

# Solvatochromic study of triphenylamine derivatives: Estimation of the permanent dipole moment difference

## Estudio solvatocrómico de derivados de la Trifenilamina: Estimación de la diferencia del momento de dipolo permanente

Carlos Ferias<sup>1</sup>, Amelis Bustamante<sup>1</sup>, Oscar Neira<sup>1</sup>, Oriana Avila<sup>1</sup>, Ruben Fonseca<sup>1\*</sup>

1. *Departamento de Física, Facultad de ciencias básicas y de la educación, Universidad Popular del Cesar, 2000004 Valledupar, Cesar, Colombia.*

<sup>(\*)</sup>E-mail: [rubenfonseca@unicesar.edu.co](mailto:rubenfonseca@unicesar.edu.co)

Received: 02/12/2021

Accepted: 07/03/2022

DOI: 10.7149/OPA.55.1.51085

### ABSTRACT:

There is great interest in studying the optical properties of organic materials because of their fast optical response and excellent integrability in devices, which makes them attractive for applications in Photonics and organic electronics. Solvatochromism allows the analysis of the molecular microenvironment and provides information on the nature of the states responsible for the optical transitions of these materials. In this context, a solvatochromic study was performed on three molecules derived from triphenylamine bound to three electron acceptor groups; Cyanobenzene, Cyanopyridine and Dicyanobenzene, where their absorption and fluorescence spectra were analyzed; the difference of the maximum peaks was correlated with the Onsager polarity function from whose slope, the difference of the permanent dipole moment of each derivative was estimated. For all three molecules, a positive solvatochromism was observed, revealing that the permanent dipole moment of the first excited state is greater than that of the fundamental. As for the results of these differences, they are moderately high, suggesting that there is high electronic mobility throughout the organic compound, leading to the inference that they will have a greater effect on nonlinear optical properties.

**Key words:** Absorption, fluorescence, solvatochromism, triphenylamine and permanent dipole moment difference.

### RESUMEN:

Existe gran interés por estudiar las propiedades ópticas de materiales orgánicos debido a que presentan una rápida respuesta óptica y excelente integrabilidad en dispositivos, lo que los hace atractivos para aplicaciones en fotónica y electrónica orgánica. El solvatocromismo permite analizar el microentorno molecular y ofrece información de la naturaleza de los estados responsables de transiciones ópticas de estos materiales. En este contexto, se realizó un estudio solvatocrómico en tres moléculas derivadas de la trifenilamina ligadas a tres grupos aceptores de electrones; Cianobenceno, Cianopiridina y Dicianobenceno, donde se analizaron sus espectros de absorción y fluorescencia; se correlacionó la diferencia de los picos máximos con la función de polaridad de Onsager de cuya pendiente, se estimó la diferencia del momento dipolar permanente de cada derivado. Para las tres moléculas, se observó un solvatocromismo positivo, revelando que el momento dipolar permanente del primer estado excitado es mayor que el del fundamental. En cuanto a los resultados para estas diferencias, son moderadamente altos, sugiriendo que existe gran movilidad electrónica en todo el compuesto orgánico, llevando a inferir que presentarán un mayor efecto en propiedades ópticas no lineales.

