



## Análisis vibracional de fragmentos de polidiacetileno

Isis Rodríguez-Sánchez<sup>1</sup>, Erick Cerpa<sup>1</sup>, Maria Cristina Kantun Uicab<sup>2</sup>, Armando Zaragoza-Contreras<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato, Instituto Politécnico Nacional, C.P. 36275, Silao de la Victoria, Guanajuato; México.

<sup>2</sup> Universidad Politécnica de Juventino Rosas, Calle Hidalgo 102, Comunidad de Valencia, 38253 Santa Cruz de Juventino Rosas, Guanajuato; México

<sup>3</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Av. Miguel de Cervantes 120 Complejo Industrial Chihuahua, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua; México.

El Polidiacetileno PDA, es un compuesto orgánico cromóforo que ha sido ampliamente estudiado por su gran versatilidad en el uso de sensores, a partir de un estímulo químico o físico aplicado<sup>1,2</sup>. Este tipo de compuestos presentan la transición de cambio de color azul a rojo con el aporte de una pequeña cantidad de energía. Previamente, se han reportado estudios empleando herramientas computacionales que muestran que la constitución de un esqueleto a base de dobles y triples enlaces en la molécula de PDA es el encargado de este cambio de coloración<sup>3</sup>. Experimentalmente, se ha observado en los espectros de IR del PDA que se presentan pequeñas variaciones en la zona de los 1800 a los 1816  $\text{cm}^{-1}$  correspondientes a las vibraciones de los ácidos carboxílicos del fragmento cuando es sometido a cambios de temperatura. Con un análisis de espectroscopia vibracional y uno conformacional, empleando la Teoría de los Funcionales de la Densidad con un funcional B3LYP y un conjunto de bases 631G+\*\* se propone el estudio de estos compuestos para investigar los factores que propician los cambios en los espectros de luz infrarroja realizando estudios a diferentes temperaturas, tal como se analiza de forma experimental. También se propone estudiar la presencia de dos o más unidades repetitivas de grupos carboxílicos presentes en el polidiacetileno. Mucho se ha reportado que estos cambios se deben a la presencia de puentes de hidrógeno, con este estudio se busca resolver estas incógnitas e indicar porque razón el espectro de IR experimental presenta estos cambios en la longitud de onda.

- (1) Wu, A.; Gu, Y.; Stavrou, C.; Kazerani, H.; Federici, J. F.; Iqbal, Z. Inkjet Printing Colorimetric Controllable and Reversible Poly-PCDA/ZnO Composites. *Sensor Actuat B-Chem.* **2014**,203, 320–326.
- (2) Traiphol, N.; Rungruangviriyaya, N.; Potai, R.; Traiphol, R. Stable Polydiacetylene/ZnO Nanocomposites with Two-steps Reversible and Irreversible Thermochromism: The Influence of Strong Surface Anchoring. *J Colloid Interf Sci.* **2011**,356, 481–489.
- (3) Katagiri, H.; Shimoi, Y.; Abe, S. A Density Functional Study of Backbone Structures of Polydiacetylene: Destabilization of Butatriene Structure. *Chem Phys.* **2004**,306, 191–200.