

Synthesis, characterization and semiconducting behavior of N,2,5-trisubstituted pyrroles.

Monroy, Olivia; Fomina, Lioudmila; Sánchez-Vergara, María Elena; Gaviño, Rubén; Acosta, Alonso; Alvarez Bada, José Ramón; Salcedo, Roberto.

Resumen.

En este trabajo se sintetizaron pirroles N,5,5-trisustituidos y se caracterizaron por espectroscopías IR, UV-Vis y RMN. Las propiedades electrónicas y ópticas de estos materiales fueron evaluadas. Se llevaron a cabo cálculos teóricos por medio del software Gaussian09, y todas las especies involucradas fueron geométricamente optimizadas para obtener las HOMO, LUMO y bandas prohibidas teóricos. De los cálculos HOMO y LUMO resultó que el monómero 1-(3,5-dinitrofenil)-2,5-difenil-1H-pirrol podría ser utilizado como un semiconductor tipo p o un semiconductor tipo n , dependiendo del sustituyente. Las bandas prohibidas ópticas experimentales fueron obtenidas por medio de los métodos Tauc y Cody, y comparadas con aquellas calculadas por medio de DFT. Los resultados muestran que el comportamiento semiconductor se halla

en todos los monómeros y depende del grupo funcional de la estructura, su grado de cristalinidad, y sus energías HOMO y LUMO.

Abstract.

In this work, N,2,5-trisubstituted [pyrroles](#) were synthesized and characterized by IR, [UV-Vis](#) and NMR [spectroscopies](#). These materials' [electronic and optical properties](#) were then evaluated. Theoretical calculations were carried out by means of the Gaussian09 software and all the involved species were geometrically optimized in order to obtain the theoretic HOMO, LUMO and [band gaps](#). From the HOMO and LUMO calculations, it turns out that [monomer](#) 1-(3,5-dinitrophenyl)-2,5-diphenyl-1H-pyrrole could be used as a *p*-type semiconductor or *n*-type semiconductor, depending on the substituent. The experimental optical band gaps were obtained by the Tauc and Cody methods and compared to the ones calculated through DFT. The results show that the semiconducting behavior is found in all the monomers and depends on the functional group of the structure, its [crystallinity](#) degree, as well as its HOMO and its LUMO energies.

Bibliografía.

Monroy, O., Fomina, L., Sánchez, M., Gaviño, R., Acosta, A., Alvarez, J., & Salcedo, Roberto. (2018). Synthesis, characterization and semiconducting behavior of N,2,5-trisubstituted pyrroles. *Journal of*



Molecular Structure, 1171, 45-53. Disponible en
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.05.086>.