

Sistemas π -conjugados: la ciencia detrás de los colores y sus aplicaciones π -conjugated systems: the science behind the colors and their applications.

S.A. Corona-Celaya ^a, O.J. Hernández-Ortiz ^{b*}

^a Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

^b Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

Resumen

Los compuestos π -conjugados son una clase fundamental de moléculas caracterizadas por sistemas extendidos de dobles enlaces alternados, que facilitan la deslocalización electrónica a lo largo de su estructura. Esta propiedad les otorga atractivas características ópticas y electrónicas, como la absorción de luz en el visible y la emisión de fluorescencia, lo que explica su presencia en pigmentos naturales (por ejemplo, clorofila, carotenoides y ácido carmínico) y su contribución a la coloración en la naturaleza. Además, se destaca su relevancia en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos, tales como celdas solares orgánicas, OLEDs y sensores, así como en aplicaciones biomédicas que incluyen terapia fotodinámica y bioimagen, gracias a su eficiencia en la absorción y transferencia de energía. Este artículo revisa su origen, clasificación y aplicaciones actuales, consolidándose como materiales funcionales de alto impacto para la ciencia y la tecnología.

Palabras Clave: Compuestos π -conjugados, propiedades ópticas y electrónicas, materiales funcionales

Abstract

π -conjugated compounds are a fundamental class of molecules characterized by extended systems of alternating double bonds that facilitate the delocalization of electrons throughout their structure. This property gives them attractive optical and electronic properties, such as visible light absorption and fluorescence emission, which explains their presence in natural pigments (e.g. chlorophyll, carotenoids and carminic acid) and their contribution to colouration in nature. Furthermore, thanks to their efficiency in energy absorption and transmission, they are crucial for the development of optoelectronic devices, such as organic solar cells, OLEDs, and sensors, as well as for biomedical applications, including photodynamic therapy and bioimaging. This article provides an overview of their origin, classification, and current applications, establishing them as highly effective functional materials for science and technology.

Keywords: π -Conjugated compounds, optical and electronic properties, functional materials.

1. Introducción

Desde el descubrimiento de Alan MacDiarmid, Hideki Shirakawa y Alan Heeger de la conductividad en un material polimérico en 1976 han pasado ya casi 50 años, trabajo por el cual fueron laureados con el premio nobel de química (Chiang et al., 1977; Heeger, 2001). Esto sentó la base de una área de gran interés científico y tecnológico, desde entonces a la fecha se han desarrollado gran número de materiales basados en moléculas con sistema π -conjugados (Deng & Zhang, 2014; Malliaras et al., 2018; Scharber & Sariciftci, 2021).

Sin embargo, en la naturaleza, se pueden reconocer este tipo de compuestos porque se tratan de moléculas que suelen exhibir color, dado que, al interactuar con la luz visible, su energía resulta suficiente para mover a los electrones del

sistema desde su estado fundamental a un estado excitado. Esta capacidad de los sistemas π -conjugados para influir en el color tiene implicaciones significativas en cosas tan cotidianas como flores y frutas. Ejemplo de ello son los pigmentos naturales conocidos como carotenoides y flavonoides, cuya conjugación de los dobles enlaces permite ver los colores amarillo, rojo y naranja en flores y frutas. En la Figura 1 se muestran las estructuras moleculares de compuestos con sistema π -conjugado presentes en la naturaleza. La coloración que confieren posee funciones biológicas, como atraer polinizadores o proteger contra la radiación UV. Asimismo, otro ejemplo primordial sería la clorofila (Eggink et al., 2001), cuyos electrones deslocalizados en los anillos porfirínicos permiten la absorción de luz solar y su transformación en energía.

*Autor para la correspondencia: javier_hernandez@uaeh.edu.mx

Correo electrónico: coronac.santoni@gmail. (Sofía Antonieta Corona Celaya), javier_hernandez@uaeh.edu.mx (Oscar Javier Hernández Ortiz)

Historial del manuscrito: recibido el 16/11/2024, última versión-revisada recibida el 31/03/2025, aceptado el 10/09/2025, en línea (postprint) desde el 12/09/2025, publicado el DD/MM/AAAA. DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v13i26.13797>



El sistema π -conjugado les confiere a las moléculas propiedades ópticas y electrónicas únicas y que pueden ser moduladas de acuerdo a la aplicación deseada (Jin et al., 2018; Shao et al., 2020). Si bien, el boom de las moléculas con π -conjugado ha sido como materiales semiconductores en aplicaciones optoelectrónicas (Ostroverkhova, 2016), en los últimos años se ha ampliado la gama de aplicaciones tanto en óptica no lineal (Sahki et al., 2021), fotocatalisis (Hayat et al., 2019), sensado (Liu et al., 2022) y bioaplicaciones (Shan et al., 2018). A continuación, haremos un recorrido acerca de sus propiedades y sus principales aplicaciones de estos coloridos tipos de compuestos.

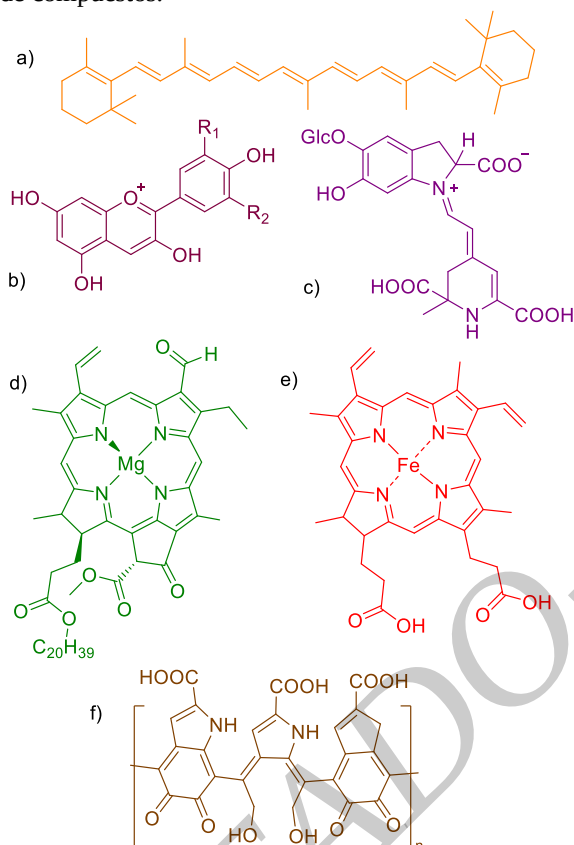


Figura 1: Estructura de moléculas con sistema π -conjugado presentes en la naturaleza como frutos y flores a) β -Caroteno, que confiere el color naranja, b) estructura general de las antocianinas, confieren colores morado y violeta, c) estructura de betanina, colorante del betabel, d) clorofila b, da el color verde a hojas y tallos, e) estructura molecular del grupo Hemo B, color rojo de la sangre y e) unidad repetitiva del polímero de eumelanina, colorante de piel, cabello e iris. Elaboración propia

2. Fundamentos de los sistemas π -conjugados

Para entender a fondo los sistemas π -conjugado, es esencial establecer la base sobre los principios que subyacen en este tema.

2.1 Definición y características

Imagina que estás construyendo un tren con vagones. Cada vagón está conectado al siguiente, permitiendo que algo se mueva a lo largo de todo el tren. Así, las moléculas π -conjugadas se asemejan un poco a ese tren, dado que son moléculas especiales en las que los electrones, esas pequeñas partículas cargadas de energía, pueden moverse fácilmente de

un extremo al otro. Esto ocurre porque las moléculas π -conjugadas tienen una estructura única, donde ciertos enlaces entre átomos permiten que los electrones se desplacen libremente. Un sistema conjugado se forma al alternar enlaces dobles y enlaces sencillos; ver figura 2. Esto permite el tránsito de los electrones en presencia de un efecto “push-pull” sobre los electrones de la molécula (Zhang, Guo, et al., 2020). Por ello, en el diseño de moléculas con sistema π -conjugado, ya sean moléculas de bajo peso molecular o polímeros, se han empleado un número de fragmentos donadores (D) y aceptores (A) de electrones conectados por medio de un espaciador π -conjugado, permitiendo a su vez que exista una parte de la molécula que atrae electrones y otra que los cede con facilidad (Tonga, 2020).



Figura 2: Estructura de moléculas con sistemas π -conjugados. Elaboración propia.

2.2 Tipos de moléculas π -conjugados.

Las moléculas π -conjugadas poseen una variedad de estructuras que pueden clasificarse en tres tipos: polímeros, moléculas pequeñas y compuestos organometálicos, cada uno con comportamientos y propiedades específicas debido a la forma en la que los electrones se deslocalizan. Aunado a ello, la disposición y la extensión de los sistemas conjugados ha de influir en las características ópticas y electrónicas de la molécula.

2.2.1 Polímeros

Los polímeros son macromoléculas formadas por la repetición de unidades estructurales más reducidas conocidas como monómeros, es decir, dichas moléculas están constituidas por cadenas de unidades más simples mediante enlaces covalentes (Jensen, 2008). Existen diversos tipos de polímeros, pero de forma general, pueden acoplarse a cualquier necesidad ante su uso, dado que pueden ser flexibles o rígidos, duros o blandos, transparentes u opacos, termoplásticos o termoestables, por mencionar algunas cualidades.

Sin embargo, los polímeros “habituales” no necesariamente poseen una estructura de enlaces π -conjugados a lo largo de la cadena y suelen ser insensibles a las interacciones electrónicas extendidas, haciendo que sus propiedades ópticas y electrónicas sean menos especulares a diferencia de las observadas en polímeros π -conjugados. Dicha clasificación, es la que nos permite observar secuencias de enlaces dobles a lo largo de la cadena, formando un sistema extendido de conjugación que le puede conferir propiedades como la conductividad eléctrica, fluorescencia o fosforescencia y absorción de luz en el rango visible. (Bolaños Ch & Alvarez, 2018).

Los polímeros suelen diseñarse empleando un segmento donador y otro aceptor como monómeros, formando copolímeros como la unidad repetitiva que se muestra en la Figura 3. En ocasiones también se aprovecha la funcionalización de los grupos colgantes para modificar las

propiedades ópticas de los polímeros agregando segmentos conjugados (Du et al., 2020). Aunado a ello, los polímeros presentan una ventaja contra sus pares de menor peso molecular, puesto que son bastante estables, sus propiedades mecánicas y térmicas suelen ser mejores, y del mismo modo, su procesabilidad en películas delgadas que es primordial en ciertas aplicaciones, en especial en las de optoelectrónica. Sin embargo la reproducibilidad del polímero y por ende de su funcionamiento en determinada aplicación no siempre es la mejor.

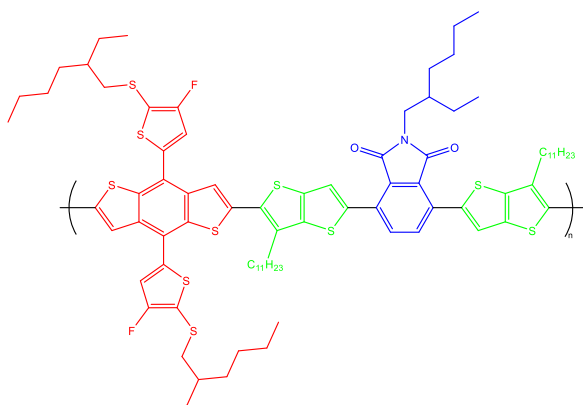


Figura 3: Unidad repetitiva de copolímero π -conjugado, en color rojo el segmento que actúa como donador de electrones, en verde el puente π y en azul el aceptor de electrones. Adaptado con permiso de *J. Phys. Chem. C* 2020, 124, 1, 230–236 (Du et al., 2020) Copyright © 2020, American Chemical Society.

2.3.1.1 Dendrímeros

Los dendrímeros son macromoléculas globulares de distribución y tamaño mono disperso, que, a diferencia de los polímeros lineales, su estructura es precisa y tanto su tamaño como su geometría pueden ser controlados durante la síntesis, a modo de predisponer propiedades físicas y químicas específicas. Su construcción arborescente (ver Figura 4) posee diversas capas de ramificaciones, mismas que son conocidas como generaciones (G0, G1, G2) (Najafi et al., 2021).

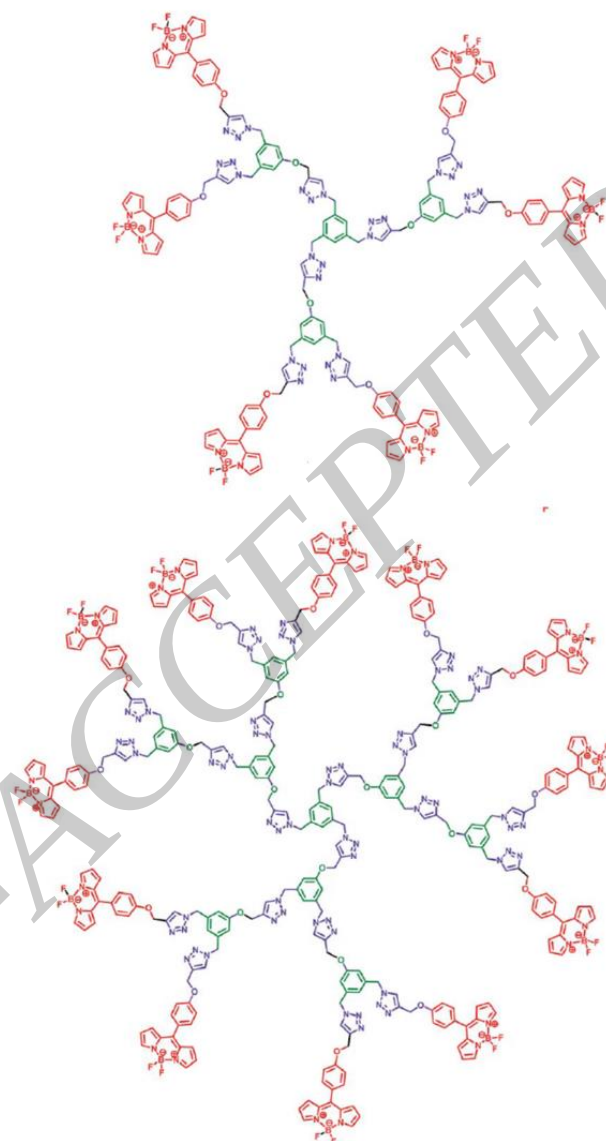


Figura 4: Estructura de dos dendrímeros π -conjugados con grupos donadores (rojo) y aceptores (aceptores) de electrones enlazados mediante puente π (verde) (Saravanan et al., 2020) CC BY-NC 3.0.

Al ser posible su manipulación durante la síntesis, los dendrímeros pueden incorporar unidades π -conjugadas en sus ramas o bien en la estructura central para impartir o fomentar propiedades ópticas o electrónicas, tal como aumentar la eficiencia de transferencia de energía o su conductividad eléctrica.

2.3.1.1 Redes covalentes (COFs)

Las redes covalentes o Covalent Organic Frameworks (COFs), son polímeros orgánicos cristalinos con una estructura en capas porosa, que presenta una topología comparable a la del grafito. Estas redes se caracterizan por su estructura extendida y repetitiva, lo que les confiere una gran estabilidad química y térmica, y, al igual que los dendrímeros, su estructura se puede diseñar mediante la variación de métodos y la selección de unidades monoméricas (Tan et al., 2023). En la Figura 5 se muestra un ejemplo de diseño de un COF con base a la selección de los segmentos empleados en su síntesis, impactando en el tamaño del poro de los COFs obtenidos.

