

Microchips moleculares: Explorando la transferencia de carga en ftalocianinas metálicas mediante simulación de espectros de XAS

Tania Esmeralda González-Robles¹, Mariela Bravo-Sanchez², Mario Ulises Delgado Jaime³

¹Universidad de Guadalajara, Ingenierías-CUCSUR, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Física-CUCEI, Mexico. ³

Universidad de Guadalajara, Química-CUCEI, Mexico.

Las ftalocianinas metálicas (Pc) son moléculas conocidas por su gran estabilidad y por su capacidad de alojar un ion metálico en el centro de su estructura. Esta particularidad les otorga propiedades electrónicas y ópticas interesantes, lo que ha motivado su estudio en contextos tan diversos como la catálisis, la electrónica molecular o la biomedicina (Clarke & Dini, 2017; de la Torre et al., 2021).

A pesar de sus múltiples aplicaciones, aún no se comprende completamente cómo el tipo de ion metálico central y las modificaciones químicas alrededor del macrociclo modulan los procesos de transferencia de carga y como se manifiestan en los espectros de absorción de rayos X. Mediante simulaciones de multiplete de espectros de absorción de rayos X (XAS), en este trabajo se busca identificar correlaciones cuantitativas entre la estructura electrónica local, como lo es la covalencia orbital y los espectros simulados. Esto permitirá predecir y optimizar el comportamiento de las Pc en entornos funcionales, facilitando el diseño de materiales con propiedades electrónicas ajustables (Cotton et al., 1999)

Keywords: Transferencia de carga, Simulación de multiplete, Propiedades electrónicas

Presenting author's email: tania.gonzalez0155@alumnos.udg.mx