

Cálculo de las excitaciones electrónicas en polímeros conjugados con carbonilo A-B sustituido

Vladimir García Hernández^{A,B}, Virgilio A. González González,^{A,B}, Sergio Mejía Rosales^{B,C}, Ivanna Moggio^D, Eduardo Arias-Marín^D

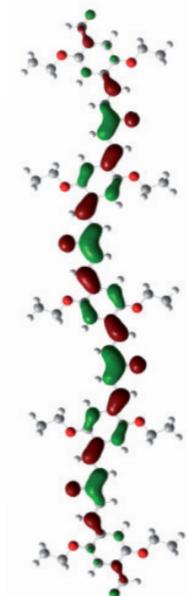
^AFacultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, UANL

^BCIIDIT-UANL

^CFacultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UANL

^DCentro de Investigación en Química Aplicada, Saltillo, Coahuila.

virgilio.gonzalezgznz@uanl.edu.mx



RESUMEN

Se reporta el modelado molecular de dos familias de oligómeros conjugados (polímeros de condensación aldólica con y sin sustituyentes etoxi) de entre dos y seis unidades repetitivas. Las geometrías se optimizaron mediante la “Aproximación Local de la Densidad de Spin” y el cálculo de los estados electrónicos excitados mediante los métodos “Negación Intermedia de la diferencia de Traslapo de Zerner” y “Teoría Funcional de la Densidad dependiente del tiempo”. Los resultados muestran el efecto de los sustituyentes y del grado de polimerización en los espectros U.V. Vis. así como una deslocalización no total en los oligómeros de condensación aldólica. Se corrobora el efecto electrón donador del grupo etoxi y el efecto aceptor del oxígeno carbonílico.

PALABRAS CLAVE

Modelado molecular, Polímeros conjugados, U.V.–Vis, condensación aldólica.

ABSTRACT

A molecular modeling of two conjugated families of oligomers (aldol condensation polymers with and without etoxy substituent) with two to six repeating units is reported. The geometry optimization was carried out using “Local Spin Density Approximation” and the electronic excited states through “Zerner Intermediate Neglect of Diatomic Orbitals” and “Time Dependent Density Functional Theory” methods. The results shown the substituent and polymerization effect on the U.V. –Vis. spectra. It can be observed a non total electron delocalization in the aldol oligomers. the electron donor character is corroborated in the etoxy group as well as the donor effect – acceptor character of the carbonil group.

KEYWORDS

Molecular modeling, conjugated polymers, U.V.–Vis, aldol condensation.

INTRODUCCIÓN

Los polímeros conjugados han ganado desde hace varios años un interés creciente debido a las múltiples aplicaciones que se han generado aprovechando sus propiedades optoelectrónicas,¹⁻⁴ como en la construcción de diodos electroluminiscentes, celdas solares, dispositivos de óptica no lineal, y sensores, entre otros. Para el estudio de estos sistemas, los métodos de modelado utilizando “primeros principios” (métodos *ab initio*) son herramientas que aportan gran cantidad de información respecto a la relación estructura–propiedades de los materiales, ya que permiten conocer, incluso antes de su síntesis, características de las que dependen las propiedades mecánicas, ópticas, y electrónicas, tales como la brecha energética o GAP entre el orbital ocupado más alto (HOMO) y el orbital más bajo no ocupado (LUMO),⁵ las frecuencias vibracionales⁶ y los estados electrónicos excitados.⁷ Esta información es de innegable utilidad, tanto en la caracterización experimental como en la implementación de aplicaciones de los materiales.

Utilizando los métodos cuánticos para modelar sistemas moleculares, es posible diseñar materiales a escala molecular y predecir sus propiedades espectrales, así como facilitar la interpretación de algunos resultados experimentales. La teoría del funcional de la densidad (DFT), desarrollada por Khon y Sham,⁸ y la Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT),⁹ son herramientas mecánico-cuánticas que han sido utilizadas con excelentes resultados para el cálculo de propiedades de diferentes moléculas orgánicas. La DFT predice propiedades a nivel atómico y molecular a través del cálculo de la densidad electrónica, a diferencia de métodos como el Hartree-Fock que están basados en el cálculo de la función de onda de los electrones. Esto hace a la DFT más adecuada en la solución de sistemas moleculares muy grandes, en comparación con otros métodos. El teorema que sirve como idea fundamental en DFT es que las propiedades de un sistema en su estado base, se pueden describir a través de funcionales dependientes de la densidad electrónica. Así, la energía total del sistema está dada por

