



CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Artículo original de investigación

Propiedades fotofísicas de sistemas moleculares conjugados con aplicaciones potenciales en la optoelectrónica

Llinersy Uranga Piña ^{1*} <https://orcid.org/0000-0001-5837-7204>

Aliezer Martínez Mesa ¹ <https://orcid.org/0000-0002-0443-6106>

Beatriz Rodríguez Hernández ^{1,2} <https://orcid.org/0009-0007-8023-0840>

Sebastián Fernández Alberti ² <https://orcid.org/0000-0002-0916-5069>

¹ Universidad de la Habana. La Habana, Cuba

² Universidad Nacional de Quilmes. Bernal, Argentina

* Autor para la correspondencia: llinersy@fisica.uh.cu

Editor

Lisset González Navarro
Academia de Ciencias de Cuba.
La Habana, Cuba

Traductor

Darwin A. Arduengo García
Academia de Ciencias de Cuba.
La Habana, Cuba

RESUMEN

Introducción: Se investigaron las propiedades ópticas, los mecanismos de transporte de energía y de localización de los excitones en polímeros conjugados, así como la adsorción y difusión de átomos y de moléculas ligeras en estas estructuras. **Objetivos:** Caracterizar los cambios graduales en las propiedades de absorción y emisión de cicloparafenilenos y nanojaulas de carbono, a medida que se relajan las tensiones mecánicas dentro del nanoanillo y el confinamiento cuántico de los electrones debido al incremento de la curvatura. Evaluar los cambios de las propiedades estructurales, dinámicas y ópticas, provocados por la sustitución de la unidad fundamental que constituye el nanoanillo, reemplazando las unidades de fenileno por unidades de naftaleno. **Métodos:** Se llevaron a cabo simulaciones *ab initio* de la dinámica fotoinducida en moléculas conjugadas (por ejemplo, nanojaulas y nanoanillos de carbono), empleando la técnica de dinámica molecular con transiciones cuánticas. La estructura electrónica se representa mediante el modelo de oscilaciones electrónicas colectivas. Las ecuaciones de movimiento resultantes fueron integradas numéricamente utilizando algoritmos implementados en el **software** Non-adiabatic Excited-state Molecular Dynamics. **Resultados:** Los resultados de las simulaciones reproducen las tendencias observadas experimentalmente para las propiedades ópticas de los sistemas estudiados. Adicionalmente permitieron comprender la relación entre el tamaño, la geometría y la composición química de estos sistemas y los mecanismos de redistribución de energía y de localización de los excitones, proporcionando de esta forma una interpretación microscópica de las propiedades optoelectrónicas observadas. **Conclusiones:** Los desarrollos metodológicos realizados permitieron estudiar la dinámica fotoinducida en sistemas moleculares conjugados que, por su alto costo computacional, resultaba difícil abordar empleando las herramientas computacionales disponibles hasta el momento, contribuyendo así a reducir la separación entre las dimensiones de las moléculas que es posible simular atomísticamente y las moléculas relevantes experimentalmente.

Palabras clave: dinámica molecular *ab initio*; dinámica molecular no adiabática; materiales orgánicos conjugados; localización de excitones; propiedades optoelectrónicas



Photophysical properties of conjugated molecular systems of interest in optoelectronic applications

ABSTRACT

Introduction: They were investigated the optical properties, energy transport and exciton localization mechanisms in conjugated polymers, as well as the adsorption and diffusion of atoms and light molecules in these nanostructures. **Objectives:** To characterize the gradual changes in the absorption and emission properties of cycloparaphenylenes and carbon nano cages as the mechanical stresses within the nano-ring and the quantum confinement of electrons relax due to increased curvature. To evaluate the changes in structural, dynamic and optical properties caused by the substitution of the fundamental unit that constitutes the nano ring by replacing phenylene units with naphthalene units. **Methods:** They were carried out *ab initio* simulations of the photoinduced dynamics in conjugated molecules (e.g. carbon nano cages and nano rings) using the technique known as molecular dynamics with quantum transitions. The electronic structure is represented by the collective electron oscillator model. The resulting equations of motion were numerically integrated using algorithms implemented in the Non-adiabatic Excited-state Molecular Dynamics software. **Results:** The results of the simulations reproduce the experimentally observed trends for the optical properties of the studied systems. Additionally, they provided insight into the relationship between the size, geometry and chemical composition of these systems and the mechanisms of energy redistribution and exciton localization, thus providing a microscopic interpretation of the observed optoelectronic properties. **Conclusions:** The methodological developments undertaken made it possible to study photoinduced dynamics in conjugated molecular systems which, due to their high computational cost, were difficult to address using other computational tools available nowadays, thus contributing to reduce the gap between the size of the molecules that can be simulated atomistically and the experimentally relevant molecules.