**Palabras clave:** Absorción, fluorescencia, solvatocromismo, trifenilamina y Diferencia de momento dipolo permanente.

---

## REFERENCES AND LINKS / REFERENCIAS Y ENLACES

- [1] P. L. Burn, S. C. Lo, I. D. W. Samuel, "The development of light-emitting dendrimers for displays," *Adv. Mater.* **19**, 1675–88 (2007).
- [2] B. O'Regan, M. Grätzel, "A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO<sub>2</sub> films," *Nature*, **353**, 737–40 (1991).
- [3] J. Roncali, "Synthetic Principles for Bandgap Control in Linear  $\pi$ -Conjugated Systems," *Chem. Rev.* **173**–205 (1997).
- [4] S-C. Lo and P. L. Burn, "Development of Dendrimers: Macromolecules for Use in Organic Light-Emitting Diodes and Solar Cells," *Chem. Rev.* **107**, 1097–116 (2007).
- [5] D. Collado, P. Remón, Y. Vida, F. Najera, P. Sen, U. Pischel, E. Perez-Inestrosa, "Energy Transfer in Aminonaphthalimide-Boron-Dipyrromethene (BODIPY) Dyads upon One- and Two-Photon Excitation: Applications for Cellular Imaging," *Chem. – An Asian J.* **9**, 797–804 (2014).
- [6] S. Yao, H-Y. Ahn, X. Wang, J. Fu, E. W. Stryland, D. J. Hagan, K. D. Belfield, "Donor–Acceptor–Donor Fluorene Derivatives for Two-Photon Fluorescence Lysosomal Imaging," *J. Org. Chem.* **75**, 3965–74 (2010).
- [7] J. C. Collings, S-Y. Poon, C. Le. Droumaguet, M. Charlot, C. Katan, L-O. Palsson, A. Beeby, J. A. Mosely, H. M. Kaiser, D. Kaufmann, W-Y. Wong, M. Blanchard-Desce, T. B. Marder, "The Synthesis and One- and Two-Photon Optical Properties of Dipolar, Quadrupolar and Octupolar Donor-Acceptor Molecules Containing Dimesitylboryl Groups," *Chem. - A Eur. J.* **15**, 198–208 (2009).
- [8] E. Fernández Salvador, "Síntesis y estudio fotofísico de sondas fluorescentes. Seguimiento de procesos de fotopolimerización y fotodegradación," *Aplicación en adhesivos (UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DEMADRID)* (2001).
- [9] C. Reichardt, "Solvatochromic dyes as solvent polarity indicators," *Chem. Rev.* **94**, 2319–58 (1994).
- [10] S. E. Sheppard, "The Effects of Environment and Aggregation on the Absorption Spectra of Dyes," *Rev. Mod. Phys.* **14**, 303–40 (1942).
- [11] J. Lađarević, B. Božić, L. Matović, B. B. Nedeljković, D. Mijin, "Role of the bifurcated intramolecular hydrogen bond on the physico-chemical profile of the novel azo pyridone dyes," *Dye. Pigment*, **162**, 562–72 (2019).
- [12] A. O. Aracena, "Contribuciones al estudio del solvato- y halocromismo de betaínas de fenolatos," *Repos. ANID* (2013).
- [13] M. Homocianu, A. Airinei, D. O. Dorohoi, "Solvent effects on the electronic absorption and fluorescence spectra," *J. Adv. Res. Phys.* **2**, 1–9 (2011).
- [14] C. E. A. De Melo, C. R. Nicoletti, L. G. Nandi, F. S. S. Schneider, R. Oliboni, G. F. Caramori, V. Machado, "Solvatochromism of new substituted 4-[(E)-(4-nitrophenyl)diazenyl]phenolate dyes," *J. Mol. Liq.* **301**, 112330 (2020).
- [15] C. Machado, "Estudos físico-químicos do solvatocromismo e halocromismo," **175** (1997).
- [16] İ. Sıdır, T. Sarı, Y. Gülseven Sıdır, H. Berber, "Synthesis, solvatochromism and dipole moment in the ground and excited states of substitute phenol derivative fluorescent Schiff base compounds," *J. Mol. Liq.* **16**–26 (2021).
- [17] P. Goszczycki, K. M. Stadnicka, M. Z. Brela, K. Ostrowska, "The origin of conformational solvatochromism in phenylmethylidene-bis(pyrrolo[2,3-b]quinoxaline) derivative," *Dye. Pigment*, **193**, 109475 (2021).
- [18] L. Onsager, "Electric Moments of Molecules in Liquids," *J. Am. Chem. Soc.* **58**, 1486–93 (2002).
- [19] Zha. Menglei, Nij. en-Shyang, Li. Yaxi, Li. Kai, "Chapter Eight - Monitoring tumor growth with a novel NIR-II photoacoustic probe", (2021).
- [20] J. R. Lakowicz, "Principles of Fluorescence Spectroscopy," Third Edition, 141-144. Springer US, (2011).
- [21] "Optics O 2001 Sampling Accessories - Cuvette Holder," <https://www.labcompare.com/1534-Microscope-Holder/3627102-CUV-ALL-UV-Cuvette-Holder/>
- [22] "Korea J & Geograaf 2017 DH-2000 Deuterium-Halogen Light Source," <https://www.gmp.ch/spectroscopy/light-source-for-spectroscopy/light-source-uv-vis-nir/dh-2000-deuterium-halogen-light-sources-for-the-uv-vis-nir>
- [23] "Optics O 2001 PX-2 Pulsed Xenon Light Source Installation and Operation Instructions Description," <https://www.oceaninsight.com/globalassets/catalog-blocks-and-images/manuals--instruction-old>