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{ns}[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (1)$$

donde $T[\rho]$ es la energía cinética de los electrones,

$V_{sc}[\rho]$ es la energía potencial entre el núcleo y un electrón, $J[\rho]$ es la energía coulombiana para un par de electrones y $E_{xc}[\rho]$, que se conoce como energía de correlación e intercambio, se debe a diversas interacciones entre muchos cuerpos, y la forma de su funcional es complicada y en general, desconocida. Por medio de la minimización de la energía es posible encontrar la densidad electrónica, y de ahí cualquier cantidad física medible. Como el término $E_{xc}[\rho]$ se desconoce, es necesario aproximarlos de forma lo suficientemente sencilla para que el cálculo no se vuelva demasiado costoso. Khon propuso tratar un sistema de electrones no interactuantes y utilizarlo como aproximación para $E_{xc}[\rho]$, lo que se conoce como Aproximación Local de la Densidad, (LDA).⁸ Posteriormente se han desarrollado otras aproximaciones que reproducen más fielmente los efectos de correlación, como los funcionales híbridos, que son muy utilizados para compuestos orgánicos.

Por otro lado, la TDDFT desarrollada por Runge y Gross,⁹ es una extensión del trabajo de Khon que hace posible la descripción de propiedades dinámicas de sistemas de muchas partículas interactuantes. Este desarrollo permite el cálculo de excitaciones ópticas, entre otras propiedades.

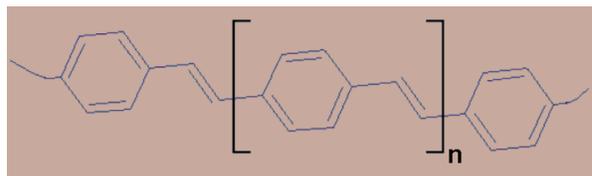


Fig. 1. Estructura química del poliparafenilenvinileno (PPV).

El Poliparafenilenvinileno (PPV) (cuya estructura se muestra en la figura 1) y algunos de sus derivados, están entre los polímeros conjugados más estudiados por técnicas tanto experimentales como computacionales, dando resultados que corroboran la utilidad del modelado en la predicción de propiedades.¹⁰ En este trabajo se estudia una familia de oligómeros con un carbonilo tipo α - β insaturados (figura 2), derivados del poly[4-(3-oxo-1-butenyl)-benzaldehido], (POB), con sustituyentes etoxi en las posiciones 2,5 de los anillos aromáticos (Poli-[(2,5-bis-(etoxi)-4-(3-oxo-1-butenil)-benzaldehido)]) (PEOB). Estos derivados con cadenas laterales se han diseñado con el objetivo de impartir solubilidad al oligómero.

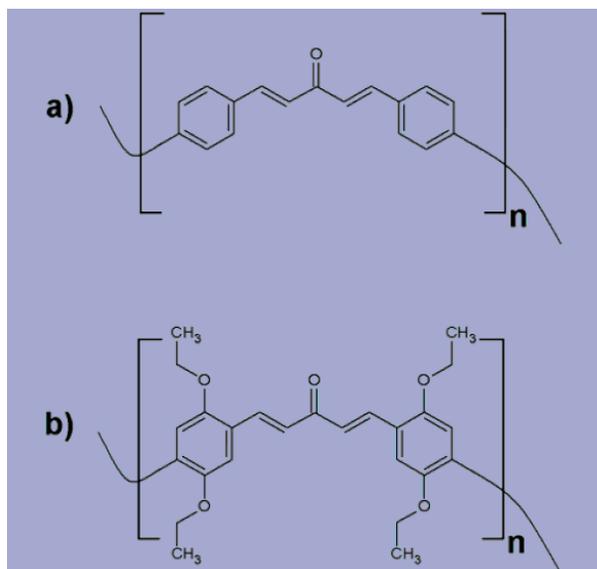


Fig. 2. Estructuras de los polímeros bajo estudio. a) POB, y b) PEOB, donde $n = 1$.