Keywords: *ab initio* molecular dynamics; non-adiabatic molecular dynamics; organic conjugated materials; exciton localization; optoelectronic properties

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, el estudio de procesos fotofísicos en polímeros conjugados constituye un tema de gran interés tanto desde el punto de vista fundamental (la dinámica fotoinducida en estos sistemas involucra un gran número de transiciones no adiabáticas entre múltiples estados electrónicos acoplados) como práctico (continuamente se sintetizan nuevas moléculas cuyas propiedades ópticas propician su uso potencial en una amplia variedad de distintos dispositivos optoelectrónicos).⁽¹⁾ En particular, los avances en las investigaciones experimentales y las simulaciones computacionales de estos sistemas moleculares han permitido establecer relaciones estructura-dinámica-propiedad, que a su vez favorecen la identificación de las características físico-químicas que determinan las propiedades optoelectrónicas deseadas y, por lo tanto, permiten optimizar su rendimiento en aplicaciones específicas.⁽²⁾

Entre los materiales que despiertan mayor interés se encuentran los polímeros orgánicos π -conjugados.⁽¹⁾ Un siste-

ma π -conjugado extendido se forma como consecuencia de la superposición de orbitales p , ocupados por electrones desapareados de los átomos pertenecientes a una cadena polimérica. El solapamiento de los orbitales provoca la de localización de los electrones a lo largo de la estructura polimérica.

Los materiales orgánicos π -conjugados presentan una gran variedad de topologías. En particular, en los últimos años, la síntesis de sistemas moleculares conjugados cíclicos que incluyen variedades de nanoanillos de carbono del tipo de los cicloparafenylenos (CPP, por sus siglas en inglés) ha permitido ajustar convenientemente sus propiedades estructurales y ópticas de esta familia de materiales para optimizar aplicaciones específicas (por ejemplo, emisores de estado sólido y en solución, encapsulamiento de moléculas, transistores orgánicos de efecto de campo y los fluoróforos biológicos, entre otros).^(2,3,4)

La conjugación cíclica y curvada en nanoanillos y estructuras similares permite obtener características únicas, que

pueden controlarse introduciendo cambios en el número y la composición química de sus unidades cromóforas, añadiendo grupos funcionales o acoplándolas con otras moléculas (como los fullerenos), lo que dota a estos materiales de gran versatilidad para sus aplicaciones en optoelectrónica. ⁽⁵⁾ Para optimizar dichas propiedades resulta necesario establecer una conexión entre las variaciones estructurales del sistema molecular y su impacto en el proceso de transferencia de energía excitónica. Sin embargo, la descripción rigurosa de la fotoexcitación y de la redistribución posterior del exceso de energía electrónica y vibracional en sistemas moleculares poliatómicos constituye un reto considerable para la física y la química computacionales contemporáneas. Esto se debe por un lado, a la necesidad de tener en cuenta múltiples procesos (conversión interna, transferencia de energía intramolecular, separación de cargas, localización espacial de los excitones, entre otros) que involucran múltiples estados electrónicos acoplados. Por otra parte, es necesario mejorar continuamente la eficiencia y la precisión numérica de las herramientas computacionales disponibles, con vistas a reducir el costo computacional de la simulación de sistemas moleculares de tamaño intermedio (compuestos por algunas centenas de átomos), que en muchos casos resulta prohibitivo. ⁽⁶⁾

En este contexto los métodos híbridos clásico-cuánticos son de los métodos de simulación más ampliamente utilizados. ^(7,8) Este tipo de metodologías se basa en 2 componentes básicos: el cálculo de propiedades de estructura electrónica, que permita la descripción adecuada de las superficies de energía potencial desde el punto de vista topológico y energético, y algoritmos de dinámica molecular, que tengan en cuenta los fenómenos no adiabáticos y la propagación de trayectorias clásicas.

