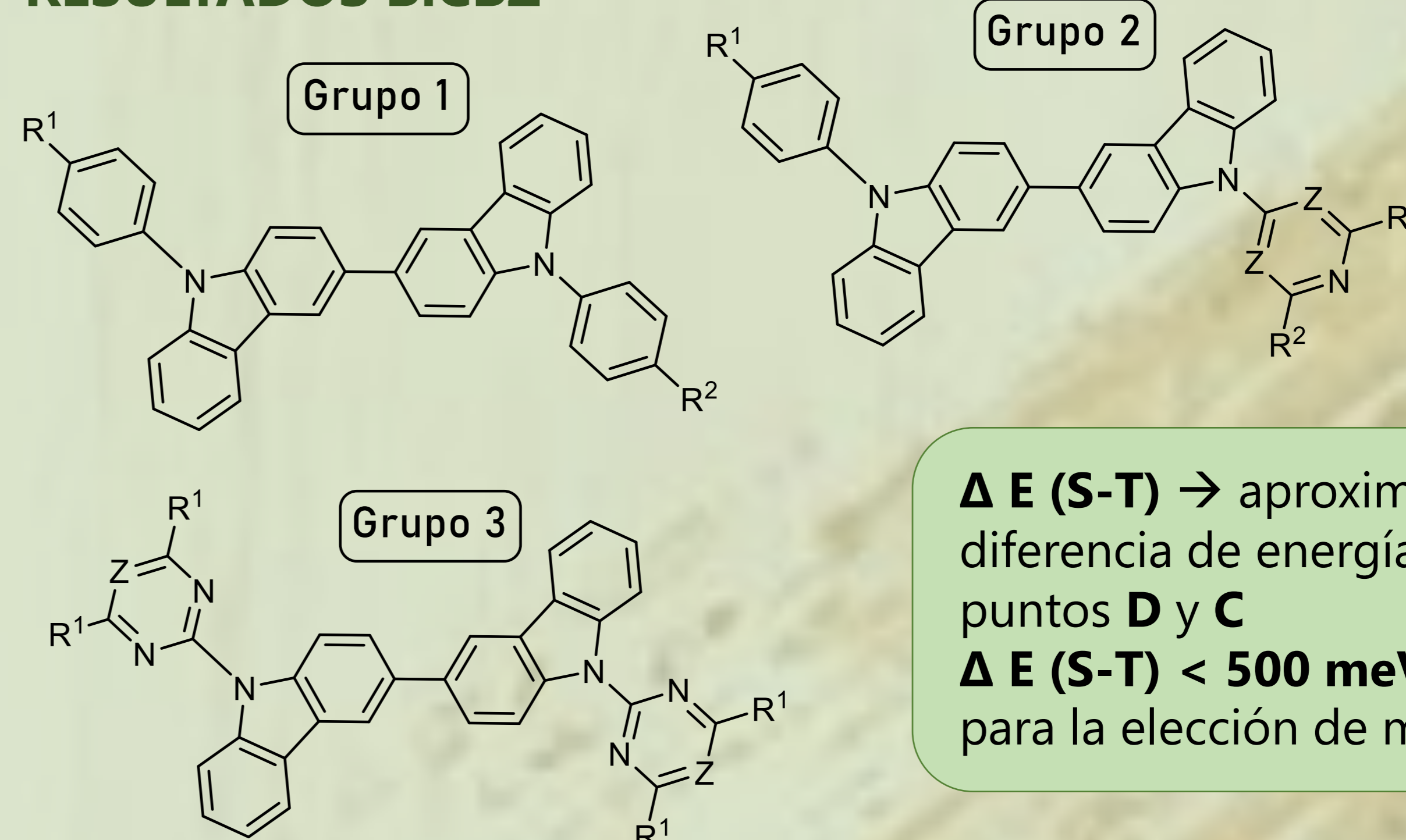
OBJETIVOS

Predecir las distintas propiedades fotofísicas mediante modelado molecular, para la posterior síntesis de los mejores candidatos

- Distribución HOMO-LUMO
- Diferencia de energía entre S_1 y T_1
- Estimación de longitud de onda de emisión \rightarrow AZUL

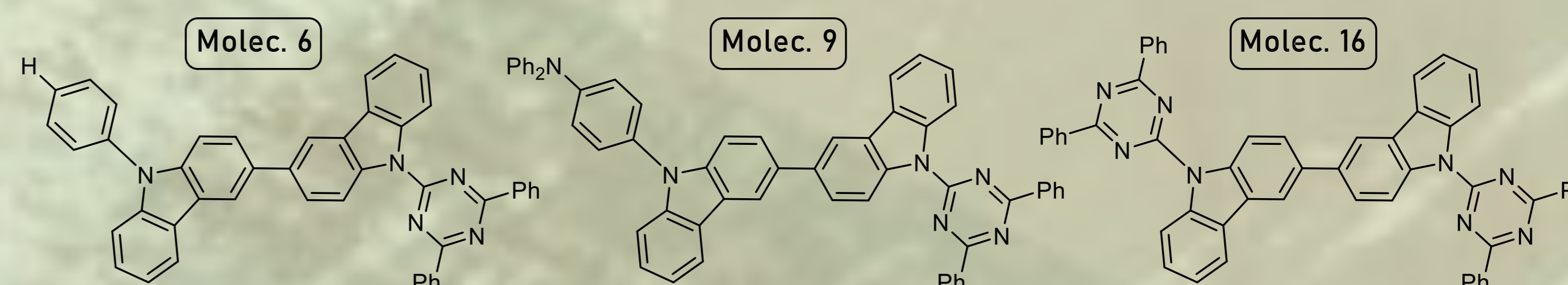


RESULTADOS BiCBZ



$\Delta E (S-T) \rightarrow$ aproximación, diferencia de energía entre los puntos **D** y **C**
 $\Delta E (S-T) < 500 \text{ meV} \rightarrow$ parámetro para la elección de moléculas

	Molécula	R ¹	R ²	Z	$\Delta E (S-T)$ (meV)
Grupo 1	1	H	CF ₃	-	1060
	2	C(CH ₃) ₃	CF ₃	-	536
	3	NPh ₂	CF ₃	-	530
	4	CF ₃	CF ₃	-	588
Grupo 2	5	H	H	N	504
	6	H	Ph	N	352
	7	CF ₃	Ph	N	443
	8	C(CH ₃) ₃	Ph	N	397
	9	NPh ₂	Ph	N	359
	10	NPh ₂	H	N	449
	11	NPh ₂	H	CH	698
	12	H	H	CH	-
	13	C(CH ₃) ₃	H	CH	-
Grupo 3	14	H	-	CH	746
	15	H	-	N	672
	16	Ph	-	N	436



L
U
M
O



H
O
M
O