La comparación de las propiedades optoelectrónicas entre sistemas con y sin sustituyentes etoxi en el polímero, (sustituyente considerado como donador de electrones), es precisamente la finalidad de este estudio. La síntesis de este tipo de polímeros ya ha sido reportada;¹¹ el interés académico y de potencial comercial de estos polímeros radica en sus características de ser semiconductores y presentar fotoluminiscencia.

CÁLCULOS TEÓRICOS Y MODELO

En los cálculos realizados para el análisis general de las estructuras de los polímeros mostrados en la figura 2, se hizo uso de restricciones de simetría con el fin de reducir el tiempo de cálculo, tanto en la optimización de las estructuras como en el de las energías de excitación. Las geometrías de ambas familias de estructuras se optimizaron usando el programa Gaussian 03,¹² empleando el popular funcional híbrido B3LYP para describir a $E_{xc}[\rho]$ ¹³ tanto en la optimización, como en el cálculo de los estados excitados. El funcional B3LYP considera, además de aproximación LSDA, términos adicionales que mejoran el cálculo de frecuencias vibracionales y de geometrías de equilibrio, en comparación con la aproximación LDA. En el caso particular de este funcional se emplean tres parámetros empíricos, los cuales se ajustan apropiadamente a los valores experimentales de las energías de atomización.

En la construcción del modelo, se consideró un dímero como el correspondiente par de bencenos conectados por los enlaces dobles conjugados; un trímero corresponde a tres bencenos interconectados por enlaces dobles conjugados, y así sucesivamente hasta incluir 6 anillos bencénicos. Las terminaciones de cada oligómero son átomos de hidrógeno.

Después de optimizar los oligómeros, se procedió a calcular las energías de excitación para cada uno. Puesto que DFT se basa en la minimización de la energía en el estado base, es necesario usar otras herramientas para estudiar los estados excitados. Se utilizaron dos métodos: ZINDO y TDDFT. El método ZINDO es un algoritmo semiempírico, parametrizado con respecto a datos experimentales. Por otro lado, TDDFT es una extensión de DFT y se utiliza para conocer las propiedades dinámicas respecto a la densidad electrónica.

Se realizó el cálculo de hasta 10 estados excitados, haciendo uso de restricciones de simetría. El cálculo de las energías de excitación se hizo para los mismos oligómeros desde dos hasta seis unidades repetitivas ($N=2,3,4,5,6$). En ambos casos se utilizaron las posiciones atómicas en coordenadas cartesianas generadas durante la optimización por DFT. Se consideraron sólo las excitaciones de tipo singulete, causantes de la fluorescencia. Una vez que se conocieron en su totalidad las energías de excitación para los oligómeros, dichos valores se extrapolaron con respecto al inverso del número de unidades repetitivas en el infinito, práctica común en este tipo de cálculos.¹⁴

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Eigenvalores de energía

A partir de la optimización, se extraen los valores de energía o eigenvalores correspondientes a los orbitales frontera (HOMO y LUMO) y su diferencia (GAP). Estos datos se reportan en la tabla I en función del número de unidades repetitivas (N) para cada familia de oligómeros (POB y PEOB).

Con la finalidad de hacer observaciones más precisas, en la figura 3, se muestran las gráficas de las magnitudes energéticas de los orbitales frontera en función de N , apreciándose que al disminuir el grado de polimerización hay una ligera tendencia a incrementar la energía del LUMO y a reducir la

Tabla I. Magnitudes energéticas de los orbitales HOMO, LUMO y del GAP en eV, para los oligómeros PEOB y POB en función del número de unidades repetitivas (N).

N	(PEOB)			(POB)		
	HOMO	LUMO	GAP	HOMO	LUMO	GAP
2	-6.72	-2.99	3.72	-5.74	-2.69	3.05
3	-6.31	-3.05	3.26	-5.52	-2.75	2.77
4	-6.20	-3.07	3.13	-5.47	-2.77	2.69
5	-6.15	-3.07	3.07	-5.41	-2.77	2.64
6	-6.12	-3.07	3.05	-5.39	-2.77	2.61

energía del HOMO. A grado de polimerización constante ($N = Cte.$), los sustituyentes etoxi producen un incremento en las energías del LUMO y una disminución de la energía del HOMO.