En este trabajo se estudian las propiedades estructurales, dinámicas y ópticas de 3 tipos de nanoanillos de carbono y en modelos de dendrímeros. ^(3,9,10,11,12) En estos sistemas, a diferencia de los sistemas moleculares conjugados lineales, la existencia de la conjugación cíclica provoca variaciones en la extensión de la deslocalización electrónica, las tensiones estructurales, los tiempos de relajación electrónica, la eficiencia del solapamiento de las nubes electrónicas, etc. Nuestro objetivo fue caracterizar la dependencia de las propiedades ópticas de los nanoanillos con respecto al tamaño de las cadenas, por ejemplo: los cambios en los espectros de absorción y emisión como consecuencia de la linealización gradual de la conjugación, los efectos de sustituir la unidad fundamental que constituye el nanoanillo.

MÉTODOS

Se realizó un estudio cuantitativo de la dinámica fotoinducida en sistemas moleculares conjugados, a través de simu-

laciones computacionales empleando el *software* NEXMD. ⁽⁶⁾ Las simulaciones se realizaron en las sedes y empleando los recursos informáticos de los grupos de investigación de física molecular y físico-química de la Universidad de la Habana y de la Universidad Nacional de Quilmes, en el período 2018-2022.

El código NEXMD pertenece a la familia de métodos mixtos cuántico-clásicos, donde el movimiento nuclear se describe clásicamente, mientras que los grados de libertad electrónicos se describen cuánticamente. El código combina el algoritmo de dinámica molecular con transiciones cuánticas conocido como del número mínimo de saltos, con cálculos de estructura electrónica sobre la marcha de los gradientes de energía de los estados excitados y los acoplamientos no adiabáticos. Los cálculos de estructura electrónica se basan en la aproximación de osciladores electrónicos colectivos (CEO, por sus siglas en inglés), el esquema de interacción de configuraciones con excitaciones simples y el modelo semiempírico austin model 1 (AM1) para representar el Hamiltoniano electrónico. Dentro del formalismo CEO, los gradientes de energía y los acoplamientos no adiabáticos son evaluados analíticamente.

Condiciones iniciales

Partiendo de una estructura molecular (optimizada sobre la superficie de energía potencial correspondiente al estado básico electrónico) se integran las ecuaciones de movimiento de Langevin empleando el algoritmo de Verlet de velocidades. En las ecuaciones de Langevin, el coeficiente de fricción se escoge igual a 2.0 ps⁻¹, que es un valor típico de esta magnitud para solventes apolares. Su valor específico sólo afecta el tiempo que tarda el sistema en alcanzar el equilibrio termodinámico.

Luego de alcanzar el equilibrio termodinámico, se selecciona un conjunto suficientemente grande de estructuras representativas del espacio conformacional accesible a la molécula a la temperatura deseada. Para escoger el tamaño del ensemble seleccionado, se monitorea la convergencia de las distribuciones de algunas propiedades físicas de la molécula, por ejemplo, ángulos diedros, distancias intermoleculares, radio de giro, con el aumento del número de trayectorias, además de la correspondencia entre los valores medios de estas magnitudes y los valores experimentales reportados.

Espectros de absorción

El cálculo numérico de los espectros de absorción se basa en la suposición de que éstos pueden aproximarse mediante una superposición de funciones gaussianas centradas en las energías de cada estado electrónico excitado. El área bajo cada gaussiana se toma igual a la fuerza de oscilador correspondiente a la transición desde el estado básico hacia cada uno de los estados excitados. Para todas las gaussias

nas, la desviación estándar se escoge igual a 0,015 eV. Para determinar este valor se llevaron a cabo experimentos numéricos, donde se compararon los espectros calculados empleando diferentes anchos de las gaussianas y los resultados experimentales. Se comprobó que el valor de 0,015 eV permitía optimizar la correspondencia entre los resultados teóricos y experimentales sobre un conjunto grande de moléculas. ⁽²⁾ La envolvente de los espectros de absorción evaluados numéricamente se construye superponiendo las contribuciones obtenidas para cada una de las configuraciones iniciales del ensemble de trayectorias.

