



Ola



Director de tesis:  
Co-Director de tesis:

Dr. Gabriel Ramos Ortiz  
Dr. Ramón Carriles Jaimes

Sinodales:

Dr. José Norberto Farfán García  
(Evaluador externo - UNAM, Secretario)

Dr. Eduardo de Jesús Coutiño González  
(Sinodal Interno, Vocal)

Dr. Gabriel Ramos Ortiz  
(Director de Tesis, Presidente del Jurado)

Tesis:

**"ESTRATEGIAS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE PROPIEDADES ÓPTICAS EN TRES FAMILIAS DE MOLÉCULAS  $\pi$ -CONJUGADAS Y SU CARACTERIZACIÓN ESPECTROSCÓPICA"**

Resumen:

El estudio de materiales orgánicos  $\pi$ -conjugados es un área de investigación muy activa en la actualidad. La comprensión de las estructuras moleculares  $\pi$ -conjugadas y como éstas determinan sus propiedades ópticas permite diseñar moléculas para aplicaciones en fotónica y optoelectrónica. Las propiedades de nuestro interés abarcan la respuesta óptica en regímenes lineal y no lineal.

Se estudió la relación estructura (química)-propiedad(óptica) de 17 moléculas divididas en familias: complejos de rutenio, polímeros homoconjugados y macrociclos de carbo-benceno. Las propiedades ópticas se optimizaron por medio de esqueletos  $\pi$ -conjugados funcionalizados con grupos electro-donadores (D) y electro-aceptores (A). El estudio de cada familia implicó diferentes técnicas experimentales: espectroscopia en el estado estacionario que incluyó absorción UV-vis, Z-scan, fotoluminiscencia por uno y dos fotones, y espectroscopia ultrarrápida de absorción resuelta en tiempo (absorción transiente) usando supercontinuo como pulso de prueba.

Para complejos de rutenio se buscaba la liberación de óxido nítrico (NO) por excitación de dos fotones (TPA). En estas moléculas se logró incrementar la sección transversal de TPA ( $\sigma_{TPA}$ ) desde 87 GM hasta 923 GM mediante diferentes grupos D-A; contribuyendo como guía en el diseño de nuevos complejos para fototerapia por NO.

En polímeros homoconjugados se demostró que es posible la transferencia de energía resonante tipo Förster entre dos bloques del polímero inducida por la cercanía espacial entre ellos. Esta propiedad y el método sencillo de síntesis involucrado potencializan sus aplicaciones.

Finalmente, en macrociclos tipo carbo-benceno se determinó un aumento en la respuesta no linealidad con el incremento de 18 electrones  $\pi$  comparado con la respuesta de una molécula parental basada en un ciclo de benceno con 6 electrones  $\pi$ ; además se demostró que el macrociclo da lugar a emisión desde niveles S2 que viola la regla de Kasha y se reporta por primera vez la dinámica detallada de los estados excitados de los carbo-bencenos.