De los resultados mostrados en la figura 4, puede notarse que el tamaño del GAP disminuye al aumentar el grado de polimerización, sugiriendo un aumento en la deslocalización electrónica,¹⁴ en congruencia con las estructuras planteadas (figura 2). Además es posible extrapolar los valores a grado de polimerización infinito ($1/N = 0$) mediante ajustes a rectas, con una desviación aceptable a bajos grados de polimerización ($N < 4$ para el POB y $N < 3$ para el PEOB), obteniendo los valores $E_{GAP}^{\infty} = 2.81$ eV para el POB y $E_{GAP}^{\infty} = 2.44$ eV para el PEOB.

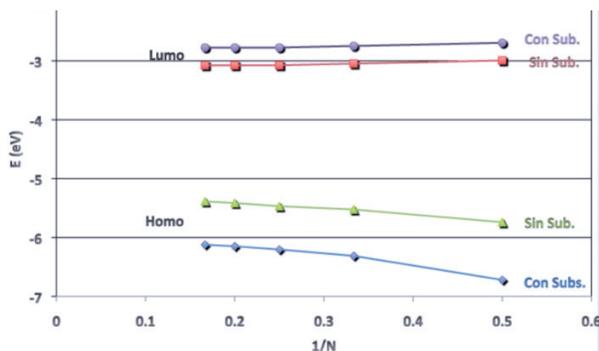


Fig. 3. Energías de los orbitales HOMO y LUMO de los oligómeros POB (Sin Sub.) y PEOB (Con Sub.).

La disminución del GAP implica un aumento en la conductividad eléctrica, ya que es más fácil el paso de los electrones de la banda de valencia a la de conducción, y conlleva un desplazamiento batocrómico (hacia el rojo) en la longitud de onda de máxima absorción. Los valores obtenidos muestran una tendencia similar a lo observado experimentalmente,¹¹ donde se reporta un incremento en los máximos de las bandas de absorción para

el Poli-[(2,5-bis-(octiloxi)-4-(3-oxo-1-butenil)-benzaldehido)] de aproximadamente 3 o 4 nm (de 423 a 427 nm), al incrementar el peso molecular de 1,260 a 1,680 g/mol., lo que puede considerarse un acuerdo cualitativo.

Aunque de acuerdo al formalismo de Koopman¹⁵ el cual dice que en un sistema cerrado, la primera energía de ionización es igual al negativo de la energía del HOMO los orbitales de Khon-Sham, utilizados en este trabajo, no son estrictamente apropiados para estimar el potencial de ionización y la afinidad electrónica,¹⁸ los resultados son confiables ya que, según Zhan,¹⁹ existe una buena correlación lineal entre los resultados así obtenidos y los calculados estrictamente de acuerdo a Koopman y los experimentales.

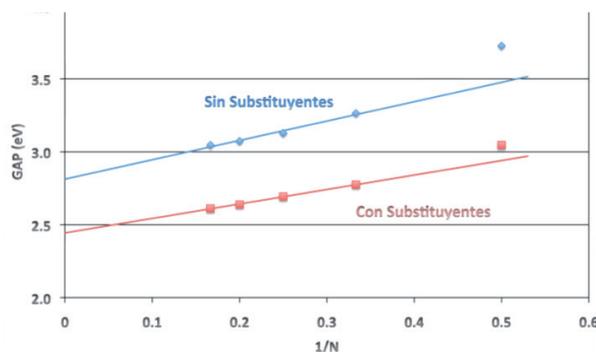


Fig. 4. Efecto del grado de polimerización sobre la magnitud del GAP para las estructuras con sustituyentes (PEOB) y sin ellos (POB).

Número de onda y distancias de enlace

Utilizando el software GaussSum,¹⁶ se realizó el cálculo de los números de onda correspondientes a las frecuencias vibracionales para los dos primeros oligómeros optimizados, (dímero y trímero), de cada familia (POB y PEOB), lo cual es útil para comprobar que el estado de energía encontrado es un mínimo real, por no presentar frecuencias negativas. Además fue posible identificar algunas frecuencias vibracionales activas en el infrarrojo. El cálculo de las frecuencias vibracionales para oligómeros de mayor tamaño representa demasiado tiempo de cálculo por lo que no se realizaron. En la figura 5 se muestra el espectro vibracional para el trímero PEOB y en la tabla II y tabla III las frecuencias características para dímero y trímero con y sin sustituyentes respectivamente.