[logo/light-sources/px-2.pdf](#)

[24] "OceanOptics 2008 HR4000 and HR4000CG-UV-NIR Series Spectrometers Installation," <https://www.oceaninsight.com/globalassets/catalog-blocks-and-images/manuals--instruction-old-logo/spectrometer/hr4000.pdf>

[25] Bermejo, Raquel, A. Moreno, "Análisis instrumental", Ed Sintesis, Madrid (2014).

[26] D. Skoog, F. J. Holler, T. Nieman, "Principios de Análisis Instrumental," 5ta Edición (2004).

## 1. Introducción

En las últimas décadas, los estudios enfocados en el análisis óptico de las moléculas orgánicas han despertado gran interés investigativo, debido a que estas presentan múltiples propiedades que son aplicables a diversas áreas como la física, química, medicina y biología, ejemplos de su utilidad son el desarrollo de diodos emisores de luz orgánicos (OLED), células solares orgánicas y dispositivos de formación de imágenes de fluorescencia de excitación [1–8]. Una característica significativa de estas estructuras, es que pueden tener alta generación de grupos donadores y aceptores de electrones, esta cualidad las hace modificables en sus espectros de absorción y emisión de fluorescencia, dependiendo de las características de polaridad del entorno o disolvente, fenómeno conocido como solvatocromismo.

Estudiar los efectos que tiene el cambio del entorno molecular en las propiedades ópticas de las moléculas abre paso a poder analizar parámetros físicos como los desplazamientos Stokes y las distribuciones electrónicas de las moléculas en sus diferentes estados mediante magnitudes como el momento dipolar permanente, que también es utilizado en la caracterización cuantitativa de la polaridad de disolventes [9–11]. En este contexto, se realizó un estudio solvatocrómico a un conjunto de tres moléculas dipolares conocidas como compuestos  $\pi$ -conjugados donante-aceptor (D- $\pi$ -A), todas derivadas de la trifenilamina (donador) ligadas a tres grupos moleculares aceptadores de electrones; Cianobenceno (molécula I); Cianopiridina (molécula II) y Dicianobenceno (Molécula III) (ver Figura 1). El cual aportó todas las herramientas necesarias para estimar la diferencia de momento dipolar permanente.

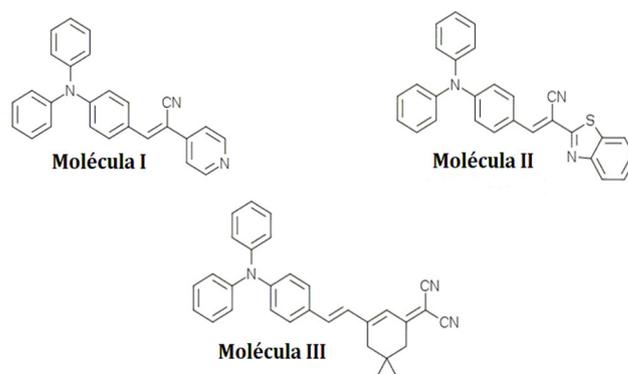


Fig. 1. Forma estructural de las moléculas usada en este trabajo.

## 2. Fundamentos teóricos

El término "solvatocromismo" hace referencia al cambio espectral que surge en una sustancia cuando es sometida a solventes que poseen diferentes polaridades. Este efecto se puede presentar como un desplazamiento de los picos máximos y/o la intensidad e incluso en las formas de las bandas de absorción o emisión [12–15]. Si al aumentar la polaridad del medio, el cambio de las bandas espectrales se da hacia el azul (desplazamiento hipsocrómico), es considerado solvatocromismo negativo, si se da hacia el rojo (Batocrómico) se define como solvatocromismo positivo. Estos cambios espectrales que se generan con la variación de solvente son el resultado de las fuerzas de interacción entre las moléculas de soluto y disolvente, debido a que estas tienden a alterar la diferencia de energía entre el estado fundamental y los estados excitados del cromóforo de una sustancia [12, 16,17].