Dinámica molecular en estados excitados

Cada una de las configuraciones iniciales, se propaga de forma independiente en el estado electrónico excitado primariamente. En cada iteración temporal se propagan los coeficientes del desarrollo de la función de onda electrónica, al mismo tiempo se calculan las energías, gradientes, acoplamientos y matrices de densidad de transición electrónicas. También se determina la probabilidad de transición desde la superficie en la que se están moviendo los núcleos ("estado actual") hacia los demás estados excitados. Tras producirse un salto, las velocidades se reajustan en la dirección del vector de acoplamiento no adiabático para garantizar el cumplimiento del principio de conservación de la energía. Si la energía cinética disponible no es suficiente para realizar este ajuste, se dice que el salto es prohibido.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el presente trabajo se explora la transición de un oligómero lineal a uno circular mediante el seguimiento de los cambios graduales de las propiedades ópticas, estructurales y dinámicas en una serie de alquil-p-heptafenilenos atados por una cadena alquílica (m-alquil-[7]PPs), modificando la longitud de la cadena alquílica desde 1 hasta 19 átomos de carbono.

Se comprobó que el aumento gradual de los ángulos de torsión entre las unidades de fenileno conduce a desplazamientos sistemáticos de las energías de los primeros estados excitados (S1, S2, S3) hacia la región azul del espectro. Como consecuencia, al aumentar el índice m, el espectro de absorción de la cadena m-alquil-[7]PPs evoluciona desde el espectro del sistema circular [7]CPP hasta el de su límite lineal [7]LPP. En la figura 1 se muestra la evolución de la separación energética entre los 2 primeros estados excitados, en función de la longitud de la cadena alquílica.

Las reglas de selección óptica también cambian considerablemente con el aumento de la longitud de la cadena. Por razones de simetría, el estado S1 (inicialmente prohibido) se

convierte en ópticamente permitido al aumentar la longitud del enlace alquílico. La tendencia es opuesta para el estado S3, que experimenta conversión de permitido a prohibido. Por lo tanto, los fenilenos con ligadura de alquilo-p-fenilenos constituyen un ejemplo relativamente simple de molécula conjugada cuyas propiedades ópticas pueden ajustarse, cubriendo de forma continua la separación entre las propiedades de las estructuras cíclica y lineal correspondientes.

Se observa una disminución de las tasas de relajación de la energía electrónica con el aumento de la tensión de flexión en el sistema conjugado. Las relajaciones electrónicas más lentas y más rápidas corresponden a las estructuras cíclica ([7]CPP) y lineal ([7]LPP), respectivamente, mientras que los tiempos de relajación de las cadenas [m]-alquil-[7]PP se sitúan entre estos límites.

Se demostró que la transición electrónica no adiabática $S2 \rightarrow S1$ en los sistemas [m]-alquil-[7]PPs conduce a la excitación eficiente de un movimiento, en el que 2 mitades del segmento conjugado se mueven en oposición de fase. Este movimiento promueve, a su vez, la evolución periódica de la función de onda excitónica en el estado inferior. Este comportamiento evidencia la estrecha relación entre la localización dinámica excitónica y los patrones de localización que acompañan a la transferencia de energía electrónica en vibraciones durante los procesos de conversión interna.

El estudio comparativo de los procesos de redistribución de energía electrónica y vibracional, que se desencadenan luego de la fotoexcitación de nanoanillos compuestos por 9 unidades de fenileno ([9]CPP) y 9 unidades de naftaleno ([9]CN), revela que los impedimentos estéricos que sufren las unidades de naftaleno conducen a: a) ángulos diedros entre vecinos que son como promedio más grandes que entre fenilenos consecutivos y b) una planarización estructural menos eficiente en los estados excitados. Estas características influyen sobre el mecanismo de autoconfinamiento del excitón durante el proceso de conversión interna. En general, el excitón en el sistema [9]CPP está más localizado comparado con el [9]CN.

Tras la fotoexcitación, la relajación y la redistribución de la energía electrónica tienen lugar a través de conjuntos específicos de modos normales activos fuertemente acoplados a los grados de libertad electrónicos. Tanto para la molécula de [9]CN como para la de [9]CPP, estos modos normales activos corresponden a vibraciones en el plano de las unidades cromóforas, dentro de rangos similares de frecuencias medias y altas. Estas características comunes de las vibraciones asociadas al proceso de transferencia de energía electrónica son responsables de la similitud entre los procesos de conversión interna observados en ambos sistemas.