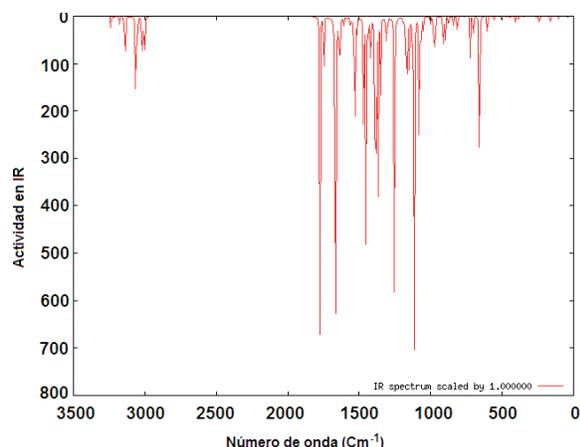


Fig. 5. Espectro vibracional calculado para el trímero sustituido.

Tabla II. Modos vibracionales y número de onda de absorción calculadas PEOB.

Enlace	Modo vibracional	Número de onda Cm^{-1}	
		Dímero	Trímero
C=O	Estiramiento	1749	1747
C=O terminales	Estiramiento	1775, 1776	1774
C=C	Estiramiento	1669	1665
C=C terminales	Estiramiento	1607	1607
Anillo bencénico	Torsión	-4.19	3.04

Tabla III. Modos vibracionales y número de onda de absorción calculadas POB.

Enlace	Modo vibracional	Número de onda Cm^{-1}	
		Dímero	Trímero
C=O	Estiramiento	1754	1752
C=O terminales	Estiramiento	1798, 1799	1797, 1798
C=C	Estiramiento	1682	1677, 1684
C=C terminales	Estiramiento	1613, 1665	1600, 1667
Anillo bencénico	Torsión	16.63	13.48

Los enlaces que participan directamente en la cadena principal, como los carbonilos y los dobles enlaces, presentan una ligera disminución en cuanto a sus frecuencias vibracionales, respecto a las típicas de estos grupos funcionales que no están sobre

macromoléculas conjugadas. Esto se ha observado experimentalmente,¹⁵ y es indicativo de que la conjugación de la cadena principal interactúa con dichos modos vibracionales.

El dímero presenta frecuencias imaginarias y el trímero no. Esto significa que el mínimo de energía obtenido para el dímero no corresponde a un mínimo local sino probablemente a un estado de transición. Dicha frecuencia corresponde a la rotación asimétrica de los anillos bencénicos fuera del plano y es similar a la primera frecuencia vibracional de torsión del trímero. La diferencia entre dímero y trímero puede deberse al hecho de que ambas moléculas difieren en el tipo de simetría y además significa que el estado planar de la molécula no corresponde a un mínimo de energía. Esta información es importante porque significa que además de la geometría planar, puede haber varios estados basales con diversos ángulos de torsión, lo que da lugar a un ensanchamiento de las bandas correspondientes.⁷

Orbitales moleculares

Los orbitales moleculares representan la distribución espacial de la función de onda. Ya que las transiciones electrónicas pueden ocurrir desde orbitales inferiores al HOMO, se calcularon, además de los orbitales HOMO y LUMO, los orbitales HOMO-1 y HOMO-2. En las figuras 6 y 7 se muestran las isosuperficies de distribución de función de onda de algunos orbitales frontera, correspondientes a los oligómeros POB y PEOB respectivamente.

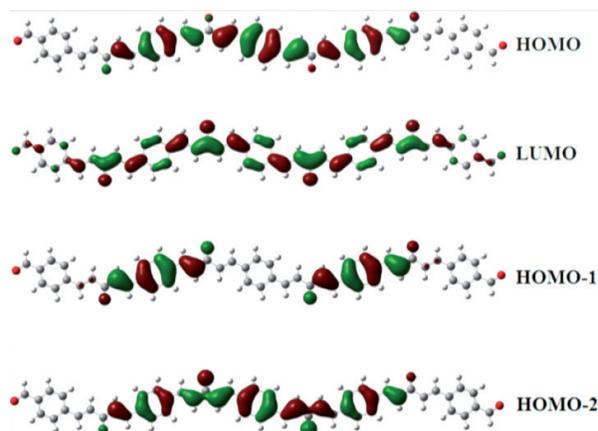


Fig. 6. Isosuperficies de orbitales moleculares de los oligómeros no sustituidos.