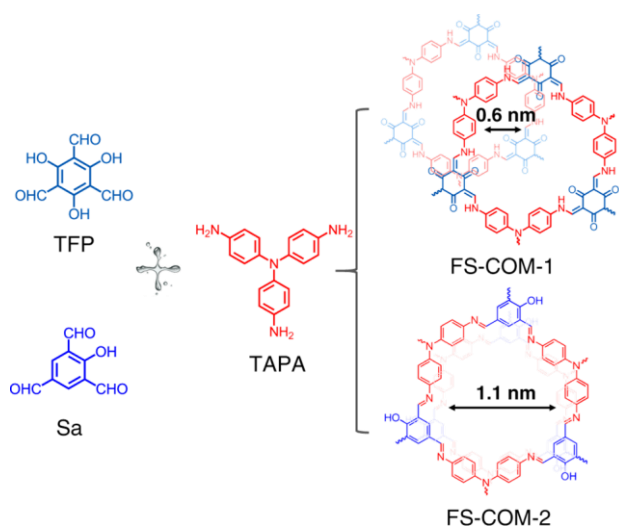


Figura 5: Unidades de dos COFs con diferente tamaño de poro (Y. Li, Wu, et al., 2020) CC BY 4.0.

Además de que su manipulación permite un propósito similar al de los dendrímeros, su estructura porosa no solo proporciona espacios para la adsorción de moléculas y gases, sino que también puede estar diseñada para maximizar la extensión de los sistemas π -conjugados. Aprovechando así la ventaja que brinda su porosidad a la conjugación (Merkel et al., 2023). La principal limitación que suelen exhibir es su procesabilidad, en especial si la aplicación requiere la formación de películas estables.

2.3.2 Moléculas pequeñas

Estos sistemas pueden ser oligómeros, o moléculas diseñadas a partir de acoplamiento de segmentos y precursores que no dan lugar a una polimerización. El término molécula de bajo peso molecular es relativo con respecto al de un polímero, pero en la mayoría de los casos las moléculas reportadas tienen pesos moleculares superiores a los 1000g/mol (Hernández-Ortiz et al., 2025). La principal ventaja que tienen con respecto a los polímeros es su reproducibilidad, además de su estructura química bien definidas, lo cual permite a su vez, la reproducibilidad del funcionamiento del material en las aplicaciones para el cual se han diseñado (Tang et al., 2017).

Las moléculas de bajo peso molecular se pueden diseñar usando los segmentos con propiedad aceptor y donador de electrones. La disposición de los grupos donadores y aceptores se suele llamar arquitectura molecular, encontrándose arquitecturas cuadrupolares $A-D-A$ y $D-A-D$, que, como se puede observar en las Figuras 6 y 7 (Kadam et al., 2020; J. Li et al., 2020), son moléculas simétricas con un centro donador o aceptor, esto implica que los electrones se puedan desplazar desde los grupos donadores hacia los aceptores, promoviendo la movilidad electrónica. También, pueden existir moléculas dipolares $D-\pi-A$ como las que se muestran en las figuras 8 y 9 (Eom et al., 2015; Y. Wu & Zhu, 2013).

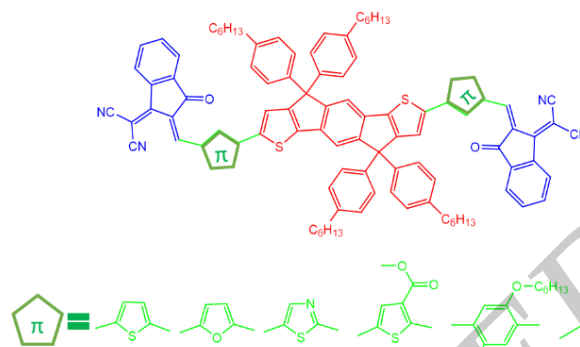


Figura 6: Estructura de una molécula π -conjugada de bajo peso molecular con arquitectura $A-\pi-D-\pi-A$, abajo diferentes tipos de puentes π que se pueden emplear en el diseño de este tipo de moléculas. Utilizado con permiso de (J. Li et al., 2020); permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

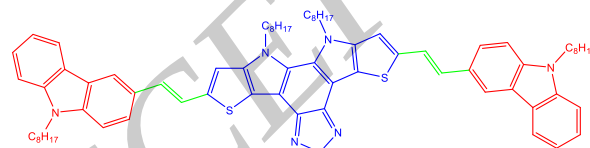


Figura 7: Estructura de una molécula π -conjugada de bajo peso molecular con arquitectura $D-\pi-A-\pi-D$ (Kadam et al., 2020) CC BY 4.0.

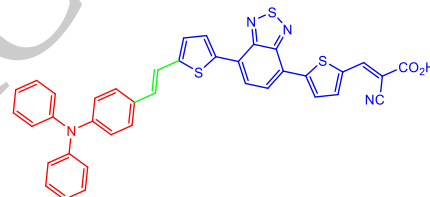


Figura 8: Estructura de una molécula π -conjugada de bajo peso molecular con arquitectura $D-\pi-A$ Utilizado con permiso de (Y. Wu & Zhu, 2013); permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

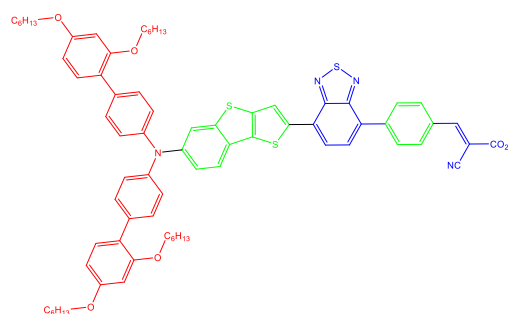


Figura 9: Estructura de una molécula π -conjugada de bajo peso molecular con arquitectura $D-\pi-A-\pi-A$. Utilizado con permiso de (Eom et al., 2015), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

2.3.3 Organometálicos

Los compuestos organometálicos son compuestos donde un átomo metálico se encuentra coordinado a ligandos. Los ligandos puede ser sistemas π -conjugados que en sinergia con un átomo metálico puede dar lugar a compuestos con procesos de transferencia de carga más intensos, pues también aparecen procesos de transferencia metal- π (Jiang et al., 2007; P.-T. Wu et al., 2009). Cabe aclarar que la mayoría de los compuestos organometálicos no tienen ligandos π -conjugados extendidos, ese tipo de compuestos no entrarían dentro de los compuestos π -conjugados.

En ciertos compuestos organometálicos, el grupo orgánico puede interactuar con los electrones del metal mediante los electrones π del grupo orgánico, dicha interacción, recibe el nombre de “conjugación metal- π ” (Hirao, 2002; Ley & Schanze, 1998). Por ejemplo, para compuestos tales como arilmetales o metales asociados a grupos carbonilo, los orbitales d del metal y los orbitales π atribuidos al grupo orgánico, permiten una cierta forma de conjugación. En la Figura 10 se muestran estructuras moleculares de algunos tipos de estos compuestos (C. Y. Chen et al., 2009; T. L. Choi et al., 2007; P. T. Wu et al., 2009).

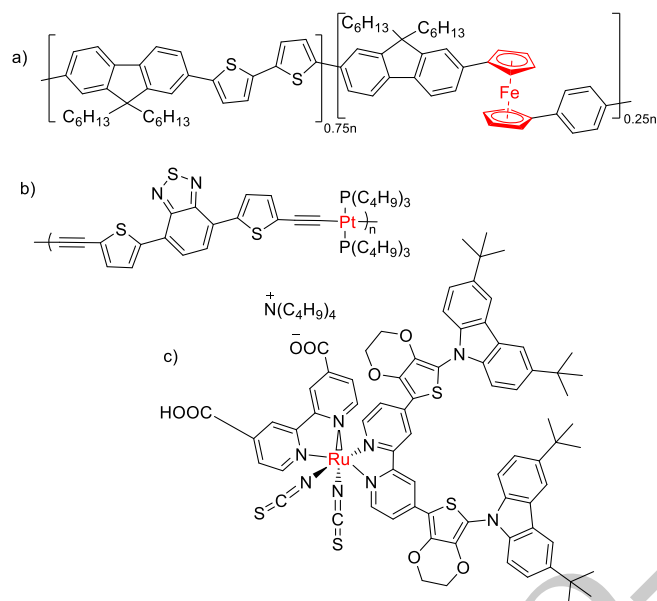


Figura 10: Ejemplos de polímeros conjugados organometálicos con presencia de a) ferroceno (T.-L. Choi et al., 2007) y b) platino (P.-T. Wu et al., 2009), así como c) un complejo organometálico de rutenio ligandos π -conjugados (C. Y. Chen et al., 2009). Adaptadas con permiso de *J. Am. Chem. Soc.* 2007, 129, 32, 9842–9843 Copyright © 2007; *Macromolecules* 2009, 42, 3, 671–681 Copyright © 2009; *J. Phys. Chem. C* 2009, 113, 48, 20752–20757 Copyright © 2009 American Chemical Society.

Por otro lado, los compuestos organometálicos también pueden ser polímeros porosos, entre ellos, las estructuras metal-orgánicas (MOFs), quienes son polímeros de coordinación formados por un centro metálico y un ligando orgánico. Estos, se pueden diseñar utilizando iones metálicos biocompatibles como Fe^{3+} , Zn^{2+} , Mg^{2+} , Ca^{2+} y Mo^{6+} , junto con ligandos orgánicos bioactivos. Esto permite ajustar la estructura y las propiedades a nivel nanométrico (Claudio-Rizo, Jesús A., & Cabrera-Munguia, Denis A. 2021)

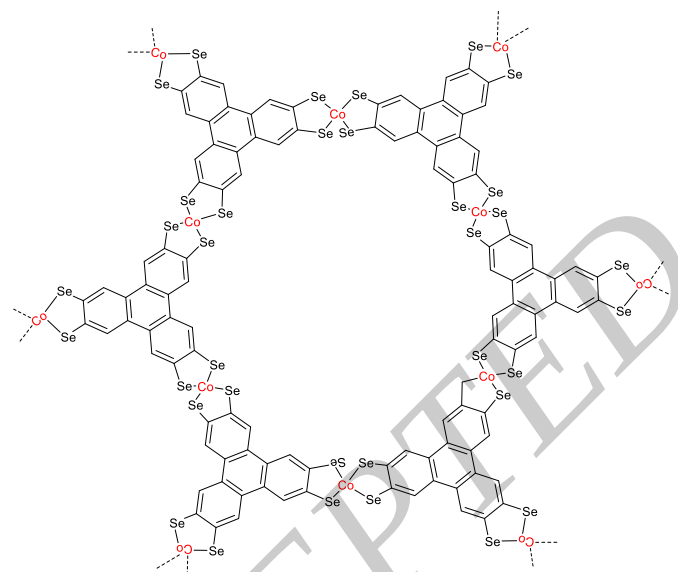


Figura 11: Estructura molecular de una MOF de Cobalto, donde los ligandos son moléculas π -conjugadas. Utilizado con permiso de (Cui et al., 2020), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

3. Propiedades

Los compuestos con sistema π -conjugado poseen propiedades que los hace atractivos para diversas aplicaciones. Las más atractivas las podemos dividir entre ópticas y electrónicas. A continuación, se describirán las más importantes propiedades de cada tipo.

3.1 Propiedades ópticas

Las propiedades ópticas de los compuestos con sistema π -conjugado son de las más destacadas al permitir su aplicación en diferentes áreas. A continuación, daremos una revisión de las más relevantes.

3.1.1 Absorción de la luz

El sistema conjugado de este tipo de moléculas le permite tener una basta cantidad de procesos llamados “transiciones electrónicas” que consisten en la absorción de un fotón y la promoción de un electrón de un estado de energía llamado basal a uno de mayor energía. Dependiendo la estructura, las moléculas pueden absorber longitudes de onda distintas. Así, el espectro electromagnético es formado por diferentes tipos de ondas electromagnéticas, y de forma particular, la luz con su gama de diferentes colores se encuentra en el denominado espectro visibles entre 380 y 750 nm (Sloney, 2016).

Tabla 1: Cuadro comparativo de las propiedades de moléculas con sistema π -conjugado.

Propiedad	Polímeros π -conjugados	Moléculas pequeñas π -conjugadas	COFs (Covalent Organic Frameworks)	Dendrimeros π -conjugados	Organometálicos π -conjugados
Tamaño molecular	Alto y variable (macromoléculas de monómeros)	Bajo (oligómeros o moléculas discretas)	Alto y definido (estructura reticulada)	Intermedio (estructura ramificada definida)	Variable; desde complejos discretos hasta polímeros extensos
Estructura	Lineal o ramificada, flexible y adaptable	Rígida o semiflexible, bien definida	Repetitiva, extendida y porosa	Altamente ramificada, simétrica y precisa	Núcleo orgánico con centros metálicos o cadenas organometálicas
Solubilidad	Variable; a menudo limitada	Alta en disolventes orgánicos apropiados	Generalmente baja; puede mejorarse por diseño	Moderada; mejora con grupos periféricos	Variable; depende del metal, ligandos y geometría del complejo
Procesabilidad	Alta; fácil formación de películas	Alta; sublimación o recristalización posibles	Limitada; mejora por exfoliación o métodos templados	Variable según arquitectura	Alta en solución o película; depende del diseño del ligando
Propiedades electrónicas	Dependen del monómero y la regularidad	Definidas con precisión estructural	Deslocalización extensa por conjugación en red	Determinadas por núcleo y naturaleza de las ramas	Modificables por el metal, ligando, y geometría; permiten transferencia carga metal→ligando y viceversa
Autoensamblaje	Limitado; requiere diseño específico	Frecuente; donador–aceptor o π – π stacking	Muy alto; dirigido por enlaces covalentes reticulares	Muy alto; controlado por generaciones y periferia	Alta capacidad mediante coordinación supramolecular y enlaces dirigidos
Estabilidad	Buena estabilidad termo-mecánica	Menor; susceptibles a fotodegradación	Muy alta; resistencia térmica y química	Alta; estabilidad térmica y química significativa	Alta si se elige un metal robusto; puede mejorar con diseño de ligandos quelantes

Las moléculas orgánicas absorben en diferentes longitudes de onda, existiendo además de las transiciones electrónicas antes descritas también transiciones vibracionales, lo cual se traduce en un comportamiento donde existe un rango de absorción de una molécula con diferente grado de absorción a cada longitud de onda dentro de su rango, a esto se le conoce como espectro de absorción, ver Figura 13. Dependiendo de la longitud de absorción máxima que exhiba un compuesto, será el color que observamos. Para reforzar lo anterior, nos apoyaremos en la Figura 12, donde se presentan tres moléculas π -conjugadas con diferente grado de conjugación, es decir, moléculas con diferente tamaño (diferente grado de conjugación), por lo regular un aumento en el grado de conjugación va de la mano con un desplazamiento de la longitud de absorción máxima hacia valores mayores y con ello también un cambio en la coloración (Yamaguchi et al., 2008). En la Figura 12 se observan los colores de los compuestos sintetizados por Garcias-Morales y colaboradores, ellos sintetizaron compuestos con colores amarillo, rojo y violeta; podemos ver como sus espectros de absorción (en la esquina inferior derecha) son distintos. Los espectros de absorción tienen un valor máximo (longitud de onda máxima de absorción), siendo sus valores 434 nm, 500 nm y 551 nm respectivamente. Si los buscamos en la Tabla 2, donde se presenta los rangos de absorción relacionados con el color absorbido y el observado, podemos confirmar que coinciden los valores de las longitudes con los colores amarillo (434 nm), rojo (500 nm) y violeta (550 nm).