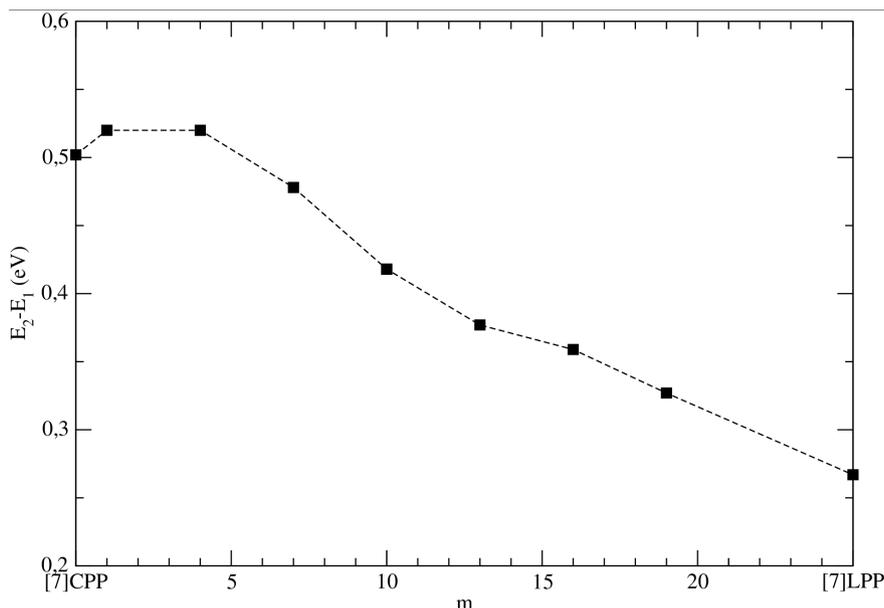


Fig. 1. Dependencia de la separación energética entre los estados S2 y S1 para los m-alquil-[7]PPs, en función de la longitud de la cadena alquílica

Por otra parte, se comprobó que los procesos de relajación no radiativa son similares en nanojaulas de carbono [n,n], formadas por polifenilenos de diferente tamaño ($n = 4, 5, 6$), tornándose ligeramente más rápidos con el aumento del tamaño de la jaula. Las simulaciones que se presentan reproducen las tendencias espectrales observadas experimentalmente y permiten explicar tanto el desplazamiento hacia el rojo de la banda de absorción, como el corrimiento hacia el azul de la banda de emisión, al aumentar el tamaño de la jaula.

Los estados desde los que ocurre preferentemente la absorción y la emisión se diferencian por la localización espacial de las funciones de onda electrónicas y las propiedades electrónicas correspondientes. El desplazamiento al rojo en la absorción está relacionado con la contribución dominante de los anillos de benceno situados en la intersección entre los puentes, donde el confinamiento de los electrones es mayor.

El desplazamiento hacia el azul de la emisión se asocia a la estabilización adicional del estado S1, desde donde se produce la emisión. El efecto de estabilización de S1 es mayor en las jaulas más pequeñas, lo que lleva a mayores desplazamientos de Stokes en jaulas más pequeñas y al desplazamiento azul progresivo de la emisión en las jaulas más grandes.

En las 3 nanojaulas se produce el fenómeno de autoatrapamiento del excitón, localizándolo en sólo unas pocas unidades fenileno en el centro de un único puente (figura 2). La eficacia del autoatrapamiento del excitón disminuye para las nanojaulas más grandes.