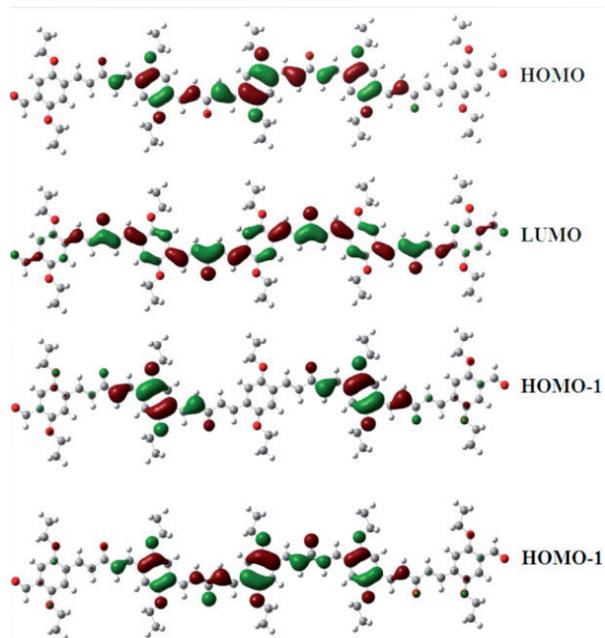


Fig. 7. Isosuperficies de orbitales moleculares de oligómeros sustituido con grupos etoxi.

En estas isosuperficies se puede observar que el HOMO no se encuentra totalmente deslocalizado a lo largo de toda la cadena principal, como ocurre para otros polímeros conjugados.¹⁰

Se aprecia una mejor definición del oxígeno de los carbonilos en el LUMO de los oligómeros que en el HOMO. Similarmente la definición del oxígeno como parte de los grupos etoxi en los PEOB es mejor en el LUMO de dichos oligómeros. Esto hace suponer un posible carácter electrón donador del grupo etoxi y del carbonilo como un grupo aceptor de electrones, para oligómeros tipo PEOB.

Estados excitados

A continuación se muestran en las tablas IV y V, las energías de excitación obtenidas mediante ZINDO y TDDFT, para el primer estado excitado y que corresponden a las frecuencias de los osciladores (ν_c) con valores no negativos. Posteriormente se hicieron las convoluciones de dichos valores usando funciones gaussianas, sus gráficas (espectros de absorción), se muestran en las figuras 8 y 9.

Los valores siguen una misma tendencia sin importar la restricción de simetría, por lo que esta aproximación resulta ser muy confiable.

Tabla IV. Excitaciones en oligómeros no sustituidos (POB). Z significa ZINDO y TDDFT.

N	Ex.	E ex (eV)		λ (nm)		ν_c	
		Z	T	Z	T	Z	T
2	B2	3.39	2.68	366	463	1.94	1.21
3	BU	3.17	2.45	391	507	2.77	2.03
4	B2	3.09	2.34	401	530	3.84	2.82
5	BU	3.05	2.28	407	543	4.93	3.71
6	B2	3.02	2.25	410	550	6.02	4.64

Tabla V. Excitaciones en oligómeros sustituidos (PEOB). Z significa ZINDO y TDDFT.

N	Ex.	E ex (eV)		λ (nm)		ν_c	
		Z	T	Z	T	Z	T
2	B2	3.72	3.36	333	369	1.43	0.63
3	BU	3.41	2.93	363	423	2.38	1.38
4	B2	3.31	2.78	374	446	3.39	2.09
5	BU	3.26	2.71	380	458	4.39	2.80
6	B2	3.23	2.67	383	465	5.38	3.54

Las longitudes de onda obtenidas por TDDFT son mayores que las obtenidas por ZINDO además de que estas últimas son más cercanas a las obtenidas experimentalmente.¹¹ Es conocido que TDDFT subestima el GAP, de ahí que se obtengan valores de energía más pequeños. Sin embargo, en otras moléculas conjugadas, como el PPV¹⁷ y transiciones de menores longitudes de onda, (observables experimentalmente), se han tenido mejores resultados usando TDDFT que ZINDO. Cabe mencionar que ZINDO sí está basado en el teorema de Koopman, por lo que sus valores son formalmente comparables con lo reportado experimentalmente.