Un modelo útil para entender los desplazamientos espectrales que dependen del disolvente es el de Lars Onsager, el cual parte la descripción de la teoría de Debye, donde se representa a una molécula como un dipolo puntual polarizable en el centro de una cavidad esférica de dimensiones moleculares en un medio continuo de permitividad eléctrica uniforme, para terminar introduciendo el término de polarizabilidad del solvente el cual depende de la movilidad de los electrones en el solvente y del momento dipolar de las moléculas del solvente. La movilidad de los electrones es esencialmente instantánea y es función del índice de refracción ( $n$ ), sin embargo, la polarizabilidad también depende del índice de refracción ( $\varepsilon$ ) que abarca el efecto de la orientación molecular del solvente, la diferencia entre estas dos dependencias es lo que conocemos como polarizabilidad de orientación o función de polaridad de Onsager ( $\Delta F$ ) que viene dada por la siguiente expresión [18,19].

$$\Delta F(n, \varepsilon) = 2 \left[ \frac{\varepsilon-1}{2\varepsilon+1} - \frac{n^2-1}{2n^2+1} \right] \quad (1)$$

En donde, el primer término  $(\varepsilon - 1) / (2\varepsilon + 1)$  explica los desplazamientos espectrales debidos a la reorientación de los dipolos del disolvente y a la redistribución de los electrones en las moléculas del disolvente. El segundo término  $(n^2 - 1) / (2n^2 + 1)$  explica sólo la redistribución de los electrones debido a que el índice de refracción depende del movimiento de los electrones dentro de las moléculas del disolvente. La diferencia de estos dos términos explica los desplazamientos espectrales debidos a la reorientación de las moléculas del disolvente es por esto que la igualdad también se conoce como polarizabilidad de la orientación. Sin embargo, este modelo no contempla ninguna interacción química y, por tanto, no puede utilizarse para explicar ese tipo de interacciones. Las interacciones entre el disolvente y el fluoróforo que afectan a la diferencia de energía entre el estado básico y el excitado son una propiedad del índice de refracción ( $n$ ) y la constante dieléctrica ( $\varepsilon$ ) del disolvente, las cuales es posible describirlas mediante la ecuación de Lippert-Mataga [19,20].

$$|\Delta\mu_{GE}|^2 = \frac{3}{4} \pi h c \frac{\partial \bar{\nu}}{\partial F} \quad vol \quad (2)$$

En donde  $h$  ( $6,6256 \times 10^{-27}$  erg. s) es la constante de Planck,  $c$  ( $2,9979 \times 10^{10}$  cm/s) la velocidad de la luz,  $|\Delta\mu_{GE}|^2$  representa la diferencia de momento dipolo permanente entre el primer estado excitado y el estado fundamental,  $\bar{\nu}$  la diferencia de los picos máximos de los espectros de absorción y emisión,  $\Delta F$  la función de polaridad de Onsager y  $vol$  es el volumen de la cavidad esférica ocupada por la molécula dentro del medio dieléctrico.

### 3. Materiales y métodos

Todos los espectros de absorción y fluorescencia obtenidos, fueron captados con ayuda de un espectrómetro de referencia HR4000 High-Resolution de la marca Ocean Optics. Las fuentes de luz que se usaron para determinar los espectros de absorción son de referencia Deuterio-Halógeno DH-2000 y de xenón pulsada PX-2 de Ocean Optics y para la fluorescencia, punteros láseres de 405 y 532 nm [21–24]. Las muestras estudiadas se vertieron en una cubeta de cuarzo de 2 mm de grosor, siendo diluidas en disolventes con diferentes polaridades que no presentaron interacciones químicas con las moléculas como son el cloroformo, la acetona, el tolueno, tetrahidrofurano, Diclorometano y adicionalmente fue necesario emplear la combinación de dos disolventes mezclados en partes iguales (50%-50%) como el cloroformo-tolueno y cloroformo-diclorometano. Los espectros de absorción se captaron siguiendo las especificaciones de la ley de Beer, cuidando de mantener una baja concentración (alrededor de los  $10^{-4}$  y  $10^{-5}$  Molar) y un ángulo de  $180^\circ$  entre el puerto de incidencia de la luz y el puerto de salida del soporte de cubetas como se muestra en la figura 2 [25,26]. En cambio, para la detección de la emisión se mantuvo un ángulo de  $90^\circ$  debido a que dicho ángulo es esencial para evitar que la radiación incidente sature la medición (ver figura 3). Con ayuda de los espectros se logró observar cómo se desarrolla el solvatocromismo en cada molécula, cabe destacar que los mismo fueron visualizados con el software Spectral Suite.