Tabla 2: Colores absorbidos y observados respecto a la longitud de onda absorbida, (Selim & Mohamed, 2017) CC BY 3.0.

Longitud de onda (nm)	Color absorbido	Color detectado
400-435	Violeta	Verde-amarillo
435-480	Azul	Amarillo
480-490	Verde-azul	Naranja
490-500	Azul-verde	Rojo
500-560	Verde	Morado
560-560	Amarillo-Verde	Violeta
560-595	Amarillo	Azul
595-605	Naranja	Verde-azul
605-700	Rojo	Azul-verde

Recordemos que la luz tiene un comportamiento tanto como onda como partícula, que se le conoce como fotón. Así como mencionamos que los compuestos absorben a diferentes longitudes de onda del espectro visible, es válido decir que absorben fotones de diferente energía. Sin embargo, dos compuestos con un espectro similar de absorción pueden absorber mayor cantidad de fotones que el otro compuesto. Esta capacidad de absorción de fotones específica de cada compuesto se denomina absorptividad molar.

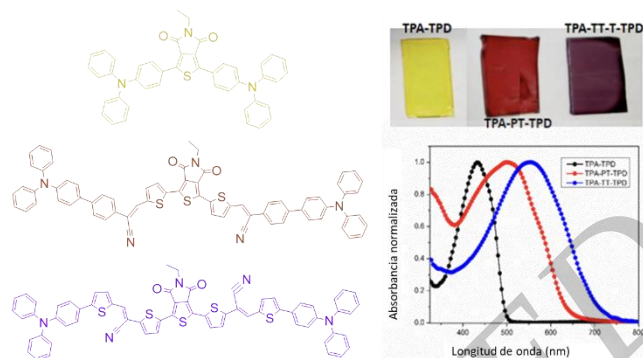


Figura 12: Tres moléculas con sistema π -conjugado con diferente grado de conjugación, lo que les confiere diferente color, relacionado con la longitud de onda máxima de cada uno (434, 500 y 551 nm). (Garcias-Morales et al., 2017) CC BY 4.0.

Tanto el rango de absorción, la longitud de onda máxima de absorción y la absorptividad molar no solamente son importantes por la coloración que les confiere a estos tipos de compuestos, sino por las aplicaciones que pueden tener. En algunas aplicaciones como lo veremos más adelante es importante que los compuestos absorban en un espectro muy amplio, en otros casos, es importante que absorban en una región determinada y una buena cantidad de fotones. En la Figura 13 se presenta un Diagrama de Jablonski de los procesos electrónicos que una molécula puede experimentar al ser excitada por una fuente de luz. Este diagrama facilitará la explicación de algunas propiedades descritas más adelante.

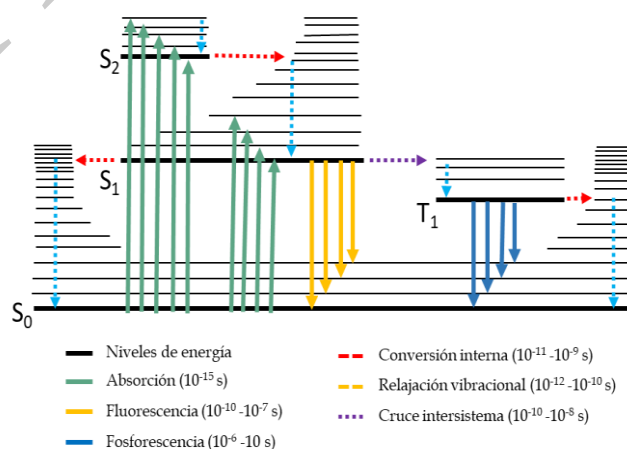


Figura 13: Diagrama de Jablonski de procesos electrónicos típicos en una molécula orgánica bajo excitación óptica (D. Chen et al., 2020).

3.1.2 Emisión de la luz

Seguramente han observado en algún momento sustancias que “brillan” en la oscuridad, por ejemplo, algunas algas y las luciérnagas, quienes emiten luz, dando lugar a uno de los fenómenos más bellos de la naturaleza. Este fenómeno tiene su explicación en la capacidad de algunas sustancias de emitir fotones debido a una reacción química o después de absorber energía.

Partiendo de esto, las transiciones electrónicas que se explicaron anteriormente dan lugar a un proceso de relajación, donde todo lo que se absorbió se disipa. Ya sea en forma de vibración o en forma de luz, que, de ser la segunda, dará lugar a los fenómenos de emisión de los compuestos (ver Figura 13).

Dependiendo de la velocidad con la cual disipan esa energía absorbida en forma de luz recibe el nombre de fluorescencia (muy rápido), y fosforescencia (lento) (Lakowicz, 2006). Pero, ¿Cómo diferenciar a simple vista si una sustancia que emite luz es fluorescente o fosforescente? Es sencillo, si el material “brilla” cuando se le irradia una lámpara UV y cuando se deja de irradiar con la lámpara deja de “brillar”, estamos en presencia de un fenómeno de fluorescencia. En cambio, si sigue “brillando” cierto tiempo después de apagar la lámpara UV, es un fenómeno de fosforescencia. Si bien, las moléculas con sistema π -conjugado con las únicas especies químicas que emiten luz, si son de las más interesantes y atractivas, debido que podemos diseñar la molécula y sintetizarla posteriormente, con lo cual se puede modular su región y longitud máxima de emisión. Al igual que con el espectro de absorción, una molécula que flúorese presenta un espectro de emisión y la longitud de onda de emisión determina el color de la luz que emite el compuesto (Yamaguchi et al., 2008). En la Figura 14 se muestran diferentes compuestos que emiten luz de diferente longitud de onda (color) en disolución bajo una lámpara UV. En la Figura 16, se aprecia un ejemplo de un polímero al que al inducirle un cambio conformacional produce un cambio en las longitudes de absorción y emisión.

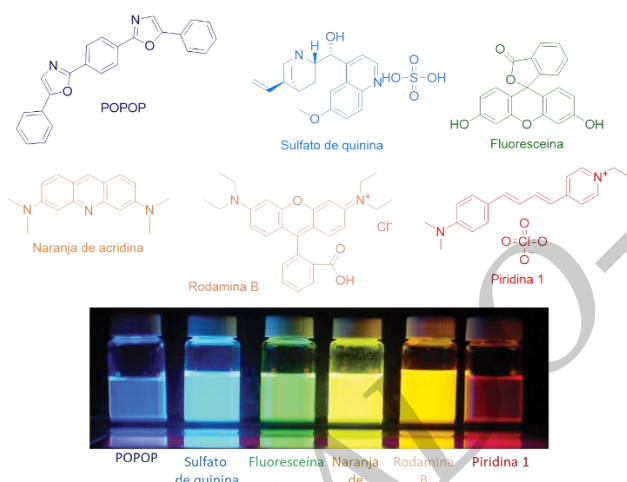


Figura 14: Moléculas con sistema π -conjugado que exhiben fluorescencia con diferentes longitudes de onda, esto se observa en los distintos colores de la emisión de las moléculas en solución (Lakowicz, 2006) Springer-Verlag US 2006.

No todos los compuestos orgánicos con sistema π -conjugados presentan fluorescencia, y los que sí, no la exhiben con la misma intensidad. Como se mencionó líneas arriba, las moléculas al absorber energía para volver a su condición original deben de liberarla, si una molécula presenta fluorescencia significa que una parte de la energía absorbida se disipa en forma de luz y el resto no. Esta relación es una característica de cada molécula y se llama rendimiento cuántico de fluorescencia. Imagina que la molécula es como una persona en una fiesta que recibe energía (absorbe luz) y decide si devolverla como luz (brillando) o liberar esa energía de otra manera (por ejemplo, moviéndose o vibrando). El rendimiento cuántico es básicamente una medida de cuántas veces, en promedio, esa persona decide brillar en lugar de usar la energía de otra forma. Si una molécula tiene un rendimiento cuántico alto, significa que casi toda la energía que absorbe la

usa para emitir luz. Por el contrario, un rendimiento cuántico bajo significa que la mayor parte de la energía se pierde en formas no luminosas, como el calor.

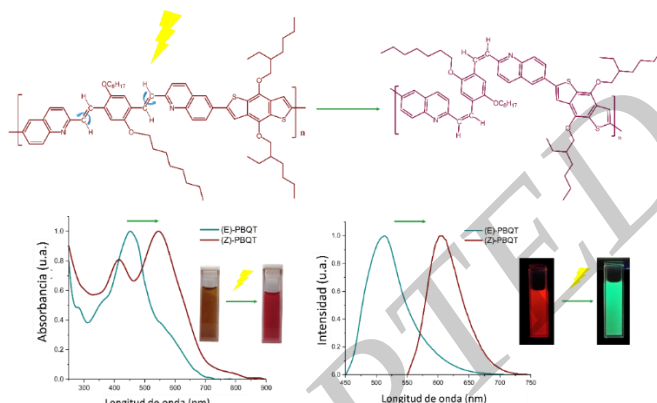


Figura 15. Polímero conjugado con isomerismo conformacional, el cambio en el espectro de absorción y con ello, en sus longitudes de absorción y emisión se ve reflejado en un cambio en el color que exhibe en disolución y la de su emisión (Hernández-Ortiz et al., 2023) CC BY 4.0.

3.1.2.1 Apagamiento de fluorescencia y emisión inducida por agregación

Ya explicamos que ciertas moléculas con sistema π -conjugados tienen la capacidad de liberar energía luminosa como resultado de una absorción de energía, que puede ser luz también. Este tipo de moléculas fluorescentes son también llamadas fluoróforos. Lo más común es que los fluoróforos solo exhiban fluorescencia cuando están disueltos, conforme se va concentrando la solución o conforme van precipitando dejan de fluorescer, este fenómeno se conoce como apagamiento de fluorescencia. Sin embargo, algunos compuestos presentan una propiedad muy particular, pues en solución no presentan fluorescencia, pero conforme van agregándose, es decir dejan de estar disueltos, emiten luz. En otras palabras, estos compuestos fluorescen en sólido, lo cual los convierte en compuestos altamente atractivos para ser aprovechados en estado sólido y que, al aplicar energía, por ejemplo, un potencial eléctrico, puedan emitir luz. Esta propiedad es llamada “Emisión inducida por agregación”, y para entenderlo, imagina que tienes una molécula que, cuando está sola, es bastante tímida y no le gusta brillar (emitir luz). Pero cuando se junta con otras moléculas iguales, se siente más confiada y empieza a brillar mucho más intensamente. En términos más técnicos, la explicación de este fenómeno reside en la estructura molecular de este tipo de moléculas, en su estructura suele existir algún fragmento de ella que cuando está libre (disuelta) gira o vibra, pero conforme se acercan más moléculas del mismo tipo, se ve limitado el giro de su grupo, finalmente en sólido ya no puede girar, esto se conoce como restricción vibracional. Un ejemplo de ambos casos se muestra en la Figura 16a muestra que actúa el compuesto conforme aumenta la concentración y va disminuyendo su intensidad de emisión. 16b muestra las soluciones de un compuesto que conforme aumenta su concentración y aparecen agregados, aparece el fenómeno de fluorescencia.

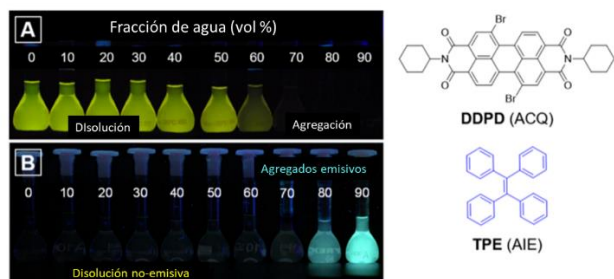


Figura 16: Moléculas π -conjugadas con apagamiento por agregación (ACQ por sus siglas en inglés) en la parte superior y en la inferior la molécula TPE exhibe emisión inducida por agregación (AIE por sus siglas en inglés). Adaptada con permiso (Feng & Liu, 2018) de Acc. Chem. Res. 2018, 51, 6, 1404–1414 Copyright © 2018 American Chemical Society.

3.1.3 Respuesta no lineal

La propiedad de ciertas moléculas con sistemas π -conjugados de exhibir respuestas no lineales se refiere a cómo estas moléculas interactúan con la luz de una manera no convencional.

En términos simples, cuando la luz pasa a través de una sustancia, normalmente sigue una relación directa: si duplicas la cantidad de luz, la respuesta de la sustancia (como la cantidad de luz que emite o absorbe) también se duplica. Sin embargo, en algunas moléculas con sistemas π conjugados, esta relación no es tan simple. Si duplicas la cantidad de luz, la respuesta puede aumentar mucho más o mucho menos de lo esperado, o incluso generar nuevos efectos, como cambiar la frecuencia de la luz (fenómenos conocidos como generación de segundo o tercer armónico), ver Figura 17.

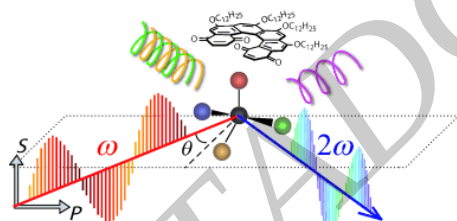


Figura 17: Cuando un compuesto exhibe generación de segundo armónico puede transformar la energía de los fotones que inciden y los transforman en dos de menor energía. Utilizado con permiso de (Foerier et al., 2009), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

Otro de los fenómenos de óptica no lineal, es la absorción multifotónica, como explicamos en apartados anteriores, el fenómeno de absorción se produce cuando existe la energía suficiente para producir una transición electrónica; en un fenómeno de absorción multifotónica el compuesto puede absorber de manera simultánea y “sumados” alcanzar la energía de esa transición. Lo anterior se ve reflejado en irradiar con una luz de menor energía a una molécula y que ésta absorba y fluoresca como lo haría con una luz de energía mayor, como se ve en la Figura 18. Estos comportamientos ocurren debido a la estructura especial de estas moléculas, donde los electrones pueden moverse libremente a lo largo del sistema π -conjugado. Esta libertad de movimiento permite que los electrones respondan de manera compleja a campos eléctricos fuertes, como los producidos por la luz intensa.

Como resultado, se producen efectos no lineales que son útiles en diversas aplicaciones, como en la fabricación de láseres, dispositivos ópticos avanzados, y en la creación de materiales con propiedades ópticas únicas. Las moléculas que poseen segmentos que atraen electrones alternado con aquellos que los donan, favorece que las moléculas exhiban respuesta no lineal.

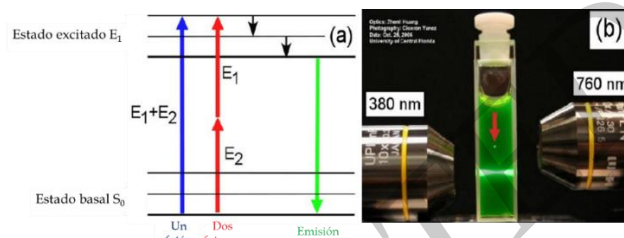


Figura 18: El proceso de absorción de dos fotones es un fenómeno óptico no lineal, en el la transición electrónica se logra mediante la absorción simultánea de dos o más fotones de menor energía. Utilizado con permiso de (Croissant et al., 2018), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

3.2 Propiedades electrónicas

La estructura descrita al inicio que distingue a un sistema π -conjugado permite el libre movimiento de los electrones a través de todo el sistema π conjugado. Podemos imaginar a los electrones como autos que circulan sobre una autopista, la autopista es el sistema π -conjugado. Por lo cual, estas moléculas exhiben propiedades electrónicas propias de su estructura molecular. A continuación, se describen las más relevantes.