Conclusiones

La metodología de dinámica molecular con transiciones cuánticas fue aplicada a la simulación de la fotoexcitación y subsiguiente relajación y redistribución intramolecular del

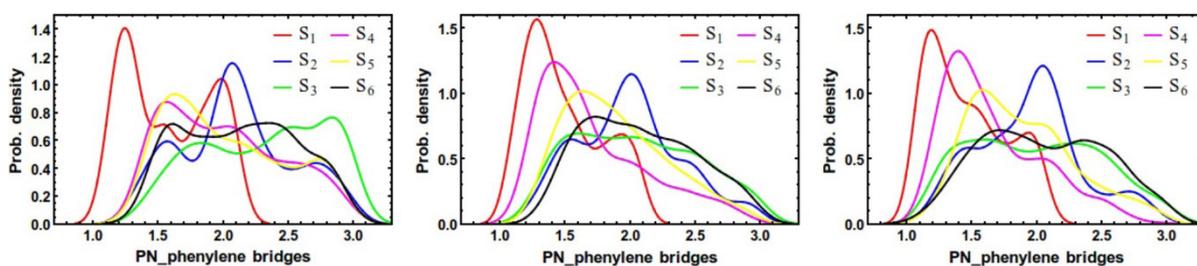


Fig. 2. Localización espacial de la densidad de transición electrónica en nanojaulas de carbono con $n = 4$ (izquierda), $n = 5$ (centro), $n = 6$ (derecha). Las curvas muestran, para cada estado excitado, la densidad de probabilidad de que el excitón esté localizado sobre un número PN de puentes

exceso de energía electrónica y vibracional en sistemas moleculares conjugados (por ejemplo, nanoanillos y nanojaulas de carbono). Las simulaciones permitieron obtener informaciones detalladas sobre las propiedades estructurales, dinámicas y ópticas de estos sistemas y establecer vínculos entre ellas. La descripción atómica de las moléculas conjugadas permite establecer su potencial para futuras aplicaciones en el diseño de dispositivos optoelectrónicos, como diodos y celdas solares. Se demostró que la inserción progresiva de nuevas unidades -CH₂ en cadenas alquílicas unidas a nanoanillos de cicloparafenilenos permite controlar las propiedades de emisión, permitiendo sintonizar, por ejemplo, la frecuencia de los fotones que se emiten.

Por otra parte, se identificó un conjunto reducido de vibraciones (modos normales) que influyen directamente sobre la redistribución del excitón durante el proceso de conversión interna, bautoatrapamiento y migración intramolecular. Además de facilitar el desarrollo de nuevos modelos mixtos cuántico-clásicos, que incluyan la descripción cuántica del movimiento a lo largo de los modos activos, este conocimiento puede ser utilizado para controlar la eficiencia de los futuros dispositivos optoelectrónicos mediante la manipulación de estos grados de libertad. Adicionalmente, se caracterizó la influencia del tamaño de nanojaulas de carbono sobre distintas propiedades relacionadas con procesos de localización, migración intramolecular y autoatrapamiento del excitón, que ocurren durante la relajación electrónica en estas nanoestructuras.

Finalmente, se implementaron mejoras y extensiones al paquete computacional NEXMD, que se traducen en un incremento de la precisión y una ampliación del dominio de aplicabilidad de este *software*. Esto permitirá estudiar la dinámica fotoinducida en otros sistemas moleculares conjugados que, por su tamaño o complejidad, no han podido ser abordados hasta el momento.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Rodríguez Hernández B. Relajación y redistribución intramolecular de energía en nanoanillos de carbono [Tesis de Doctorado]. Universidad Nacional de Quilmes; 2022. 149 p.
- Nelson TR, White AJ, Bjorgaard JA, Sifain AE, Zhang Y, Nebgen B, Fernandez-Alberti S, Mozyrsky D, Roitberg AE, Tretiak S. Non-adiabatic Excited-State Molecular Dynamics: Theory and Applications for Modeling Photophysics in Extended Molecular Materials. *Chem Rev*. 2020;120(4):2215-87.
- Rodríguez Hernández B, Ondarse-Alvarez D, Oldani N, Martínez Mesa A, Uranga-Piña L, Tretiak S, Fernandez-Alberti S. Modification of Optical Properties and Excited-State Dynamics by Linearizing Cyclic Paraphenylene Chromophores. *J Phys Chem C*. 2018;122:16639-1664.
- Cao G. Nanostructures & nanomaterials: synthesis, properties & applications. Edition: Reprint. Imperial College Press; 2004. 433.