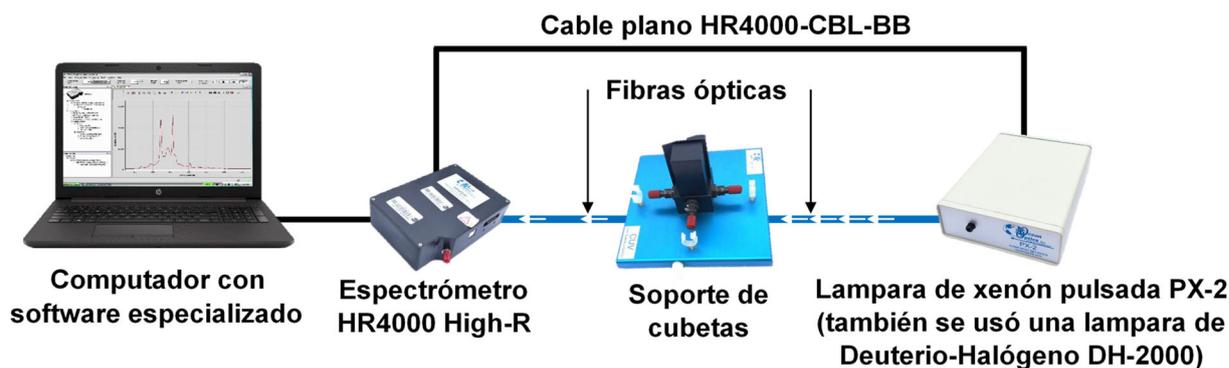


Fig. 2. Esquema del montaje experimental para capturar los espectros de absorción.

Para estimar la diferencia del momento de dipolo permanente, se determinaron con precisión los valores de los picos máximos en número de onda ( $\Delta\bar{\nu}$ ) de las bandas de absorción de menor energía y las de emisión, la diferencia entre estos valores se correlacionó con el respectivo dato obtenido en la función de polaridad ( $\Delta F$  en la ecuación 1) en cada uno de los solventes mediante un gráfico de  $\Delta\bar{\nu}$  vs  $\Delta F$ , las pendientes de las rectas generadas permitió conocer el parámetro  $\partial\nu/\partial F$  que establece la ecuación de Lippert-Mataga (2) y el volumen de la cavidad esférica ocupada por la molécula ( $vol$ ) se consiguió con la ayuda del modelo polarizable continuo (Polarizable Continuum Model-PCM) implementado en el paquete del programa Gaussian 09, logrando así obtener todos los parámetros necesarios para estimar la diferencia del momento de dipolo permanente.

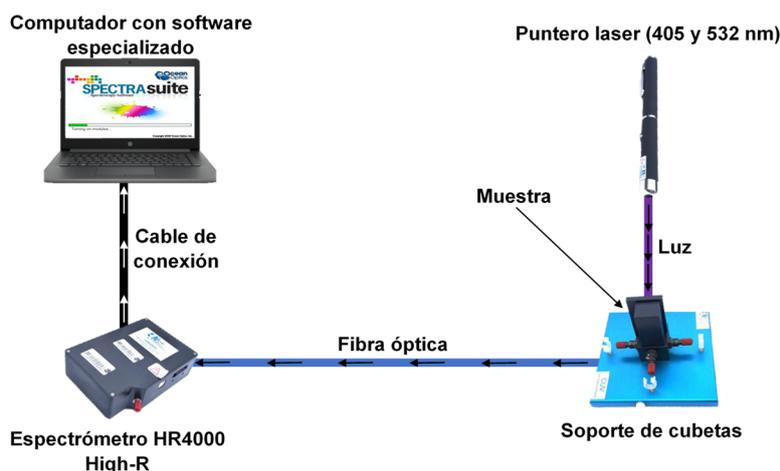


Fig. 3. Esquema del montaje experimental para capturar los espectros de fluorescencia.

