

**SINTESIS DE NUEVOS MATERIALES MOLECULARES DE TIPO DADORACEPTOR, BASADOS EN CROMOFOROS DE 2-AMINOPIRIMIDINA Y TRIADAS ELECTROACTIVAS CON CABLES MOLECULARES DE VINILFLUORENO**

**Resumen.**

La transferencia electrónica, es uno de los procesos químicos más simples, afecta profundamente a la reactividad química invirtiendo las densidades electrónicas en pares dador-aceptor, activando de esta forma modos de reacción previamente inaccesibles. Recientemente se ha desarrollado un gran interés por los sistemas fotosintéticos artificiales y sus usos potenciales en optoelectrónica, fotónica, diseño de sensores y, muy especialmente, en la conversión de energía solar en energía eléctrica. Por todo ello, el campo de la química de transferencia electrónica ha experimentado una extraordinaria expansión. Por tanto, en este trabajo de investigación se desarrollaron una serie de moléculas con una posible aplicación en el campo de la nanoelectrónica, para lo cual, se han diseñado, sintetizado y caracterizado de manera estructural, electroquímica y fotoquímica fragmentos electrodadores basados en 2-aminopirimidinas, el cual se describe por primera vez en la literatura, la presencia de grupos dador y aceptor en conjugación a través del anillo de la pirimidina, dio origen a una compleja estructura electrónica y geométrica, en la cual, el efecto PUSH-PULL y el comportamiento aromático de la pirimidina están en competencia. Luego se describen tríadas electroactivas elaboradas con porfirinas y tetratíafulvalenos  $\pi$ -extendidos como unidades dadoras, fullereno C<sub>60</sub> como unidad aceptora enlazados covalentemente por un espaciador de tipo *oligo*-vinilfluorenos con el propósito de elaborar sistemas de tipo dador-aceptor separados por un cable molecular para su posible aplicación en celdas fotovoltaicas, gracias a su capacidad de generar especies con separación de carga inducidas por fotoexcitación, este hecho fue evidenciado utilizando varias técnicas experimentales como lo son: estudios fotoquímicos, electroquímicos y mecanocuánticos.

### **Summary**

Electron transfer, is a simple chemistry process, have an affect deepen on chemistry reactivity reverse the electronic density in donor-acceptor pairs, this means activating reacting modes later inaccessible. Recently, have been development a great interest for mimic photosynthetic synthesis and yours potentials use in optoelectronic, photonic, sense design and specially solar energy to electrical energy conversion. For this reasons, the electron transfer chemistry have experienced a unusual expansion. In this investigation work was obtained a molecular series with feasible nanotechnological applications, which, was designed, synthesize and characterized by means structural, electrochemistry and photochemistry studies. In the First section of this work were realized 2-aminopyrimidine based electrodonor fragments, which, is first time literature described, donor-acceptor groups presence in conjugation through the pyrimidine ring, run into a complex electronic structure and geometric, which, PUSH-PULL effect and aromatic behaviour of the pyrimidine are in competition. Then were describe electroactive triads make with electrodonor units as porphyrins and  $\pi$ -extended tetratriafulvalenos; fragment electroacceptor as fullerene C<sub>60</sub>, covalently linked by a oligo-vinylfluorene as molecular wire, with the porpoise to elaborate donor-acceptor systems for a possible application in photovoltaic cells, thanks to generate charge separated species by means photoexcitation, this fact was proved by means experimental techniques like: photochemistry, electrochemistry and quantum chemistry studies.