3.2.1 Niveles de energía HOMO, LUMO

Una orbital molecular frontera en un sistema π -conjugado es como la "zona de acción" de los electrones en una molécula. Estos orbitales determinan cómo una molécula va a interactuar con la luz o con otras moléculas. Imagina que una molécula es un edificio de varios pisos. Los electrones están en diferentes niveles, y los niveles más importantes para las reacciones químicas y las propiedades electrónicas son los más altos ocupados y los más bajos vacíos. Estos niveles se llaman "orbitales moleculares de frontera". El más alto ocupado es el HOMO (por sus siglas en inglés, Highest Occupied Molecular Orbital), y el más bajo vacío es el LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). En la Figura 19 se representan dichos niveles de energía.

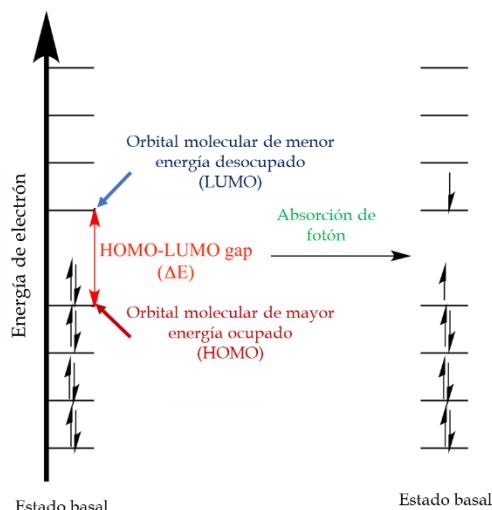


Figura 19. Representación de los niveles de energía de los orbitales moleculares de una molécula y la identificación de los orbitales frontera HOMO y LUMO.

En un sistema π -conjugado, estos orbitales están muy involucrados en cómo los electrones pueden moverse a través de la molécula, lo que es clave para las propiedades electrónicas. Por ejemplo, si tuvieras que subir una escalera, sería más sencillo avanzar escalón por escalón, a intentar omitir cuatro y brincar hacia el quinto, de esta forma, si una molécula tiene un pequeño "salto" entre el HOMO y el LUMO, es más fácil para los electrones moverse, lo que puede hacer que la molécula conduzca electricidad o responda a la luz de maneras interesantes. Los valores de los niveles de energía de HOMO y LUMO, dependen de la estructura molecular, por lo cual, en función del diseño de la molécula, ya sea pequeña o polímero se puede modificar los valores de dichos niveles de energía, como se puede ver en la Figura 20.

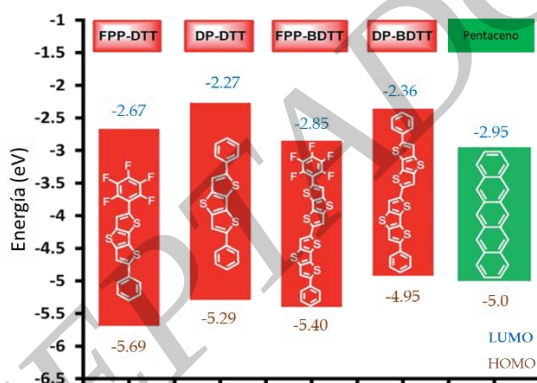


Figura 20. Niveles de energía de los orbitales frontera de derivados de tiofeno, se puede observar que cada molécula tiene diferente valor de los mismos Utilizada con permiso de (M. C. Chen et al., 2014), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

Esto es crucial para aplicaciones electrónicas, como en celdas solares, pantallas OLED, o sensores, donde se necesita que las moléculas sean capaces de mover electrones eficientemente o absorber/emitar luz de manera controlada. Estos orbitales frontera dictan qué tan "buena" será la molécula para estas tareas y de acuerdo al diseño molecular podemos seleccionar las moléculas de acuerdo a sus valores. Estos niveles de energía se pueden determinar experimentalmente por medio de una técnica electroquímica llamada "voltamperometría cíclica", donde se sumerge la molécula, por lo regular una

película de ella depositada sobre un material conductor, en una solución (electrolito) y se aplica un voltaje variable en ciclos, registrando la corriente a medida que la molécula gana o pierde electrones. Cuando la molécula pierde un electrón, se observa un pico en la corriente, lo que indica la oxidación. Este pico nos da información sobre el HOMO, ya que es donde los electrones están más fácilmente disponibles para salir. Cuando la molécula gana un electrón, otro pico aparece, indicando la reducción, relacionado con el LUMO, que es donde los electrones pueden entrar. Un ejemplo de la determinación de HOMO y LUMO por esta técnica se muestra en Figura 21.

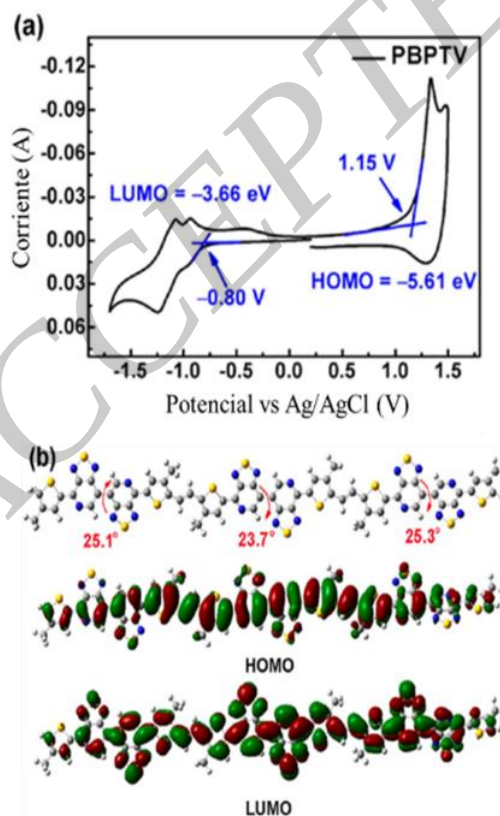


Figura 21: a) voltamperograma cíclico del polímero π -conjugado PBPTV, en el primer cambio en la curva durante el barrido de oxidación y reducción se determinan los valores experimentales de HOMO y LUMO respectivamente; b) representación gráfica de los orbitales frontera, las regiones de colores verde y rojo representan las regiones donde hay electrones en movimiento. Adaptada con permiso de (Zhu et al., 2017) J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 49, 17735–17738. Copyright © 2017 American Chemical Society.

En UPS se ilumina el compuesto con luz ultravioleta para expulsar electrones de los orbitales más altos ocupados (HOMO) al medir la energía de estos electrones expulsados, se determina la energía del HOMO. Para el LUMO se ocupa IPE, también se bombardea el compuesto con electrones, pero se mide cuánta energía pierden al entrar en la molécula, lo que indica la energía necesaria para llenar los orbitales vacíos (LUMO). Un ejemplo del empleo de estas técnicas se muestra en la Figura 22.

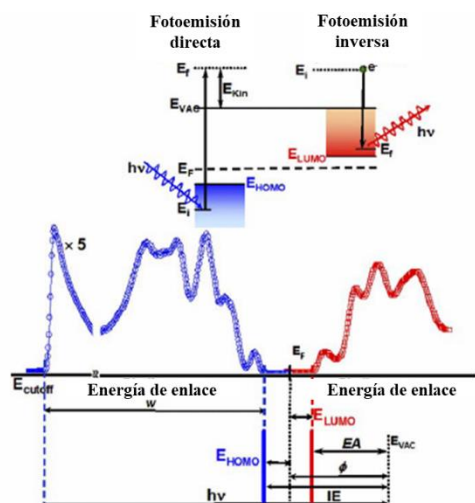


Figura 22: Los espectros de emisión de electrones (curva azul) y la de pérdida de electrones (rojo) se emplean para la determinación de HOMO y LUMO identificando el punto de caída del UPS y el inicio de IPE. Utilizado con permiso de (Zahn et al., 2006), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

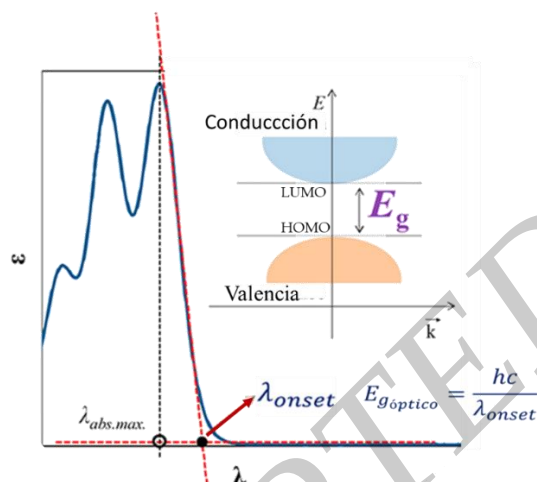


Figura 23: En moléculas con sistemas π -conjugados se puede determinar el bandgap a partir del espectro de absorción del compuesto. En la figura se representa la forma determinar que longitud de onda de ocupa para determinar la energía del fotón. Utilizado con permiso de (Costa et al., 2016), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

3.2.2 Bandgap

El "bandgap" en moléculas π -conjugadas es la cantidad de energía que se necesita para excitar un electrón de su posición estable a un estado donde puede moverse y participar en la conducción de electricidad. Imagina que los electrones están "descansando" en un nivel de energía y para que puedan "saltar" a un nivel más alto y hacer cosas como conducir electricidad o emitir luz, necesitan un empujón de energía. El bandgap óptico es ese "empujón" que se mide en términos de la luz (o fotones) que la molécula puede absorber o emitir. También ese empujón se le puede dar con un potencial eléctrico o con energía mecánica, lo cual, le confiere una gama amplia de aplicaciones en electrónica. El bandgap de un semiconductor orgánico es una propiedad electrónica porque define cómo los electrones se comportan dentro del material y cómo éste interactúa con la electricidad y la luz. En términos sencillos, el bandgap es la "barrera" que los electrones necesitan superar para moverse y conducir electricidad. Si el bandgap es muy grande, los electrones no pueden moverse fácilmente, y el material no conducirá electricidad bien. Si es muy pequeño, los electrones se moverán fácilmente, lo que es esencial para que el material funcione en dispositivos electrónicos, como celdas solares o pantallas. Por eso, el bandgap es clave para entender las propiedades electrónicas del material y cómo se puede usar en tecnología. El bandgap de un compuesto π -conjugado se suele estimar mediante un espectro de absorción (ver Figura 23) o bien mediante la diferencia entre el nivel de energía HOMO y LUMO que se estiman como se mencionó anteriormente (*vide supra*).

3.2.3 Movilidad de cargas

La movilidad de transportadores de cargas en sistemas π conjugados se refiere a la facilidad con la que los electrones (o "cargas") se mueven a través de un material que tiene una estructura de enlaces π conjugados. Como se ha mencionado, en un sistema π -conjugado, los electrones están más libres para moverse a lo largo de la molécula, lo que facilita el flujo de electricidad. La movilidad de los transportadores de carga es crucial porque determina cuán bien el material puede conducir electricidad. Valores entre $0.1\text{--}1\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ son considerando buenos para semiconductores orgánicos.

3.2.4 Efecto "push-pull"

El efecto push-pull en moléculas con sistemas π -conjugado es como un juego de "empujar y jalar" de electrones, ver Figura 24. En una molécula, una parte (el segmento donador de electrones) empuja los electrones hacia el otro lado, mientras que otra parte (el segmento aceptor de electrones) los jala hacia sí. Un segmento donador de electrones tiene la capacidad de "empujar" electrones hacia el resto de la molécula, es decir, tiene más electrones que puede compartir. Mientras un segmento aceptor de electrones "jala" o "acepta" electrones, porque le faltan o tiene espacio para ellos. Entre estas dos partes, hay un puente π , que es la carretera que permite que los electrones se muevan de un lado a otro. Este efecto puede hacer que la molécula tenga propiedades especiales, como cambiar de color o conducir electricidad de manera diferente. Lo cual da pie a la importancia de la selección de los segmentos y su naturaleza donadora o aceptora de electrones, propiciando así una enorme gama de moléculas de bajo peso molecular como copolímeros con sistema π -conjugados.

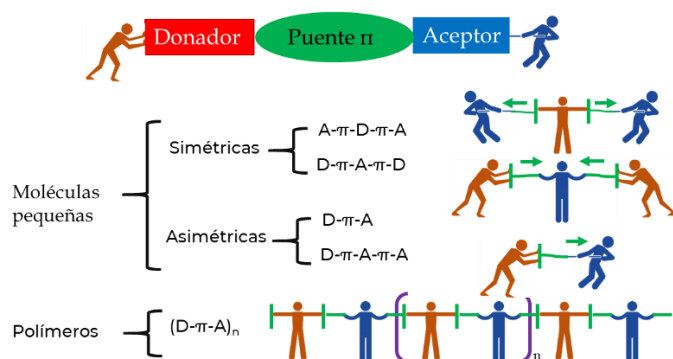


Figura 24. Efecto “push-pull”, el diseño molecular de las moléculas π -conjugadas emplea segmentos que actúen como donadores o aceptores de electrones, dando lugar a diferentes arquitecturas moleculares. Elaboración propia.

Tabla 3: Propiedades ópticas y electrónicas clave de los sistemas π -conjugados

Propiedad	Descripción
Absorción UV-Vis	Transición electrónica inducida por radiación UV-Visible; determina el color observado.
Emisión de fluorescencia	Emisión de luz tras la relajación desde un estado excitado; clave en aplicaciones optoelectrónicas.
Rendimiento cuántico	Fracción de fotones emitidos respecto a los absorbidos; mide la eficiencia luminosa del sistema.
AIE (Emisión inducida por agregación)	Aumento de la fluorescencia al agregarse las moléculas; útil en bioimagen y sensores en estado sólido.
Solvatocromismo	Cambio en absorción/emisión según el disolvente; permite el diseño de sensores ambientales o químicos.
Absortividad molar (ϵ)	Medida de la intensidad con la que un compuesto absorbe luz; se relaciona con la sensibilidad óptica.
Óptica no lineal	Respuesta no lineal a campos eléctricos intensos; base para materiales fotónicos y láseres avanzados.
Bandgap	Diferencia energética entre HOMO y LUMO; controla el color, la absorción y el comportamiento semiconductor.
Orbitales frontera (HOMO/LUMO)	Niveles energéticos de los orbitales de mayor energía ocupados y el de menor energía vacío; determinan la reactividad y las transiciones ópticas.
Efecto push–pull	Interacción electrónica entre dos segmentos, un segmento donador (push o “empuja”) de electrones y un segmento aceptor (pull o “jala”), que permite la deslocalización de electrones; reduce el gap y mejora la polarización electrónica.
Movilidad de cargas	Facilidad con la que se desplazan electrones o huecos cuando se aplica un campo eléctrico.

Deslocalización electrónica	Distribución extendida de electrones π a lo largo del sistema; estabiliza la molécula y mejora conducción.
Longitud de conjugación	Extensión del sistema π -conjugado; afecta el color y la eficiencia en el transporte de cargas.
Planaridad molecular	Geometría que favorece la conjugación y la agregación ordenada; mejora las propiedades electrónicas.
Interacciones supramoleculares	Fuerzas no covalentes como π – π stacking o enlaces H; modulan el autoensamblaje y el rendimiento funcional.