- Kim JH, Wood S, Park JB, Wade J, Song M, Yoon SC, Jung IH, Kim JS, Hwang DH. Optimization and Analysis of Conjugated Polymer Side Chains for High-Performance Organic Photovoltaic Cells. *Adv Funct Mater*. 2016;26(10):1517-25.
- Malone W, Nebgen B, White A, Zhang Y, Song H, Bjorgaard JA, Sifain AE, Rodríguez Hernández B, Freixas VM, Fernandez-Alberti S, Roitberg AE, Nelson TR, Tretiak S. NEXMD Software Package for Nonadiabatic Excited State Molecular Dynamics Simulations. *J Chem Theory Comput*. 2020;16(9):5771-83.
- Brunk E, Rothlisberger U. Mixed Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Molecular Dynamics Simulations of Biological Systems in Ground and Electronically Excited States. *Chem Rev*. 2015;115(12):6217-63.
- Crespo-Otero R, Barbatti M. Recent Advances and Perspectives on Nonadiabatic Mixed Quantum-Classical Dynamics. *Chem Rev*. 2018;118(15):7026-68.
- Rodríguez Hernández B, Nelson T, Oldani N, Martínez Mesa A, Uranga-Piña L, Segawa Y, Tretiak S, Itami K, Fernandez-Alberti S. Exciton Spatial Dynamics and Self-Trapping in Carbon Nanocages. *J Phys Chem Lett*. 2021;12(1):224-31.
- Rodríguez Hernández B, Oldani N, Martínez Mesa A, Uranga-Piña L, Tretiak S, Fernandez-Alberti S. Photoexcited energy relaxation and vibronic couplings in π -conjugated carbon nanorings. *Phys Chem Chem Phys*. 2020;22(27):15321-32.
- Negrin-Yuvero H, Freixas VM, Rodríguez Hernández B, Rojas-Lorenzo G, Tretiak S, Bastida A, Fernandez-Alberti S. Photoinduced Dynamics with Constrained Vibrational Motion: FrozeNM Algorithm. *J Chem Theory Comput*. 2020;16(12):7289-98.
- Nelson TR, Ondarse-Alvarez D, Oldani N, Rodríguez Hernández B, Alfonso-Hernandez L, Galindo JF, Kleiman VD, Fernandez-Alberti S, Roitberg AE, Tretiak S. Coherent exciton-vibrational dynamics and energy transfer in conjugated organics. *Nature communications*. 2018;9(1):2041

Recibido: 02/10/2024

Aprobado: 03/01/2025

Conflictos de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses en relación con la investigación reportada en este artículo.

Contribuciones de los autores

- Conceptualización: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti
- Curación de datos: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa
- Análisis formal: B. Rodríguez Hernández
- Adquisición de fondos: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti
- Investigación: B. Rodríguez Hernández, L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti
- Metodologías: B. Rodríguez Hernández, S. Fernández Alberti
- Administración de proyecto: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti
- Software**: B. Rodríguez Hernández, S. Fernández Alberti
- Supervisión: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti
- Validación: B. Rodríguez Hernández

- Visualización: B. Rodríguez Hernández, S. Fernández Alberti
- Redacción-borrador original: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti
- Redacción-revisión y edición: L. Uranga Piña, A. Martínez Mesa, S. Fernández Alberti

Financiamientos

Esta investigación fue financiada parcialmente por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de Argentina, la Universidad Nacional de Quilmes, la Agencia Nacional de Promoción de la Investigación, el Desarrollo Tecnológico y la Innovación de Argentina, el Programa Nacional de Ciencias Básicas de Cuba y el Centro Internacional de Física Teórica "Abdus Salam".

Cómo citar este artículo

Uranga Piña LI, Martínez Mesa A, Rodríguez Hernández B, Fernández Alberti S. Propiedades fotofísicas de sistemas moleculares conjugados con aplicaciones potenciales en la optoelectrónica. An Acad Cienc Cuba [internet] 2025 [citado en día, mes y año];15(1):e1694. Disponible en: <http://www.revistaccuba.cu/index.php/revacc/article/view/1694>

El artículo se difunde en acceso abierto según los términos de una licencia Creative Commons de Atribución/Reconocimiento-NoComercial 4.0 Internacional (CC BY-NC-SA 4.0), que le atribuye la libertad de copiar, compartir, distribuir, exhibir o implementar sin permiso, salvo con las siguientes condiciones: reconocer a sus autores (atribución), indicar los cambios que haya realizado y no usar el material con fines comerciales (no comercial). © Los autores, 2025.