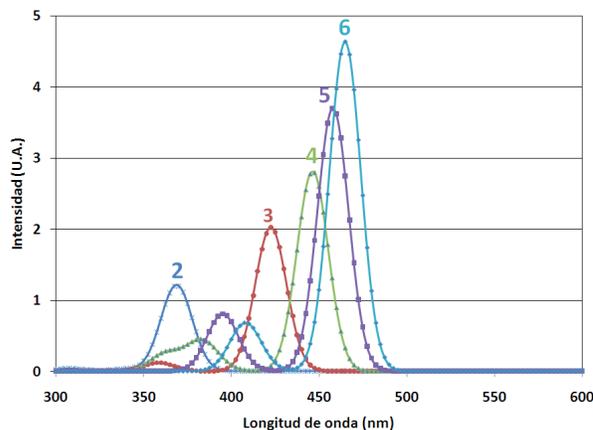


Fig. 8. Espectros de U.V.-Vis esperados para los oligómeros no sustituidos (POB). Se indica el valor de N.

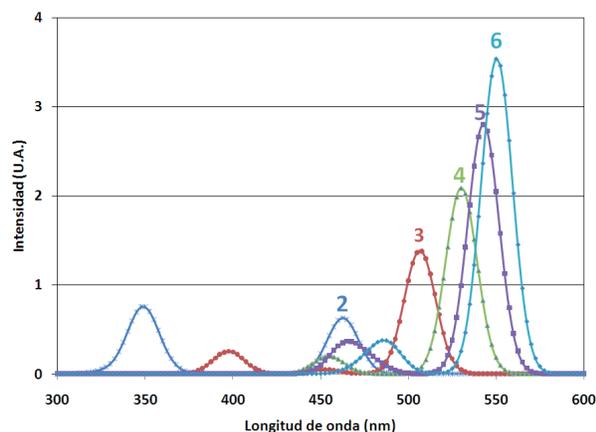


Fig. 9. Espectros de U.V.-Vis esperados para los oligómeros sustituidos (PEOB). Se indica el valor de N.

Las transiciones a menor longitud de onda disminuyen considerablemente de intensidad conforme aumenta el tamaño de los oligómeros, razón por la cual se hace innecesario calcular los estados excitados correspondientes a estas longitudes de onda, lo cual es conveniente ya que en moléculas grandes como los oligómeros reduce considerablemente el tiempo de cálculo y los recursos computacionales requeridos.

CONCLUSIONES

Los cálculos realizados en este estudio predicen un desplazamiento en la longitud de onda de absorción de la familia de oligómeros sustituidos con grupos etoxi, con respecto a la familia de oligómeros no sustituido, tal como ocurre experimentalmente.¹¹ No existe una deslocalización electrónica total a lo largo de la cadena principal, como en otros polímeros conjugados como el PPV.¹⁰ La aproximación hecha en este trabajo, predice las tendencias en el GAP y absorción electromagnética por transiciones optoelectrónicas, independientemente de las simetrías de las moléculas modeladas y de la aparente inconsistencia del formalismo de Koopman con los orbitales de Khon-Sham, por lo que es bastante útil, por confiable, para comparar sistemas conjugados de manera teórica. Los valores de excitación calculados por ZINDO son más cercanos a los valores reportados experimentalmente.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen las facilidades prestadas por el tiempo de cómputo de la UNAM al Dr. Donald H. Galván, así como también al Laboratorio de Diseño Molecular de la Facultad de Físico-Matemáticas de la UANL y al CONACyT por la beca de Doctorado.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Espinosa G. C. Síntesis de Poliariletinilenos. Preparación de Nano-películas. Estudio de sus propiedades morfológicas y ópticas. Tesis de Maestría. Universidad Autónoma de Coahuila, (2005).
2. Goetzberger A. Photovoltaic Materials, history, status and outlook. *Mat. Sci. and Eng. R Reports*, 40(1), 1-46, (2003).
3. Yesodha S. K, Sadashiva Pillai Ch. K, Tsussumi N, Stable Polymeric Materials for Nonlinear Optics: A Review Based on Azobenzene Systems. *Prog Polym Sci.* 29 45-74, (2004).
4. Zhou Q, Swager T M. Method for enhancing the sensitivity of fluorescent chemosensors: Energy Migration in Conjugated Polymers. *J. Am. Chem Soc.*, 117, 7017-7018, (1995).
5. Jen-Shiang K. Y, Wei-Chen Ch, Chin-Hui Y, Time Dependent Density Functional Study of Electroluminescent Polymers. *J. Phys. Chem. A*, 107, 4268-4275, (2003).
6. de Sousa R. L., ab initio Calculation of the Dynamical Properties of PPP and PPV. *Brazilian Journal of Physics*, 36 501-504, (2005).
7. James P. V, Sudeep P.K, Suresh C. H, Thomas G, Photophysical and Theoretical Investigations of oligo(p-phenyleneethynylene)s: Effect of Alkoxy Substitution and Alkyne-Aryl Bond Rotations, *J. Phys. Chem. A*, 110, 4329-4337, (2006).
8. a) Hohenberg P, Kohn W, Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev. B*, 136, 864-871, (1964).
b) Kohn W, Sham L. J, Self Consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev. A*, 140, 1133-1138, (1965).