4. APLICACIONES DESTACADAS

4.1.1 Optoelectrónica

El área quizá que les brindó fama a los compuestos con sistema π -conjugado es la de optoelectrónica. En esta área los compuestos se emplean principalmente en la capa activa de los dispositivos. Por lo regular estos dispositivos se fabrican depositando de manera sucesiva películas nanométricas de diferentes materiales semiconductores, incluyendo a los compuestos π -conjugados que también se conocen como semiconductores orgánicos. Además de las propiedades específicas, se deben cumplir las moléculas para cada aplicación, deben de tener buena procesabilidad para formar películas uniformes y estables.

4.1.1 Celdas solares

Las moléculas con sistema π -conjugado son clave para absorber la luz solar y convertirla en electricidad. Por esta razón, de las propiedades más relevantes para los compuestos en esta aplicación destaca su amplio espectro de absorción y alta absortividad molar, para capturar la mayor cantidad de fotones de la luz solar; bandgap óptico bajo, para poder generar transportadores de carga y facilitar la generación de corriente eléctrica; niveles HOMO y LUMO que empaten con las diferentes capas de la celda solar, permitiendo que las cargas generadas por la irradiación solar lleguen a los electrodos y con ello la eficiente conversión de energía solar a eléctrica. Hablar de su aplicación en celdas solares abarca desde su aplicación en la película de la capa activa de una celda solar (Figura 25a), la cual está compuesta por lo menos por un material semiconductor orgánico donador y otro aceptor, donde hay una tendencia en el diseño y síntesis de materiales aceptores que no sean derivados de fullerenos (Yan et al., 2018); así mismo de su uso como capa transportadora de huecos (cargas positivas) (Ren et al., 2021) y/o electrones (carga negativa) (Said et al., 2019) en celdas de Perovskita (Figura 25b); o bien como colorantes fotosensibles en celdas solares sensibilizadas por tinte (Figura 25c), donde se están desarrollando colorantes solubles en medio acuoso que suelen ser derivados de colorantes naturales, convirtiendo a la celda más ecoamigable (Kim et al., 2022).

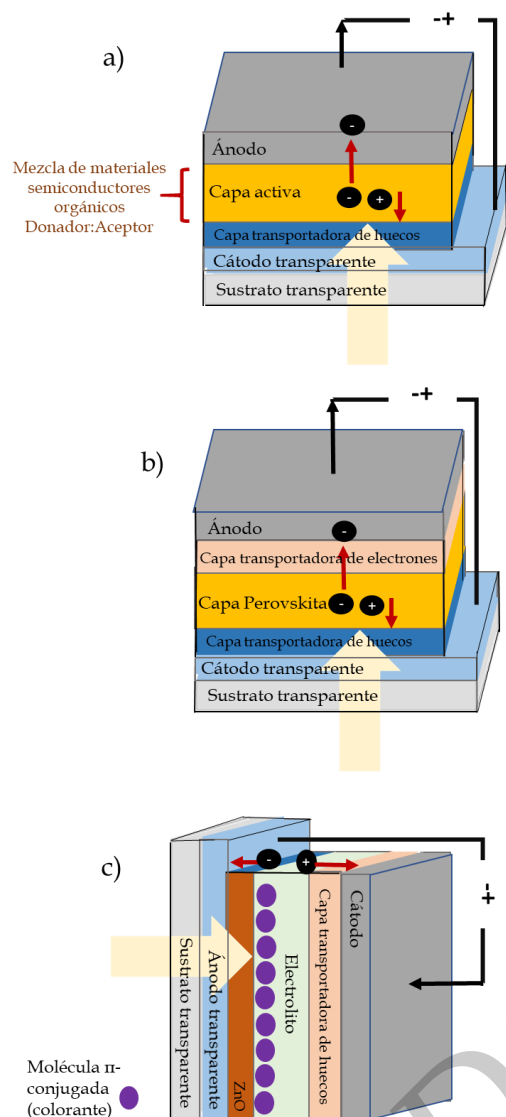


Figura 25. Diagramas de celdas solares en las que se emplean copolímeros y moléculas pequeñas π -conjugadas como semiconductores orgánicos, a) Celda solar orgánica, b) celda solar de Perovskita y c) celda solar sensibilizada por colorantes. Elaboración propia.

4.1.2. OLEDs (Diodos Orgánicos Emisores de Luz)

En las pantallas y luces OLED, estas moléculas emiten luz cuando pasa corriente eléctrica. La estructura π -conjugada permite que estas moléculas brillen con distintos colores y de manera eficiente, haciendo pantallas más brillantes y flexibles. Como es de suponer, los compuestos, polímeros o moléculas pequeñas deben de exhibir buenos rendimientos cuánticos de fluorescencia, y en específico electroluminiscencia. Los materiales deben empatar con los niveles de energía para la inyección de carga, por lo que los valores de los niveles de energía HOMO y LUMO. Otra característica atractiva es la de poseer carácter bipolar que permitan la formación de estables aniones y cationes estables (Duan et al., 2011). La coloración de los OLEDs depende de la longitud máxima de emisión, siendo los más atractivos actualmente la tendencia en esta área es el diseño y síntesis de emisores de luz azul, incrementar la eficiencia cuántica externa (EQE) y el empleo de compuestos con emisión inducida por agregación (AIEgens) (G. Wu et al.,

2024). La estructura típica de un OLED se presenta en la Figura 26.

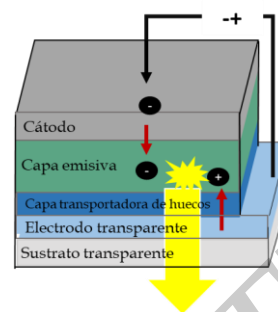


Figura 26. Diagramas de un dispositivo emisor de luz orgánico (OLED).

4.1.3 Transistores orgánicos delgados de campo (OFETs)

Estos son componentes clave en la electrónica que controlan el flujo de corriente. Usar moléculas con sistema π -conjugado en estos transistores permite que sean delgados y flexibles, ideales para pantallas y dispositivos portátiles. Además de los valores de HOMO y LUMO, es importante la movilidad de cargas para los materiales candidatos para esta aplicación (Allard et al., 2008). Debido a su cristalinidad, las moléculas “pequeñas” suelen tener la ventaja de que en estado sólido se ordenan muy bien. Esto conduce generalmente a una alta movilidad del portador de carga, ya que la movilidad depende principalmente de la interacción intermolecular (Cheon et al., 2022). La estructura típica de un OLED se presenta en la Figura 27.

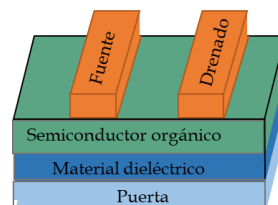


Figura 27: Diagramas de las capas que conforman a un OFET. Elaboración propia.

4.1.4 Óptica no lineal

En aplicaciones como lentes especiales, estas moléculas permiten modificar cómo se comporta la luz de manera compleja. Su sistema π -conjugado ayuda a manipular la luz para crear efectos ópticos únicos. Se han aplicado en el desarrollo de moduladores ópticos basados en polímeros electrópticos; en switches ópticos, en óptica computacional, entre otras.

4.1.5 Fotodetectores

Estos dispositivos detectan luz y la convierten en señales eléctricas. Las moléculas π -conjugadas en estos sensores permiten una detección más precisa y sensible de diferentes tipos de luz. Propiedades importantes para esta aplicación son: excelente respuesta espectral, detectividad, velocidades de respuesta y una eficiente separación de cargas.

4.1.6 Sensado

Los compuestos con sistema π -conjugado pueden ser utilizados para detectar sustancias específicas al cambiar de color o emitir luz. Esto es útil para monitorear condiciones ambientales, detectar gases peligrosos o incluso medir niveles de sustancias en el cuerpo. Dependiendo si se aprovecha un cambio en sus propiedades absorción o de emisión se pueden dividir en quimiosensores colorimétricos (Islas-Rodríguez et al., 2023) y fluorimétricos (Kaur & Choi, 2015), un empleo de ambos casos se muestra en la Figura 28. Una de las características relevantes para esta aplicación es que su método de sensado sea simple, tengan alta sensibilidad y que sea selectividad hacia el analito de interés, brindando una respuesta rápida (Kowser et al., 2021).

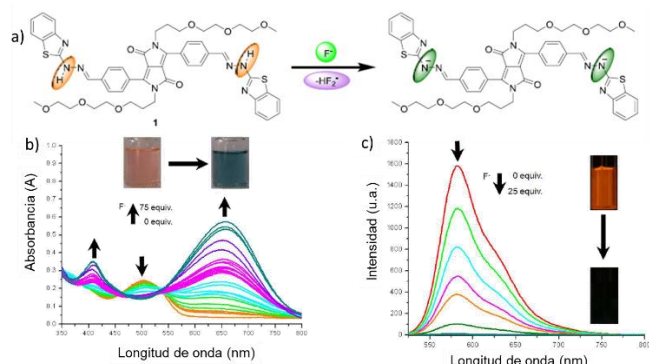


Figura 28: Quimiosensor colorimétrico y fluorométrico de ión fluor en medio acuoso, en el a) la reacción que da producto al cambio b) cambio colorimétrico y c) cambio en la intensidad de fluorescencia, produciendo en este caso un decaimiento de la misma en presencia del ión sensado. Utilizada con permiso de (X. Yang et al., 2015), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

4.2 Aplicaciones biomédicas

Los compuestos con sistema π -conjugados han despertado el interés también en aplicaciones biomédicas, donde se han aprovechado principalmente sus propiedades ópticas para ser empleados en el diagnóstico y obtención de bioimágenes, en el sensado de especies químicas de interés biológico y en terapia. La mayoría de los compuestos π -conjugados son hidrófobos, es decir, no se disuelven en agua, y el medio biológico es un medio acuoso, por lo que para que la mayoría de los compuestos sean viables para ser empleados en aplicaciones donde deben entrar dentro de las células se procesan como nanopartículas, partículas muy pequeñas en el orden 10^{-9} m. Las nanopartículas orgánicas logran ser biocompatibles al ser recubiertas por un material biocompatible como pueden ser algunos polímeros. Adicional a esto las nanopartículas pueden ser modificadas superficialmente para hacerlas selectivas a ciertos tipos de células. Es como ponerles un señuelo para que las células cancerosas por ejemplo las atraigan y con ello puedan cumplir su función de diagnóstico, biosensado o terapéutico. El método más empleado para la fabricación de nanopartículas orgánicas es el de reprecipitación, donde a partir de una solución en un disolvente orgánico de la molécula conjugada se añade poco a poco, regularmente bajo baño ultrasónico a una solución acuosa donde puede o no estar presente un surfactante, algún derivado de silanos o biopolímeros biocompatibles (Grimsdale & Müllen, 2005), como se muestra en la Figura 29.

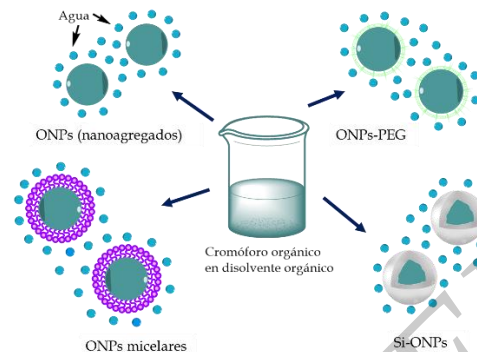


Figura 29: Fabricación de nanopartículas orgánicas por el método de reprecipitación. Utilizada con permiso de (Aparicio-Ixta et al., 2016), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

4.2.1 Bioimagen

Estos compuestos se utilizan para obtener imágenes detalladas del interior del cuerpo, como en una resonancia magnética o una tomografía. Emiten luz o cambian de color para destacar áreas de interés en las imágenes médicas. Dos propiedades que suelen ser primordiales para una posible aplicación como agente de contraste son que exhiban AIE y que posea fluorescencia de excitación de dos fotones (Zhang, Fang, et al., 2020). En el caso de la primera, recordaremos que algunas moléculas fluorescentes con gran intensidad conforme se van agregando, es decir, en sólido (*vide supra*). Como muchos agentes de contraste basados en compuestos π -conjugados se procesan como nanopartículas, es necesario que emitan en estado sólido. En el segundo caso, al tratarse de células, la fluorescencia debería de obtenerse irradiando con luz que no sea agresiva con el tejido, como muchos agentes de contraste absorben en la región entre el ultravioleta y el verde que son longitudes de onda muy energéticas, el que los compuestos absorban dos fotones de menor energía y obtener la emisión es primordial (M. Yang et al., 2021). De esta forma se puede irradiar con una luz roja o en el cercano infrarrojo y no causar daño al tejido y provocar que los compuestos fluorescan y así obtener la bioimagen. Un ejemplo del uso de nanopartículas orgánicas con absorción de dos fotones empleadas en bioimagen se presenta en Figura 30.

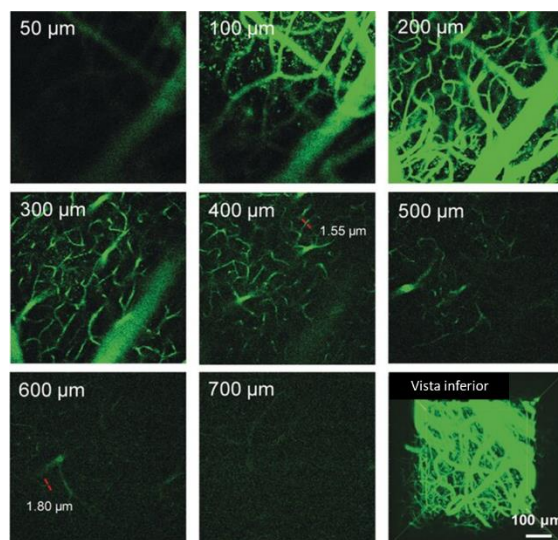


Figura 30: Imágenes de microscopia de excitación de dos fotones *in vivo* de la vasculatura cortical teñida con nanopartículas de TBP-b-TPA a varias profundidades y reconstrucción 3D de la vasculatura desde la parte superior

hasta una profundidad de 700 μm . Longitud de onda de excitación: 1040 nm (50 MHz). Espejo dicróico para la recolección de fluorescencia de dos fotones: paso corto de 800 nm. Utilizada con permiso de (Y. Li, Liu, et al., 2020), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

4.2.2 Biosensado

Permiten detectar biomoléculas específicas, como marcadores de enfermedades, al cambiar de color o emitir luz en presencia de estas moléculas. Esto ayuda a hacer diagnósticos más rápidos y precisos. Ya habíamos descrito la aplicación en sensado, decidimos incluirla en el área de aplicaciones biomédicas, porque además de las propiedades descritas para el sensado en general, un excelente biosensor debe ser biocompatible, no tóxico por supuesto. Además, hay una tendencia hacia el desarrollo de materiales multifuncionales, por ejemplo, un material que permita el biosensado y la obtención de bioimágenes de manera simultánea o incluso también el efecto terapéutico. En la Figura 31 se presenta un ejemplo del uso de un compuesto π -conjugado derivado de cumarina y carbazol (COZ-DNB) como sensor de ácido sulfhídrico en peces cebra. El tratamiento de peces cebra con COZ-DNB (10 μM) durante 30 minutos permitió detectar una señal amarilla débil de H_2S endógeno. Al inhibir el H_2S con ZnCl_2 y luego teñir con COZ-DNB, la fluorescencia volvió al nivel del grupo control. Peces pretratados con cisteína, que induce H_2S endógeno, mostraron una fluorescencia amarilla significativa, y una fuerte fluorescencia se observó al añadir H_2S exógeno. Estos resultados sugieren que COZ-DNB puede detectar H_2S tanto endógeno como exógeno en bioimágenes de pez cebra (Tong et al., 2022).

