PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS DE ELECTROPOLÍMEROS DE SISTEMAS POLIAZAHETEROCÍCLICOS AROMÁTICOS CON PERIFERICA DE CARBAZOL

Vázquez, D.[1]; Possetto, D.[2]; Suchetti, C.[2]; Spanevello, R. A.[1]; Fungo, F.[2]; Mangione, M. I.[1]
[1]Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario. (UNR.IQUIR.CONICET).
[2]Instituto de Investigaciones en Tecnologías Energéticas y Materiales Avanzados, Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC-CONICET).
E-mail: vazquez@iquir-conicet.gov.ar

Los compuestos heterocíclicos son importantes por su abundancia natural y sus relevantes propiedades. Los compuestos poli-*aza*-heterocíclicos, triazoles, triazinas y tetrazinas, constituyen un grupo de sistemas aromáticos deficientes en electrones debido a la abundancia de nitrógeno. Actualmente, el desarrollo de polímeros orgánicos conductores es de gran importancia en una amplia variedad de aplicaciones como dispositivos optoelectrónicos (DOs), entre otros.[1]

Los poli-*aza*-heterociclos pueden ser aplicados como transportadores de electrones o materiales ambipolares en el diseño y fabricación de OLEDs. Sus rendimientos cuánticos de fluorescencia y comportamiento electroquímico reversible, los convierte en candidatos para el desarrollo de DOs.[2] La combinación con grupos electropolimerizables como la unidad carbazol, permiten generar películas poliméricas con propiedades interesantes.

En el presente trabajo se presenta el diseño, síntesis y caracterización estructural, físico- y electroquímica de poli-*aza*-heterociclos estructuralmente relacionados que contienen núcleos 1,2,3-triazol, *sym*-triazina y *sym*-tetrazina unidos a carbazol (Figura 1).

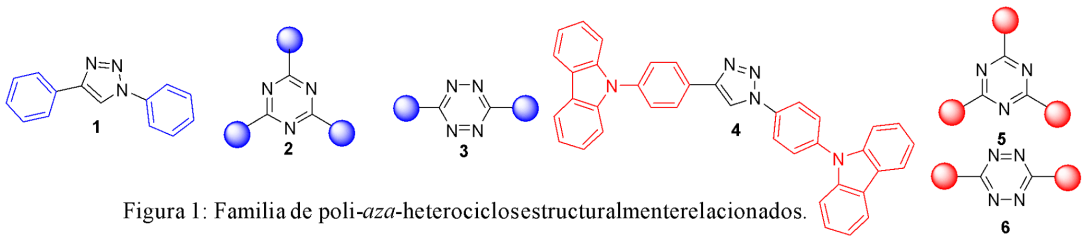


Figura 1: Familia de poli-*aza*-heterociclosestructuralmenterelacionados.

Los estudios foto-electroquímicos, superficiales y cálculos computacionales de los electropolímeros generados demostraron que los monómeros sintetizados tienen capacidad de electropolimezar formando films homogéneos. Presentan electrocromismo, y la geometría nuclear generó cambios morfológicos (espesor, rugosidad) (Tabla 1).

Monómero	$\lambda_{máx.}$ Abs. (nm)	$\lambda_{máx.}$ Em. (nm)	Emol (V)	Electropolímero
1	264	-	-	x
2	271	-	-	x
3	298	-	-	x
4	310	398	1,02	si
5	355	507	1,07	si
6	365	455	0,96	si

Tabla 1: propiedades ópticas y electroquímicas.

Mediante ingeniería molecular se ha logrado diseñar una familia de poli-*aza*-heterociclos con prometedoras propiedades para su aplicación como materiales optoelectrónicos.

1. Yin, Z.; Zheng, W. *Adv. Energy Mater*. **2012**, 2, 179 – 218.
2. Soni, J. P.; Joshi, S. V.; Chemitikanti, K. S.; Shankaraiah, N. *Eur. J. Org. Chem*. **2021**, 10, 1476 – 1490.