9. Tao J, Vignale G, Tokatly I. V, Time-Dependent Density Functional theory: Derivation of Gradient-Corrected Dynamical Exchange - Correlational Potentials, *Phys. Rev. B* 76(19), 195126 (13 Pags.), (2007).
10. Sun M, Kjellberg P, Beenken W. J. D, Tonu P, Comparison of the Electronic Structure of PPV and its Derivative DIOXA-PPV. *Chemical Physics*, 327, 474-448, (2006).
11. González V, Cabriaes R, Moggio I, Arias E, β -Aldol Condensation as a New Synthetic Approach for the Preparation of Luminescent Oligomers, *Polym. Bull.* V58(4), 627-634, (2007).
12. Frisch M.J., *et al.* Gaussian 03 rev C.02, Gaussian Inc. Wallingford CT, (2004).
13. Yang L. W, Parr R. G. Development of the colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Phys. Rev. B* 37, 785-789, (1998).
14. Hutchison G. R, Ahao Y-J, Delley B, Freeman A. J, Ratner M. A, Marks T. J, Electronic structure of conducting polymers: Limitations of oligomer extrapolation approximations and effects of heteroatoms, *Physical Review B*, 68, 035204 (13 Pags.), (2003).
15. Koopmans T. Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den Einzelnen Elektronen Eines Atoms. *Physica*, 1 (1-6): 104-113, (1934).
16. Hutchison G. R., Ratner M. A, Marks T. J, Hopping Transport in Conductive Heterocyclic Oligomers: Reorganization Energies and Substituent Effects. *J. Am. Chem. Soc.* 127, 2339-2350, (2005).
17. Zhan C-G, Nichols J. A, Dixon D. A, Ionization potential, Electron affinity, Electronegativity, Hardness and electron excitation energy: Molecular properties from Density Functional Theory Orbital Energies. *J. Phys. Chem. A*, 107, 4184-4195, (2003).
18. O'Boyle N. M., *et al.* 2005. Gausssum 0.9, Dublin City University, <http://gausssum.sourceforge.net>, (2005).
19. Arias E. Moggio I, Navarro D, Romero J, Le Moigne J, Guillon D, Maillou T, Gonzalez V, Geffroy B, Elaboración y Estudio de Nanopelículas de Oligómeros y Polímeros Conjugados. Construcción de Diodos Electroluminiscentes, *Rev. Soc. Quím. Mex.* V41, 23-31, (2002).
20. Jen-Shiang K, Wei-Chen Ch. Chin-Hui T, Time Dependent Density Functional study of Electroluminiscent Polymers *J. Phys. Chem. A.*, 107, 4268-4275, (2003).

Anúnciese en:

Ingenierías



INFORMES:
Tel: (52) (81) 83294020 Ext. 5854
Fax: (52) (81) 83320904
E-mail: revistaingenierias@gmail.mx
Internet: <http://ingenierias.uanl.mx>