

XV Escuela Nacional de Materiales Moleculares
Gandía, del 2 al 6 de febrero de 2014

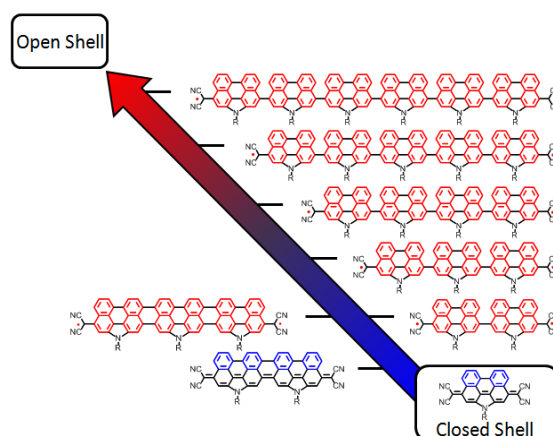
Bases espectroscópicas de la relación estructura-carácter birradical-propiedad en sistemas pro-aromáticos π -conjugados derivados de p-QDM

José L. Zafra,¹ Juan T. López Navarrete,¹ Jishan Wu,² Juan Casado,^{1*}

¹Departamento de Química Física, Universidad de Málaga, 29071, Málaga, Spain, (zafra@uma.es),

²Department of Chemistry, National University of Singapore, 117543, Singapore.

El interés en la obtención de moléculas capaces de presentar configuraciones electrónicas capa abierta en el estado fundamental se ha visto recientemente potenciado gracias a que sus interesantes propiedades ópticas, electrónicas y magnéticas las convierten en excelentes candidatas para aplicaciones en ONL, electrónica orgánica o espintrónica [1]. Concretamente, uno de los focos de mayor atención en este contexto es la síntesis de sistemas π -conjugados con carácter



birradical y bajo bandgap dentro de los cuales la unidad p-quinodimetano (p-QDM) constituye uno de los más comunes *building blocks*. Numerosas han sido las estrategias utilizadas para sintetizar derivados de p-QDM estables en su configuración de capa abierta, como demuestran las relativamente recientes síntesis de derivados zentrenénicos o de Indenofluorenos, a partir de la inclusión de la unidad p-QDM en un entorno fusionado π -conjugado [2]. Sin embargo, obtener derivados de p-QDM de una cierta extensión es todavía un reto debido al aumento de la reactividad con la longitud de la cadena, además de a problemas de solubilidad propios de sistemas de gran tamaño [3]. Todo esto hace que la necesidad de entender la conexión estructura-carácter birradical y sus implicaciones en las propiedades físicas aflore, necesariamente, a la hora de proponer alternativas sintéticas en la búsqueda de este tipo de sistemas.

En esta comunicación se presenta el estudio, fundamentado en la espectroscopia Raman, espectroscopias electrónicas y cálculos químico-cuánticos DFT, de la estructura molecular y electrónica de una serie de tetraciano oligo(N-perileno) quinodimetanos en función de la longitud de cadena *nPer-CN* ($n=1-6$) y, además, el estudio del efecto que la libertad de giro entre unidades de perileno puede llegar a tener sobre el estado fundamental, para lo cual se recurre a los correspondientes análogos fusionados *QR-CN* y *HR-CN*.

[1] a) Z. Sun, J. Wu. *J. Mater. Chem.* **2012**, *22*, 4151; b) Z. Sun, Q. Ye, C. Chi; J. Wu. *J. Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 7857.

[2] Z. Zeng, S. Lee, J. L. Zafra, M. Ishida, X. Zhu, Z. Sun, Y. Ni, R. D. Webster, R-W. Li, J. T. López Navarrete, C. Chi, J. Ding, J. Casado, D. Kim, J. Wu. *Ang. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 8561-8565.

[3] Z. Zeng, M. Ishida, J. L. Zafra, X. Zhu, Y. M. Sung, N. Bao, R. D. Webster, B. S. Lee, R-W. Li, W. Zeng, Y. Li, C. Chi, J. T. López Navarrete, J. Ding, J. Casado, D. Kim, J. Wu. *J. am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 6363-6371.