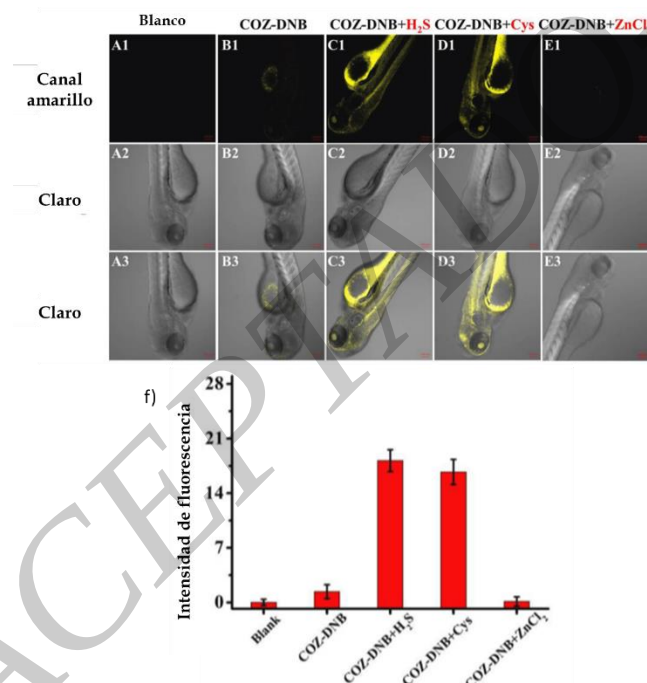


Figura 31: Imágenes de fluorescencia de pez cebra vivo. (A) Pez cebra vivo. (B) El pez cebra se alimentado únicamente con COZ-DNB (10,0 μM). (C) El pez cebra pretratado con H_2S (200 μM) y COZ-DNB (10,0 μM). (D) El pez cebra estimulado (400,0 μM para Cys) y tratado con COZ-DNB (10,0 μM). (E) El pez cebra inhibido con ZnCl_2 se incubó nuevamente en COZ-DNB (10,0 μM). (F) Intensidad de fluorescencia del pez cebra con diferentes estimulantes según (A-E). Longitud de onda de excitación: 405.0 nm. Utilizada con permiso de (Tong et al., 2022), permiso otorgado a través de Copyright Clearance Center, Inc.

4.2.3 Terapia

En tratamientos médicos, estas moléculas pueden ser usadas para dirigir medicamentos a lugares específicos del cuerpo o para tratar células enfermas, utilizando la luz para activar o liberar medicamentos solo en las áreas necesarias. Existen una gran cantidad de fármacos que son sistemas π -conjugados, en ese caso la molécula en sí es el método de terapia. Pero en otros casos como es la terapia fotodinámica, el compuesto participa de manera indirecta en el proceso terapéutico. La terapia fotodinámica consiste en irradiar con una fuente de luz una región donde existan células cancerosas, se introduce un compuesto π -conjugado, ya sea polímero, molécula pequeña o algún organometálico, y este compuesto se activa y al estar dentro de la célula cancerosa activa a su vez al oxígeno celular y le recuerda a la célula que debe morir. Respecto a los requisitos, estos compuestos deben tener un alto coeficiente de absorptividad molar (entre 650nm y 800 nm), llamada región de terapia fotodinámica; además, deben poseer una buena estabilidad química y a la luz; excelente activación del oxígeno molecular (generación de especies reactivas de oxígeno), entre otras. El proceso de la terapia fotodinámica es representado en la Figura 32a (Kolarikova et al., 2023). Cai y colaboradores en el 2016 reportaron un fotosensibilizador derivado de dicetopirrolpirrolo con un rendimiento de generación de especies reactivas de oxígeno (ROS) del 16.2%, en la Figura 32b se presenta la evidencia grafica de la efectividad del fotosensibilizador en la reducción del tumor (Cai et al., 2016).

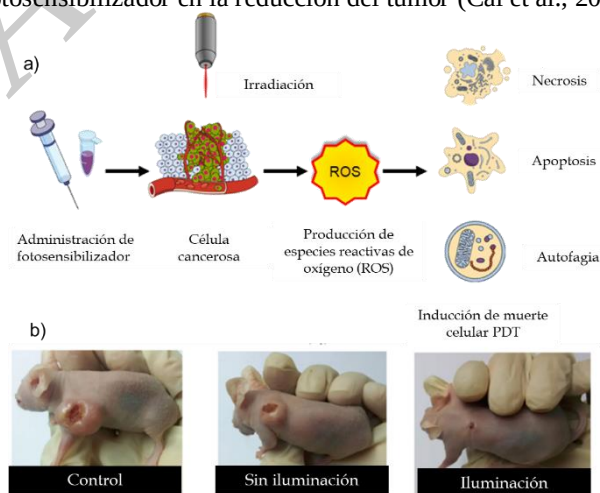


Figura 32: a) Proceso de la terapia fotodinámica. Adaptada con permiso de (Kolarikova et al., 2023), permisos otorgados a través de Copyright Clearance Center, Inc. b) fotografías del estudio in vivo en ratones, donde se aprecia el efecto del fotosensibilizador cuando se irradia. Adaptada con permiso de (Cai et al., 2016) ACS Appl. Mater. Interfaces 2016, 8, 17, 10737–10742. Copyright © 2016 American Chemical Society.

4.2.4 Bioelectrónica implantable

Los polímeros π -conjugados son prometedores para la bioelectrónica implantable debido a su flexibilidad, extensibilidad y facilidad de modificación química. Sin embargo, muchos materiales actuales provienen de compuestos diseñados originalmente para electrónica orgánica y solo se les hacen modificaciones leves, lo cual puede limitar su desempeño como biomateriales en términos de biocompatibilidad, estabilidad y otras exigencias del ciclo de vida completo, ver Figura 33a. Por lo anterior, aún hay áreas de oportunidad como lo son su biodegradabilidad y biocompatibilidad a largo plazo. Un caso prometedor por

ejemplo es el de Liang y colaboradores desarrollaron un hidrogel conductor, biocompatible y pintable, mediante la polimerización in situ de pirrol y dopamina activada por Fe^{3+} , junto con la complejación simultánea de gelatina. En este sistema, el Ppy (polipirrol) se une químicamente a cadenas de polímeros hiperramificados, actuando como entrecruzante para estabilizar la red y dotarla de conductividad, superando problemas de solubilidad y separación de fases. El hidrogel resultante se adhiere rápida y eficazmente a superficies húmedas como la del corazón, gracias a la complejación dopamina- Fe^{3+} , evitando fugas y promoviendo tanto la función cardíaca como la conducción electrofisiológica y la revascularización del miocardio infartado (Liang et al., 2018).

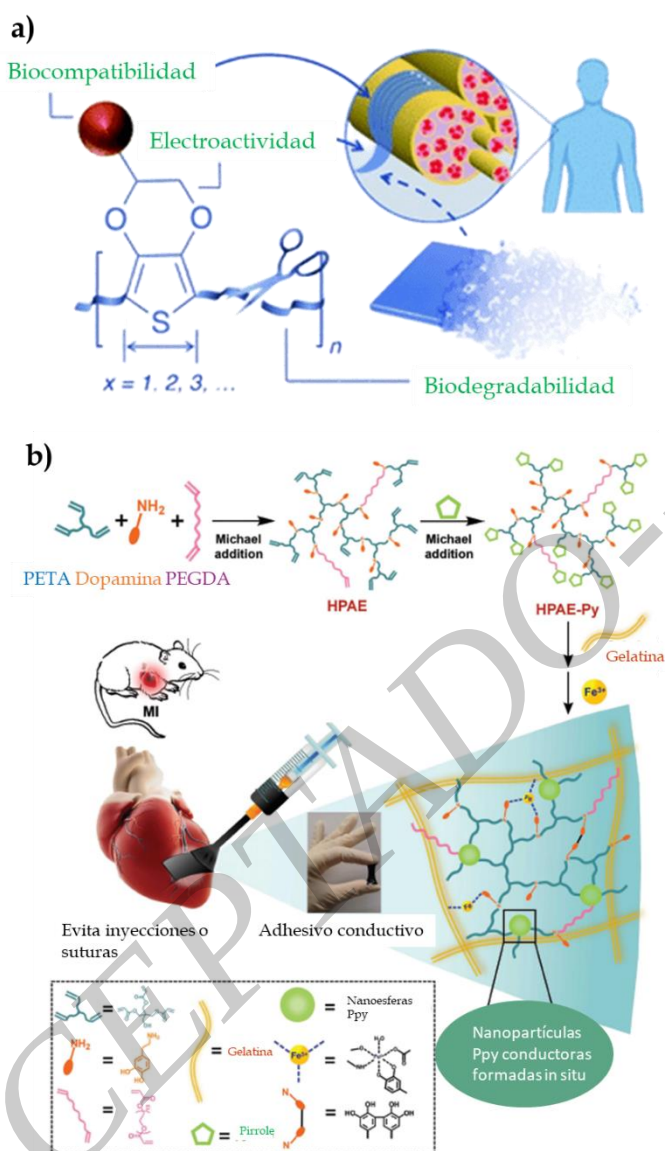


Figura 33: a) Propiedades fundamentales para un material π -conjugado para bioelectrónica implantable (Tropp & Rivnay, 2021), b) Material bioelectrónico implantable, un parche para el miocardio a base de dopamina, formación de un hidrogel conductor y adhesivo, y su aplicación mediante pintura directamente sobre la superficie del corazón con infarto de miocardio en ratas. Adaptados con permiso de (Tropp & Rivnay, 2021) y (Liang et al., 2018), permisos otorgados a través de Copyright Clearance Center, Inc.

4.3 Fotocatálisis

Aquí, las moléculas π -conjugadas ayudan a acelerar reacciones químicas usando luz. Esto es útil para limpiar contaminantes

del agua o aire, descomponiendo sustancias dañinas de manera más eficiente cuando se exponen a la luz. Se suelen procesar también como materiales nanométricos, propiedades indispensables para esta aplicación que deben poseer las moléculas con sistema π -conjugado son: alto coeficiente de extinción molar y amplio espectro de absorción; alta eficiencia de separación y migración de cargas para reacciones redox superficiales y alineamientos apropiados de los niveles de energía HOMO y LUMO. Esta área es muy amplia, ver Figura 34, ya que son aplicados en evolución de hidrógeno y oxígeno a partir del agua; en la reducción de dióxido de carbono y su transformación en metanol; en la catálisis de reacciones orgánicas, algunas de ellas empujadas para la síntesis de más compuestos π -conjugados; y en la degradación de colorantes y fármacos.



Figura 34: Diferentes tipos de aplicaciones donde materiales basados en moléculas π -conjugadas actúan como fotocatalizadores. Adaptado con permiso de (Dai & Liu, 2020), permisos otorgados a través de Copyright Clearance Center, Inc.

5. DESAFÍOS Y CONSIDERACIONES ÉTICAS

El desarrollo de compuestos π -conjugados enfrenta múltiples retos interconectados, que van desde el ámbito de investigación y diseño molecular, hasta consideraciones más humanas como lo son desafíos éticos que demandan un enfoque integrado para garantizar su desarrollo responsable. Uno de los principales desafíos en el campo de los semiconductores orgánicos es que aún no se comprende por completo el conjunto de principios que rigen su diseño. En este contexto, los métodos computacionales representan una herramienta clave para complementar los resultados experimentales, ya que permiten obtener conocimientos profundos sobre las relaciones entre estructura, procesamiento y propiedades de los OSC. Sin embargo, la evolución de estas metodologías, desde los enfoques cuántico-químicos iniciales hasta las técnicas modernas de aprendizaje automático (Machine Learning) ha enfrentado limitaciones importantes, lo que ha requerido el desarrollo de marcos físicos y matemáticos más sofisticados para poder abordar problemas de creciente complejidad. Persisten retos como la predicción precisa del transporte de carga, la simulación de conformaciones moleculares y morfologías a granel, y la estimación confiable de propiedades termomecánicas y de transporte térmico en sistemas basados en polímeros y moléculas π -conjugadas (Bhat et al., 2023). A pesar de los avances, sigue siendo un desafío central mejorar la precisión, eficiencia y capacidad predictiva

de estas herramientas para acelerar el descubrimiento y optimización de materiales con sistema conjugados con aplicaciones en tecnologías emergentes como OPVs, OLEDs, termoelectrónicos orgánicos, biosensores implantables y agentes de diagnóstico y terapéuticos.

Otro desafío importante en el desarrollo de materiales π -conjugados es lograr una polimerización controlada —como en mecanismos de crecimiento por etapas (step-growth) o síntesis iterativa— que permita un control preciso sobre la estructura de copolímeros conjugados y COFs (Covalent Organic Frameworks) (Xu et al., 2023). Este control estructural es fundamental para modular de manera efectiva sus propiedades electrónicas, ópticas y mecánicas. Sin embargo, aún existen limitaciones asociadas a la relación entre la sintetizabilidad de estos materiales y las propiedades funcionales deseadas, lo cual restringe su aplicación práctica (Reynolds, 2013). Estas barreras ponen de relieve la necesidad de estrategias sintéticas más precisas y reproducibles que permitan escalar materiales funcionales con alto grado de orden y uniformidad.

A nivel de costos y sostenibilidad, la síntesis de materiales π -conjugados requiere múltiples pasos, purificaciones rigurosas, y catalizadores metálicos tóxicos, lo que encarece y complida el escalado a nivel industrial. Sin embargo, un reciente estudio destaca rutas más eficientes (vía C-H, direct arylation coupling) capaces de reducir etapas y toxicidad, y con ello, favorece producción comercial. Y, de complementarse con el uso de solventes benignos, catálisis con biomasa o polimerización fotoiniciada, se mitigaría el impacto ambiental. (Beena Unni & Muringayil Joseph, 2024; Cheng & Gross, 2023). Finalmente, en lo que atañe a reproducibilidad, se han mostrado mejoras en procesos como síntesis continua tipo flujo, como en la producción de PTB7, que redujo la variabilidad del peso molecular de un 66% a un 3% aprox. Lo que no solo estabiliza las propiedades, sino que permite escalabilidad real hacia la industria. (Shin et al., 2021).

En cuanto a las consideraciones éticas, la seguridad y la toxicidad potencial de las nuevas moléculas requieren evaluaciones exhaustivas para proteger la salud humana y el medio ambiente, siguiendo normas estrictas de seguridad. También es fundamental mitigar el impacto ambiental mediante procesos sostenibles que reduzcan la generación de residuos peligrosos (Groh et al., 2022). El uso responsable de estas tecnologías debe garantizar que sus aplicaciones no se desvíen hacia fines nocivos, como armamento o sustancias peligrosas. Del mismo modo, se debe trabajar por un acceso equitativo a los beneficios de estos avances, evitando que se concentren solo en ciertos sectores o regiones (Yeboah et al., 2024). Finalmente, cuando se apliquen en contextos biomédicos, es indispensable asegurar el consentimiento informado de los pacientes y respetar plenamente sus derechos, lo que refuerza la necesidad de un enfoque ético y centrado en el bienestar humano (Brown et al., 2020; Kashi & Saha, 2017).

