

**Título:** Simulación de procesos fotofísicos en cicloparafenilenos, bases del andamiaje de nanotubos de carbono.

**Tipo:** PIP 2015.

**Fecha de inicio:** 27/01/2017

**Finalización:** En curso.

**Director:** Fernández Alberti, Sebastián.

**Integrantes:** Alfonso Hernández, Laura; Franklin Mergarejo, Ricardo; Oldani, Andrés Nicolás y Ondarse Álvarez, Dianelys.

### **Resumen**

El objetivo del proyecto es la simulación computacional de procesos de fotoexcitación y subsecuente relajación y redistribución de la energía electrónica y vibracional en cicloparafenilenos ([n]CPP), compuestos por n unidades fenileno conectadas formando un sistema de anillos conjugados. Estos sistemas moleculares presentan propiedades electrónicas únicas debido a la competencia de varios grados de libertad (esto es, electrónicos y vibracionales) frecuentemente controlados por mecanismos de confinamiento cuántico. El espectro de aplicación de estos materiales se extiende a tecnologías fotovoltaicas, fotoelectrónicas y emisión de luz. Una de las aplicaciones más interesantes de estas moléculas cíclicas es su utilización como unidades para la construcción de nanotubos de carbono. El proyecto propone abarcar el estudio de [n]CPPs compuestos por un número variable de fenilenos formando nano-lazos. Abordaremos el efecto de combinar diferentes bloques de construcción extendiéndonos a la consideración de [n]CPPs como monómeros para la formación de dímeros y la incorporación de distinto tipo de ramificaciones. Nos proponemos analizar las contribuciones efectivas de canales de transferencia de energía intra- e inter-lazos de [n]CPPs. Esperamos que el estudio de estas características contribuya significativamente al planteamiento de nuevas estrategias de construcción de nano-lazos y nanotubos de paredes simples con características deseables de relajación y transferencia de energía con fines tecnológicos. Los nano-lazos de [n]CPPs presentan variaciones estructurales, relacionadas con tensiones, interacciones estéricas, simetría y conjugación aromática, cuyo impacto en la variación temporal de las propiedades ópticas de sus distintos estados electrónicos excitados aún no ha podido ser adecuadamente estudiado. La fotodinámica en estos sistemas moleculares involucra múltiples estados acoplados que participan de una variedad de procesos tales como conversión interna, transferencia de energía, separación de cargas y localización espacial de excitones. Por este motivo, la correcta simulación de estos procesos implica la consideración de efectos cuánticos tales como el acoplamiento entre estados electrónicos excitados, coherencias y la existencia de intersecciones cónicas, entre otros. En el presente proyecto nos proponemos utilizar métodos de simulaciones de dinámica molecular no-adiabática en estados excitados (NA-ESMD) desarrollados por el grupo de trabajo.

**Unidad Académica:** Departamento de Ciencia y Tecnología.