#### 4. Resultados obtenidos e interpretación

La Figura 4 muestra los espectros de absorción y fluorescencia normalizados (eje vertical izquierdo y derecho respectivamente) para las moléculas I, II y III en diferentes solventes. En el eje horizontal inferior se observan las longitudes de onda en nm y en el superior, los números de onda en  $cm^{-1}$ . La molécula I muestra una amplia banda de absorción de los 350 nm a los 550 nm, la molécula II, entre 360 nm a 550 nm y 400 nm a 600 nm en la molécula III. En este rango se visualiza la banda de menor energía, cuyas longitudes de onda y número de onda máximos se presentan en la tabla 2. Aunque los espectros poseen formas similares en todos los disolventes estudiados, muestran un desplazamiento batocrómico para las tres moléculas (solvatocromismo positivo).

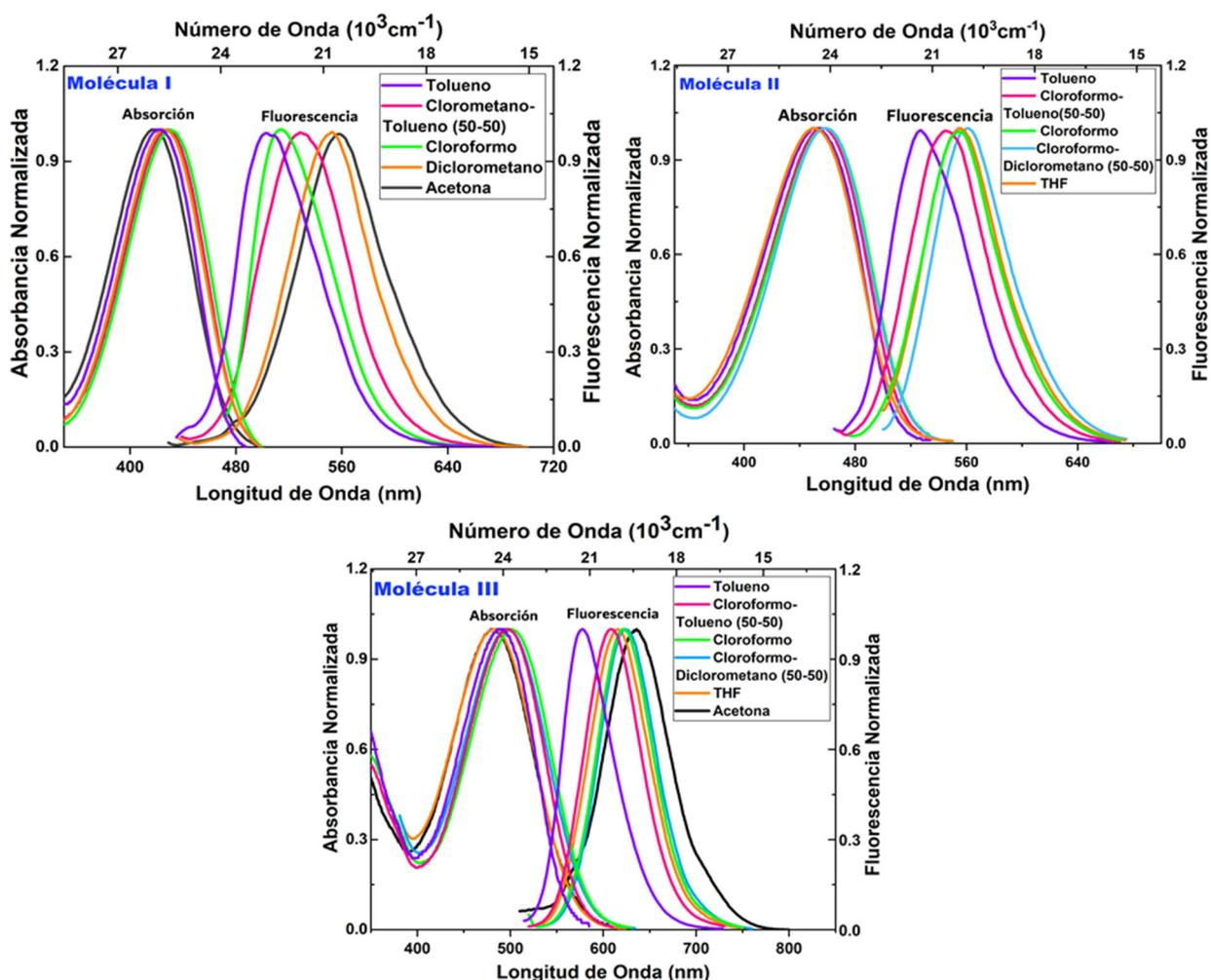


Fig. 4. Espectros de absorción y fluorescencia normalizados de las moléculas I, II y III en los diferentes solventes.

De acuerdo con la Figura 4, las tres moléculas exhibieron sus bandas de absorción y fluorescencia en la región visible (violeta-azul) del espectro electromagnético y en todas se observó que los espectros de emisión presentaron mayores cambios en su desplazamiento de Stokes que los espectros de absorción, pero en ninguna hubo cambio en las formas de las bandas. Los desplazamientos de Stokes observados, obedecen a la polaridad del disolvente y a su vez revelan el carácter polar del estado excitado; lo que indica, que hay una gran