6. PERSPECTIVAS FUTURAS

Con base a los avances recientes en el diseño, síntesis y las aplicaciones de los materiales con sistema π -conjugado, se prevé que el desarrollo de moléculas π -conjugadas continuará evolucionando hacia arquitecturas electrónicas más funcionales, sostenibles y adaptables. En OLEDs, la tendencia continuará en la síntesis de emisores tipo AIEgens con emisión

azul. En celdas solares orgánicas, la tendencia apunta a combinar moléculas pequeñas como materiales tipo n con polímeros conjugados tipo p, mientras que en DSSCs se investigan colorantes D-A, complejos organometálicos y opciones sostenibles basadas en colorantes naturales con electrolitos acuosos. En celdas de perovskita, un área que continuará es el desarrollo de moléculas de bajo peso molecular con HOMO y LUMO adecuados para capas transportadoras de electrones o huecos. En OFETs, el enfoque está en moléculas que promuevan la cristalinidad y sistemas sensibles al ambiente, útiles en sensado y biosensado, incluyendo materiales ambipolares.

Por otro lado, el diseño de estructuras D- π -A y complejos organometálicos con respuesta óptica no lineal para aplicaciones en óptica avanzada, debe de tener en cuenta la procesabilidad y la estabilidad térmica de este tipo de moléculas. Continuarán los avances en quimiosensores colorimétricos y fluorimétricos basados en nanoagregados coloidales para detección de metales pesados, y en sistemas π -conjugados utilizados en bioimagen, biosensado y terapia fotodinámica, con diseños que permitan aplicaciones simultáneas. La bioelectrónica implantable, por su parte, ha dado pasos importantes con la incorporación de polímeros y COFs conductores con propiedades mecánicas adaptativas, capaces de integrarse de manera mínimamente invasiva en tejidos blandos para monitoreo y estimulación eléctrica; tal como se mencionó, la tendencia será el este tipo de materiales posean una biocompatibilidad a largo plazo y biodegradabilidad inherente. Finalmente, en fotocatalisis, los materiales π -conjugados, especialmente en forma de nanopartículas porosas, muestran gran potencial en la evolución de H_2 y O_2 , reducción de CO_2 y degradación de contaminantes, consolidando así su relevancia en tecnologías limpias y medicina. entre la electrónica orgánica y la biotecnología.

Estas tendencias sugieren que el futuro de las moléculas π -conjugadas se orienta hacia una mayor personalización funcional, integración con materiales híbridos y adaptación a entornos dinámicos, consolidándolas como materiales estratégicos para tecnologías sustentables, inteligentes y orientadas a la vida real. Un área aún por explorar y profundizar es la obtención de estos materiales a partir de fuentes naturales de origen vegetal, para su extracción, purificación y modificación química. La sinergia entre síntesis racional, modelado computacional y dispositivos integrados será clave para transformar estos materiales en soluciones concretas frente a desafíos energéticos, ambientales y de salud global.

7. Información complementaria

- Khan Academy Español. (2015/ 11/ Oct). Conjugación y color [Video]. YouTube. Recuperado de: https://www.youtube.com/watch?v=HjP7_8qfewQ
- Santos Valera, J., (2018). Polimerización supramolecular de sistemas π -conjugados: Control termodinámico y cinético. Dialnet. Recuperado de: <https://hdl.handle.net/20.500.14352/17108>
- Ondarse Álvarez, D. (2024/ 06/ Ago). Polímeros. Enciclopedia Concepto. Recuperado de: <https://concepto.de/polimeros/>
- Ondarse Álvarez, D. (2024/ 03/ Ago). Macromoléculas. Enciclopedia Concepto. Recuperado de: <https://concepto.de/macromoleculas/>
- Breaking Vlad. (2019/ 20/ Ene). Teoría de orbitales moleculares Introducción [Video]. YouTube. Recuperado de: <https://www.youtube.com/watch?v=MES3-4jnbF4>

Khan Academy Español. (2015/ 11/ Oct). Absorción en la región visible [Video]. YouTube. Recuperado de: <https://www.youtube.com/watch?v=FaaiZjaqCqo>
 Estrada Flores, S., Garcías Morales, C., Mirón Velázquez, R., Pérez Berumen, C., & Cruz Duran, F. (2022). Una Introducción a la Electrónica Orgánica. Educación química, 33(2), 3-17. Recuperado de: <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2022.2.79879>

Referencias

- Allard, S., Forster, M., Souharce, B., Thiem, H., & Scherf, U. (2008). Organic semiconductors for solution-processable field-effect transistors (OFETs). In *Angewandte Chemie - International Edition* (Vol. 47, Issue 22, pp. 4070–4098). <https://doi.org/10.1002/anie.200701920>
- Aparicio-Ixta, L., Rodriguez, M., & Ramos-Ortiz, G. (2016). Organic Nanomaterials with Two-Photon Absorption Properties for Biomedical Applications. In *Contemporary Optoelectronics: Materials, Metamaterials and Device Applications* (pp. 25–50). https://doi.org/10.1007/978-94-017-7315-7_2
- Beena Unni, A., & Muringayil Joseph, T. (2024). Enhancing Polymer Sustainability: Eco-Conscious Strategies. In *Polymers* (Vol. 16, Issue 13). Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). <https://doi.org/10.3390/polym16131769>
- Bhat, V., Callaway, C. P., & Risko, C. (2023). Computational Approaches for Organic Semiconductors: From Chemical and Physical Understanding to Predicting New Materials. *Chemical Reviews*, 123(12), 7498–7547. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00704>
- Bolaños Ch, L., & Alvarez, L. X. (2018). *POLÍMEROS CONDUCTORES: APLICACIONES EN CELDAS FOTOVOLTAICAS Y DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS*. 34(1), 18–38.
- Brown, B. N., Haschak, M. J., Nolfi, A. L., & Kulkarni, M. (2020). Moral and Ethical Issues in the Development of Biomaterials and Medical Products. In *Biomaterials Science* (pp. 1509–1517). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816137-1.00098-2>
- Cai, Y., Tang, Q., Wu, X., Si, W., Zhang, Q., Huang, W., & Dong, X. (2016). Bromo-Substituted Diketopyrrolopyrrole Derivative with Specific Targeting and High Efficiency for Photodynamic Therapy. *ACS Applied Materials and Interfaces*, 8(17), 10737–10742. <https://doi.org/10.1021/acsami.6b01533>
- Chen, C. Y., Pootrakulchote, N., Wu, S. J., Wang, M., Li, J. Y., Tsai, J. H., Wu, C. G., Zakeeruddin, S. M., & Grätzel, M. (2009). New ruthenium sensitizer with carbazole antennas for efficient and stable Thin-film Dye-sensitized solar cells. *Journal of Physical Chemistry C*, 113(48), 20752–20757. <https://doi.org/10.1021/jp9089084>
- Chen, D., Li, W., Gan, L., Wang, Z., Li, M., & Su, S. J. (2020). Non-noble-metal-based organic emitters for OLED applications. In *Materials Science and Engineering R: Reports* (Vol. 142). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2020.100581>
- Chen, M. C., Vegiraju, S., Huang, C. M., Huang, P. Y., Prabakaran, K., Yau, S. L., Chen, W. C., Peng, W. T., Chao, I., Kim, C., & Tao, Y. T. (2014). Asymmetric fused thiophenes for field-effect transistors: Crystal structure-film microstructure-transistor performance correlations. *Journal of Materials Chemistry C*, 2(42), 8892–8902. <https://doi.org/10.1039/c4tc01454e>
- Cheng, H. N., & Gross, R. A. (2023). The Pursuit for Sustainable Green Chemistry in Polymer Research. In *ACS Symposium Series* (Vol. 1450, pp. 1–14). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/bk-2023-1450.ch001>
- Cheon, H. J., An, T. K., & Kim, Y. H. (2022). Diketopyrrolopyrrole (DPP)-Based Polymers and Their Organic Field-Effect Transistor Applications: A Review. In *Macromolecular Research* (Vol. 30, Issue 2, pp. 71–84). Polymer Society of Korea. <https://doi.org/10.1007/s13233-022-0015-y>
- Chiang, C. K., Fincher, C. R., Park, Y. W., Heeger, A. J., Shirakawa, H., Louis, E. J., Gau, S. C., & MacDiarmid, A. G. (1977). Electrical Conductivity in Doped Polyacetylene. *Physical Review Letters*, 39(17), 1098–1101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.39.1098>
- Choi, T. L., Lee, K. H., Joo, W. J., Lee, S., Lee, T. W., & Mi, Y. C. (2007). Synthesis and nonvolatile memory behavior of redox-active conjugated polymer-containing ferrocene. *Journal of the American Chemical Society*, 129(32), 9842–9843. <https://doi.org/10.1021/ja0717459>
- Choi, T.-L., Lee, K.-H., Joo, W.-J., Lee, S., Lee, T.-W., & Chae, M. Y. (2007). Synthesis and Nonvolatile Memory Behavior of Redox-Active Conjugated Polymer-Containing Ferrocene. *Journal of the American Chemical Society*, 129(32), 9842–9843. <https://doi.org/10.1021/ja0717459>
- Costa, J. C. S., Taveira, R. J. S., Lima, C. F. R. A. C., Mendes, A., & Santos, L. M. N. B. F. (2016). Optical band gaps of organic semiconductor materials. *Optical Materials*, 58, 51–60. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2016.03.041>
- Croissant, J. G., Zink, J. I., Raehm, L., & Durand, J. O. (2018). Two-Photon-Excited Silica and Organosilica Nanoparticles for Spatiotemporal Cancer Treatment. In *Advanced Healthcare Materials* (Vol. 7, Issue 7). Wiley-VCH Verlag. <https://doi.org/10.1002/adhm.201701248>
- Cui, Y., Yan, J., Chen, Z., Xing, W., Ye, C., Li, X., Zou, Y., Sun, Y., Liu, C., Xu, W., & Zhu, D. (2020). Synthetic Route to a Triphenylenehexaselenol-Based Metal Organic Framework with Semi-conductive and Glassy Magnetic Properties. *IScience*, 23(1). <https://doi.org/10.1016/j.isci.2019.100812>
- Dai, C., & Liu, B. (2020). Conjugated polymers for visible-light-driven photocatalysis. In *Energy and Environmental Science* (Vol. 13, Issue 1, pp. 24–52). Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/c9ee01935a>
- Deng, P., & Zhang, Q. (2014). Recent developments on isoindigo-based conjugated polymers. *Polymer Chemistry*, 5(10), 3298–3305. <https://doi.org/10.1039/c3py01598j>
- Du, M., Chen, Y., Li, J., Geng, Y., Ji, H., Li, G., Tang, A., Guo, Q., & Zhou, E. (2020a). Wide-Band-Gap Phthalimide-Based D- π -A Polymers for Nonfullerene

- Organic Solar Cells: The Effect of Conjugated π -Bridge from Thiophene to Thieno[3,2- b]thiophene. *Journal of Physical Chemistry C*, 124(1), 230–236. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10580>
- Du, M., Chen, Y., Li, J., Geng, Y., Ji, H., Li, G., Tang, A., Guo, Q., & Zhou, E. (2020b). Wide-Band-Gap Phthalimide-Based D- π -A Polymers for Nonfullerene Organic Solar Cells: The Effect of Conjugated π -Bridge from Thiophene to Thieno[3,2- b]thiophene. *Journal of Physical Chemistry C*, 124(1), 230–236. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10580>
- Duan, L., Qiao, J., Sun, Y., & Qiu, Y. (2011). Strategies to design bipolar small molecules for OLEDs: Donor-acceptor structure and non-donor-acceptor structure. *Advanced Materials*, 23(9), 1137–1144. <https://doi.org/10.1002/adma.201003816>
- Eggink, L. L., Park, H., & Hooper, J. K. (2001). The role of chlorophyll b in photosynthesis. *BMC Plant Biology*, 1(1), 2. <https://doi.org/10.1186/1471-2229-1-2>
- Eom, Y. K., Choi, I. T., Kang, S. H., Lee, J., Kim, J., Ju, M. J., & Kim, H. K. (2015). Thieno[3,2- b][1]benzothiophene Derivative as a New π -Bridge Unit in D- π -A Structural Organic Sensitizers with over 10.47% Efficiency for Dye-Sensitized Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, 5(15). <https://doi.org/10.1002/aenm.201500300>
- Feng, G., & Liu, B. (2018). Aggregation-Induced Emission (AIE) Dots: Emerging Theranostic Nanolights [Research-article]. *Accounts of Chemical Research*, 51(6), 1404–1414. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.8b00060>
- Foerier, S., Kolmychek, I. A., Aktsipetrov, O. A., Verbiest, T., & Valev, V. K. (2009). Optical second harmonic generation chiral spectroscopy. *ChemPhysChem*, 10(9–10), 1431–1434. <https://doi.org/10.1002/cphc.200900045>
- Garcias-Morales, C., Romero-Borja, D., Maldonado, J. L., Roa, A. E., Rodríguez, M., García-Merinos, J. P., & Ariza-Castolo, A. (2017). Small Molecules Derived from Thieno[3,4- c]pyrrole-4,6-dione (TPD) and Their Use in Solution Processed Organic Solar Cells. *Molecules*, 22(10). <https://doi.org/10.3390/molecules22101607>
- Grimsdale, A. C., & Müllen, K. (2005). The chemistry of organic nanomaterials. *Angewandte Chemie - International Edition*, 44(35), 5592–5629. <https://doi.org/10.1002/anie.200500805>
- Groh, K. J., Arp, H. P. H., MacLeod, M., & Wang, Z. (2022). Assessing and managing environmental hazards of polymers: historical development, science advances and policy options. In *Environmental Science: Processes and Impacts* (Vol. 25, Issue 1, pp. 10–25). Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/d2em00386d>
- Hayat, A., Rahman, M. U., Khan, I., Khan, J., Sohail, M., Yasmeen, H., Liu, S. Y., Qi, K., & Lv, W. (2019). Conjugated electron donor-acceptor hybrid polymeric carbon nitride as a photocatalyst for CO₂ reduction. *Molecules*, 24(9). <https://doi.org/10.3390/molecules24091779>
- Heeger, A. J. (2001). Semiconducting and metallic polymers: The fourth generation of polymeric materials (nobel lecture). In *Angewandte Chemie - International Edition* (Vol. 40, Issue 14, pp. 2591–2611). [https://doi.org/10.1002/1521-3773\(20010716\)40:14<2591::AID-ANIE2591>3.0.CO;2-0](https://doi.org/10.1002/1521-3773(20010716)40:14<2591::AID-ANIE2591>3.0.CO;2-0)
- Hernández-Ortiz, O. J., Castro-Monter, D., Rodríguez Lugo, V., Moggio, I., Arias, E., Reyes-Valderrama, M. I., Veloz-Rodríguez, M. A., & Vázquez-García, R. A. (2023). Synthesis and Study of the Optical Properties of a Conjugated Polymer with Configurational Isomerism for Optoelectronics. *Materials*, 16(7). <https://doi.org/10.3390/ma16072908>
- Hernández-Ortiz, O. J., Rodríguez, M., Vázquez-García, R. A., Ayala, K. A., Rodríguez, M. A. V., Espinosa-Roa, A., & Maldonado, J.-L. (2025). Theoretical-experimental correlation of Voc in isoindigo-based small molecules for photovoltaic applications. *Chemical Physics Impact*, 10, 100808. <https://doi.org/10.1016/j.chphi.2024.100808>
- Hirao, T. (2002). Conjugated systems composed of transition metals and redox-active p-conjugated ligands. In *Coordination Chemistry Reviews* (Vol. 226). www.elsevier.com/locate/ccr
- Islas-Rodríguez, N., Muñoz, R., Vázquez-García, R. A., Rodríguez, J. A., Reyes-Pérez, M., & Hernández-Ortiz, O. J. (2023). Selective colorimetric detection of cysteine based on phenylvinylbisquinoline for its potential implementation in optoelectronic sensors. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 34(13). <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10538-z>
- Jensen, W. B. (2008). The Origin of the Polymer Concept. *Journal of Chemical Education*, 85(5), 624. <https://doi.org/10.1021/ed085p624>
- Jiang, J., Yang, W., & Cao, Y. (2007). Recent advances in organometallic polymers as highly efficient electrophosphorescent emitters. In *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials* (Vol. 17, Issue 1, pp. 37–55). <https://doi.org/10.1007/s10904-006-9091-2>
- Jin, R., Zhang, X., Xiao, W., & Irfan, A. (2018). Rational design of diketopyrrolopyrrole-based multifunctional materials for organic light-emitting diodes and organic solar cells. *Theoretical Chemistry Accounts*, 137(11). <https://doi.org/10.1007/s00214-018-2347-4>
- Kadam, V. S., Bhatt, P. A., Machhi, H. K., Soni, S. S., Zade, S. S., & Patel, A. L. (2020). Dithienopyrrolobenzothiadiazole-carbazole based D- π -A- π -D p-type conjugated material. *Nano Select*, 1(5), 491–498. <https://doi.org/10.1002/nano.202000028>
- Kashi, A., & Saha, S. (2017). Ethical Issues in Biomaterials Research. In *Materials for Bone Disorders* (pp. 493–503). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802792-9.00011-2>
- Kaur, M., & Choi, D. H. (2015). Diketopyrrolopyrrole: brilliant red pigment dye-based fluorescent probes and their applications. *Chemical Society Reviews*, 44(1), 58–77. <https://doi.org/10.1039/c4cs00248b>
- Kim, J. H., Kim, D. H., So, J. H., & Koo, H. J. (2022). Toward eco-friendly dye-sensitized solar cells (DSSCs): Natural dyes and aqueous electrolytes. In *Energies* (Vol. 15, Issue 1). MDPI. <https://doi.org/10.3390/en15010219>

