

Estudios computacionales de poli(hidroxiuretanos) no conjugados con propiedades fotoluminescentes

Armando Edgar Castillo García¹, Melisa Trejo¹, Tania E. Lara-Ceniceros¹, Luis Ernesto Elizalde², Mario Sánchez-Vázquez¹, José Bonilla-Cruz¹

¹CIMAV, SC-Subsede Monterrey, Nano & Micro Additive Manufacturing of Polymers and Composite Materials Laboratory "3D LAB", Mexico. ²CIMAV, SC-Subsede Monterrey, Department of Macromolecular Chemistry and Nanomaterials, Mexico.

En este trabajo se presenta un estudio computacional de poli(hidroxiuretanos) (PHUs) mediante métodos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) usando el método b3lyp/6-31g(d,p) usando software Gaussian. El objetivo principal fue analizar las propiedades electrónicas y ópticas de diferentes estructuras modeladas de PHU para comprender los mecanismos responsables de su emisión fluorescente no convencional. Se realizaron optimizaciones geométricas y cálculos espectroscópicos (TD-DFT) para determinar estados excitados, transiciones electrónicas y bandas prohibidas. Los resultados revelan que las interacciones intramoleculares y la conformación del polímero juegan un papel clave en la generación de la fluorescencia observada experimentalmente. Este enfoque teórico permite correlacionar la estructura molecular-peso molecular con el comportamiento óptico, proporcionando una herramienta valiosa para el diseño de nuevos PHUs con propiedades fotofísicas ajustables para aplicaciones en sensores ópticos, dispositivos optoelectrónicos y materiales inteligentes.

Keywords: polihidroxiuretanos, modelado, monómeros.

Presenting author's email: armando.castillo@cimav.edu.mx