redistribución de carga en el estado excitado en comparación con el estado fundamental. Con esto, se espera que el valor absoluto del momento dipolar permanente del estado excitado ( $\mu E$ ) (primer estado excitado) sea mucho mayor que el momento dipolar permanente del estado fundamental ( $\mu G$ ).

En el gráfico de la Figura 5 se presenta la relación lineal que existe entre la función de polaridad de Onsager  $\Delta F(n, \epsilon)$  con la variación del número de onda máximo ( $\Delta \bar{\nu} = \bar{\nu}_A - \bar{\nu}_F$ ) para las tres moléculas en los diferentes solventes. Cabe agregar que los valores de la función de polaridad de Onsager para los disolventes utilizados, se determinaron mediante la ecuación 1 y se relacionan en la TABLA 1 donde  $\epsilon$  es la constante de permitividad eléctrica y  $n$  el índice de refracción. La pendiente positiva de las respectivas rectas de mínimos cuadrados que corresponde al parámetro  $\partial \bar{\nu} / \partial F$  de la ecuación (2), dieron como resultado:  $(4.06 \pm 1.39) \times 10^3 \text{cm}^{-1}$  para I,  $(1.75 \pm 0.13) \times 10^3 \text{cm}^{-1}$  para II y  $(3.53 \pm 0.35) \times 10^3 \text{cm}^{-1}$  para la molécula III, estos valores confirmaron la existencia de un solvatocromismo positivo.

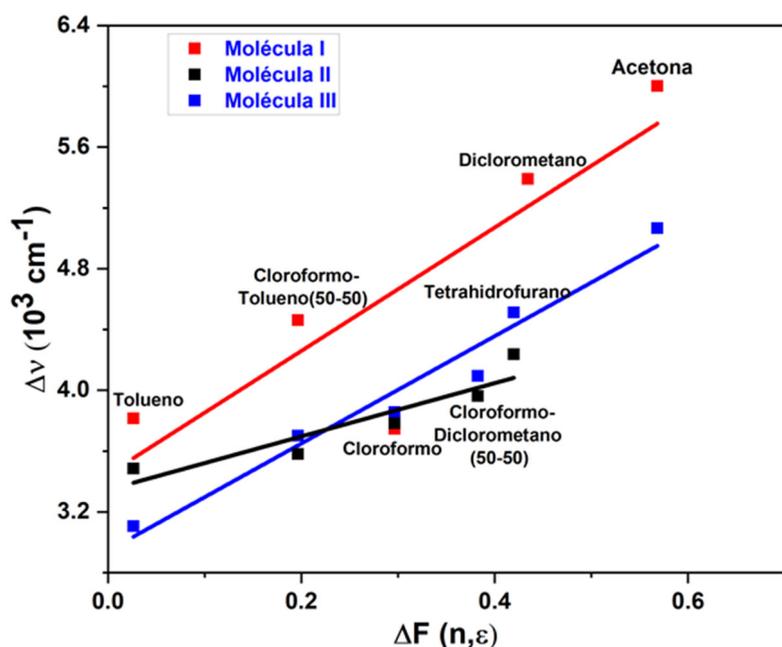


Fig.5. Medidas de la diferencia entre los números de onda máximos de absorción y emisión ( $\Delta\nu$ ) en función de la polarizabilidad de orientación de Onsager de cada solvente.