- Kolarikova, M., Hosikova, B., Dilenko, H., Barton-Tomankova, K., Valkova, L., Bajgar, R., Malina, L., & Kolarova, H. (2023). Photodynamic therapy: Innovative approaches for antibacterial and anticancer treatments. In *Medicinal Research Reviews* (Vol. 43, Issue 4, pp. 717–774). John Wiley and Sons Inc. <https://doi.org/10.1002/med.21935>
- Kowser, Z., Rayhan, U., Akther, T., Redshaw, C., & Yamato, T. (2021). A brief review on novel pyrene based fluorometric and colorimetric chemosensors for the detection of Cu²⁺. In *Materials Chemistry Frontiers* (Vol. 5, Issue 5, pp. 2173–2200). Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/d0qm01008a>
- Lakowicz, J. R. (2006). *Principles of Fluorescence Spectroscopy* (J. R. Lakowicz, Ed.). Springer US. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-46312-4>
- Ley, K. D., & Schanze, K. S. (1998). *Photophysics of metal-organic r-conjugated polymers*.
- Li, J., Sun, C., Tang, A., Zhang, B., Guo, Q., Zhou, E., & Li, Y. (2020). Utilizing an electron-deficient thieno[3,4:-C] pyrrole-4,6-dione (TPD) unit as a π -bridge to improve the photovoltaic performance of A- π -D- π -A type acceptors. *Journal of Materials Chemistry C*, 8(45), 15981–15984. <https://doi.org/10.1039/d0tc04601a>
- Li, Y., Liu, S., Ni, H., Zhang, H., Zhang, H., Chuah, C., Ma, C., Wong, K. S., Lam, J. W. Y., Kwok, R. T. K., Qian, J., Lu, X., & Tang, B. Z. (2020). ACQ-to-AIE Transformation: Tuning Molecular Packing by Regioisomerization for Two-Photon NIR Bioimaging. *Angewandte Chemie - International Edition*, 59(31), 12822–12826. <https://doi.org/10.1002/anie.202005785>
- Li, Y., Wu, Q., Guo, X., Zhang, M., Chen, B., Wei, G., Li, X., Li, X., Li, S., & Ma, L. (2020). Laminated self-standing covalent organic framework membrane with uniformly distributed subnanopores for ionic and molecular sieving. *Nature Communications*, 11(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-14056-7>
- Liang, S., Zhang, Y., Wang, H., Xu, Z., Chen, J., Bao, R., Tan, B., Cui, Y., Fan, G., Wang, W., Wang, W., & Liu, W. (2018). Paintable and Rapidly Bondable Conductive Hydrogels as Therapeutic Cardiac Patches. *Advanced Materials*, 30(23). <https://doi.org/10.1002/adma.201704235>
- Liu, D., Guo, L.-E., Chen, X., Xia, Y., Hu, X., & Weng, S. (2022). Fluorescence enhanced sensing of cysteine based on reactive probe of naphthalene-quinoline. *Journal of the Iranian Chemical Society*, 19(6), 2377–2382. <https://doi.org/10.1007/s13738-021-02453-z>
- Malliaras, G. G., Suiu, A.-O., Inal, S., McCulloch, I., & Rivnay, J. (2018). Conjugated Polymers in Bioelectronics [Research-article]. *Accounts of Chemical Research*, 51(6), 1368–1376. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.7b00624>
- Merkel, K., Greiner, J., & Ortmann, F. (2023). Understanding the electronic pi-system of 2D covalent organic frameworks with Wannier functions. *Scientific Reports*, 13(1), 1685. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-28285-w>
- Najafi, F., Salami-Kalajahi, M., & Roghani-Mamaqani, H. (2021). A review on synthesis and applications of dendrimers. *Journal of the Iranian Chemical Society*, 18(3), 503–517. <https://doi.org/10.1007/s13738-020-02053-3>
- Ostroverkhova, O. (2016). Organic Optoelectronic Materials: Mechanisms and Applications. *Chemical Reviews*, 116(22), 13279–13412. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00127>
- Ren, G., Han, W., Deng, Y., Wu, W., Li, Z., Guo, J., Bao, H., Liu, C., & Guo, W. (2021). Strategies of modifying spiro-OMeTAD materials for perovskite solar cells: a review. *Journal of Materials Chemistry A*, 9(8), 4589–4625. <https://doi.org/10.1039/d0ta11564a>
- Reynolds, J. R. (2013). CHAPTER 1. *Pi-Conjugated Polymers: The Importance of Polymer Synthesis* (pp. 1–11). <https://doi.org/10.1039/9781849739771-00001>
- Sahki, F. A., Bouraiou, A., Taboukhât, S., Messaadia, L., Bouacida, S., Figa, V., Bouchouit, K., & Sahraoui, B. (2021). Design and synthesis of highly conjugated Electronic Phenanthrolines Derivatives for remarkable NLO properties and DFT analysis. *Optik*, 241(July 2020), 166949. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.166949>
- Said, A. A., Xie, J., & Zhang, Q. (2019). Recent Progress in Organic Electron Transport Materials in Inverted Perovskite Solar Cells. In *Small* (Vol. 15, Issue 27). Wiley-VCH Verlag. <https://doi.org/10.1002/smll.201900854>
- Saravanan, V., Ganesan, S., & Rajakumar, P. (2020). Synthesis and DSSC application of BODIPY decorated triazole bridged and benzene nucleus cored conjugated dendrimers. *RSC Advances*, 10(31), 18390–18399. <https://doi.org/10.1039/d0ra01672a>
- Scharber, M. C., & Sariciftci, N. S. (2021). Low Band Gap Conjugated Semiconducting Polymers. *Advanced Materials Technologies*, 6(4). <https://doi.org/10.1002/admt.202000857>
- Selim, Y., & Mohamed, A. A. (2017). Role of Dyestuff in Improving Dye-Sensitized Solar Cell Performance. *Renewable Energy and Sustainable Development (RES D)*, 3. <https://doi.org/10.21622/RES D.2017.03.1.079>
- Shan, D., Gerhard, E., Zhang, C., Tierney, J. W., Xie, D., Liu, Z., & Yang, J. (2018). Polymeric biomaterials for biophotonic applications. *Bioactive Materials*, 3(4), 434–445. <https://doi.org/10.1016/j.bioactmat.2018.07.001>
- Shao, W., Yang, C., Li, F., Wu, J., Wang, N., Ding, Q., Gao, J., & Ling, D. (2020). Molecular Design of Conjugated Small Molecule Nanoparticles for Synergistically Enhanced PTT/PDT. *Nano-Micro Letters*, 12(1). <https://doi.org/10.1007/s40820-020-00474-6>
- Shin, W., Ko, W., Jin, S. H., Earmme, T., & Hwang, Y. J. (2021). Reproducible and rapid synthesis of a conjugated polymer by Stille polycondensation in flow: Effects of reaction parameters on molecular weight. *Chemical Engineering Journal*, 412. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.128572>
- Sliney, D. H. (2016). What is light? The visible spectrum and beyond. *Eye*, 30(2), 222–229. <https://doi.org/10.1038/eye.2015.252>
- Tan, K. T., Ghosh, S., Wang, Z., Wen, F., Rodríguez-San-Miguel, D., Feng, J., Huang, N., Wang, W., Zamora, F., Feng, X., Thomas, A., & Jiang, D. (2023). Covalent

- organic frameworks. *Nature Reviews Methods Primers*, 3(1), 1. <https://doi.org/10.1038/s43586-022-00181-z>
- Tang, A., Zhan, C., Yao, J., & Zhou, E. (2017). Design of Diketopyrrolopyrrole (DPP)-Based Small Molecules for Organic-Solar-Cell Applications. *Advanced Materials*, 29(2). <https://doi.org/10.1002/adma.201600013>
- Tong, X., Hao, L., Song, X., Wu, S., Zhang, N., Li, Z., Chen, S., & Hou, P. (2022). Construction of novel coumarin-carbazole-based fluorescent probe for tracking of endogenous and exogenous H₂S in vivo with yellow-emission and large Stokes shift. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 279. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121445>
- Tonga, M. (2020). Tunable optical properties of push-pull chromophores: End group effect. *Tetrahedron Letters*, 61(32), 152205. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2020.152205>
- Tropp, J., & Rivnay, J. (2021). Design of biodegradable and biocompatible conjugated polymers for bioelectronics. *Journal of Materials Chemistry C*, 9(39), 13543–13556. <https://doi.org/10.1039/D1TC03600A>
- Wu, G., Ge, X., Yang, Z., Liu, Y., Chen, Z., Wang, Y., Li, G., Guo, D., Deng, H., Zhao, J., & Chi, Z. (2024). High-efficiency blue hybridized local and charge-transfer fluorescent material affording OLEDs with external quantum efficiency exceeding 14 %. *Chemical Engineering Journal*, 497, 154659. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.154659>
- Wu, P. T., Bull, T., Kim, F. S., Luscombe, C. K., & Jenekhe, S. A. (2009). Organometallic donor - Acceptor conjugated polymer semiconductors: Tunable optical, electrochemical, charge transport, and photovoltaic properties. *Macromolecules*, 42(3), 671–681. <https://doi.org/10.1021/ma8016508>
- Wu, P.-T., Bull, T., Kim, F. S., Luscombe, C. K., & Jenekhe, S. A. (2009). Organometallic Donor–Acceptor Conjugated Polymer Semiconductors: Tunable Optical, Electrochemical, Charge Transport, and Photovoltaic Properties. *Macromolecules*, 42(3), 671–681. <https://doi.org/10.1021/ma8016508>
- Wu, Y., & Zhu, W. (2013). Organic sensitizers from D– π -A to D–A– π -A: Effect of the internal electron-withdrawing units on molecular absorption, energy levels and photovoltaic performances. *Chemical Society Reviews*, 42(5), 2039–2058. <https://doi.org/10.1039/c2cs35346f>
- Xu, C., Dong, J., He, C., Yun, J., & Pan, X. (2023). Precise control of conjugated polymer synthesis from step-growth polymerization to iterative synthesis. *Giant*, 14, 100154. <https://doi.org/10.1016/j.giant.2023.100154>
- Yamaguchi, Y., Matsubara, Y., Ochi, T., Wakamiya, T., & Yoshida, Z. I. (2008). How the π conjugation length affects the fluorescence emission efficiency. *Journal of the American Chemical Society*, 130(42), 13867–13869. <https://doi.org/10.1021/ja8040493>
- Yan, C., Barlow, S., Wang, Z., Yan, H., Jen, A. K. Y., Marder, S. R., & Zhan, X. (2018). Non-fullerene acceptors for organic solar cells. In *Nature Reviews Materials* (Vol. 3). Nature Publishing Group. <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2018.3>
- Yang, M., Deng, J., Su, H., Gu, S., Zhang, J., Zhong, A., & Wu, F. (2021). Small organic molecule-based nanoparticles with red/near-infrared aggregation-induced emission for bioimaging and PDT/PTT synergistic therapy. *Materials Chemistry Frontiers*, 5(1), 406–417. <https://doi.org/10.1039/d0qm00536c>
- Yang, X., Zhang, G., Li, Y., Liu, Z., Gong, X., Gao, B., Zhang, G., Cui, Y., & Sun, G. (2015). Colorimetric and fluorogenic signalling of fluoride ions by diketopyrrolopyrrole-based chemosensor. *RSC Advances*, 5(29), 22455–22462. <https://doi.org/10.1039/C4RA14639E>
- Yeboah, L. A., Oppong, P. A., Abdul Malik, A., Acheampong, S., Morgan, J. A., Akua, R., Addo, A., Henyo, B. W., La, Y., Pa, O., & Malik, A. (2024). Exploring Innovations, Sustainability and Future Opportunities in Semiconductor Technologies. In *Int J Adv Nano Comput Anal* (Vol. 3, Issue 2).
- Zahn, D. R. T., Gavril, G. N., & Gorgoi, M. (2006). The transport gap of organic semiconductors studied using the combination of direct and inverse photoemission. *Chemical Physics*, 325(1), 99–112. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2006.02.003>
- Zhang, Y., Fang, F., Li, L., & Zhang, J. (2020). Self-Assembled Organic Nanomaterials for Drug Delivery, Bioimaging, and Cancer Therapy. In *ACS Biomaterials Science and Engineering* (Vol. 6, Issue 9, pp. 4816–4833). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acsbiomaterials.0c00883>
- Zhang, Y., Guo, J., Li, X., Zhao, M., Wei, Q., & Song, P. (2020). One- and two-photon absorption properties of quadrupolar A– π -D– π -A dyes with donors of varying strengths. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 230, 118015. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2019.118015>
- Zhu, C., Zhao, Z., Chen, H., Zheng, L., Li, X., Chen, J., Sun, Y., Liu, F., Guo, Y., & Liu, Y. (2017). Regioregular Bis-Pyridal[2,1,3]thiadiazole-Based Semiconducting Polymer for High-Performance Ambipolar Transistors. *Journal of the American Chemical Society*, 139(49), 17735–17738. <https://doi.org/10.1021/jacs.7b10256>