Para encontrar la diferencia de momento de dipolo permanente entre el estado excitado y el estado fundamental se empleó la ecuación 2, tomando como parámetros  $\partial\nu/\partial F$  la pendiente de las rectas del gráfico de la figura 5 y para los respectivos volúmenes hidrodinámico de la cavidad esférica ocupada por la molécula, se determinaron con el modelo polarizable continuo del programa Gaussian 09. Los valores encontrados para la diferencia de momento de dipolo permanente son los siguientes;  $|\Delta\mu_{GE}^I| = 10.1 \pm 0.8$  D para la molécula I,  $|\Delta\mu_{GE}^{II}| = 7.0 \pm 0.4$  D para la molécula II y  $|\Delta\mu_{GE}^{III}| = 10.4 \pm 0.6$  D para la molécula III, estos valores reflejan la diferencia de polaridad existente entre el estado excitado y el fundamental en cada molécula, por ello es posible inferir que en las moléculas I y III donde la diferencia es amplia existe una mayor redistribución de las cargas al pasar al estado excitado respecto a la molécula II en donde la diferencia está menos marcada, además, los valores positivos demuestran que el estado excitado posee una naturaleza más polar que el estado fundamental.

TABLA 1. Valores de permitividad eléctrica, índice de refracción y función de polaridad de Onsager para los solventes implementados en el presente estudio.

Solvente	$\epsilon \left( \frac{C^2}{Nm^2} \right)$	$n$	$\Delta F$
Tolueno	2.38	1.497	0.02641
Cloroformo-Tolueno (50-50%)	3.595	1.47145	0.19652
Cloroformo	4.81	1.4459	0.29652
Cloroformo-Diclorometano (50-50%)	6.87	1.43495	0.38262
Tetrahidrofurano	7.6	1.407	0.41974
Diclorometano	8.93	1.424	0.43434
Acetona	20.7	1.359	0.56839

Finalmente, los datos de absorción y fluorescencia para las moléculas, los valores obtenidos y los cálculos estimados, se resumen en la TABLA 2. Donde  $\bar{\nu}_A$  y  $\bar{\nu}_F$  corresponden a los números de onda máximos para

la absorción y la fluorescencia respectivamente,  $\lambda_A$  y  $\lambda_F$  a la longitud de onda máxima,  $\Delta\bar{\nu}$  la variación de la energía entre el estado fundamental y el excitado,  $vol$  al volumen en angstroms cúbico de la cavidad esférica efectiva de molécula según el modelo de Onsager y  $\Delta\mu$  a la diferencia del momento dipolar permanente en Debye.

TABLA 2. Resultado de los máximos de absorción y fluorescencia y de los cálculos teóricos del volumen, la variación del número de onda y diferencia del momento dipolar permanente, en donde 1= Tolueno, 2= Cloroformo- Tolueno (50%-50%), 3= Cloroformo, 4= Cloroformo -Diclorometano (50%-50%), 5= Tetrahidrofurano, 6= Diclorometano y 7= Acetona.

Molécula	Solvente	$\bar{\nu}_A$ ( $10^3 \text{ cm}^{-1}$ )	$\lambda_A$ (nm)	$\bar{\nu}_F$ ( $10^3 \text{ cm}^{-1}$ )	$\lambda_F$ (nm)	$\Delta\bar{\nu}$ ( $10^3 \text{ cm}^{-1}$ )	$Vol$ ( $\text{Å}^3$ )	$\Delta\mu$ (D)
Mol I	1	23.69668	422	19.88072	503	3.81597	527,0	$10.1 \pm 0.8$
	2	23.36449	428	18.90359	529	4.46089		
	3	23.20186	431	19.45525	514	3.7466		
	6	23.47418	426	18.08318	553	5.391		
	7	23.92344	418	17.92115	558	6.0023		
Mol II	1	22.12389	452	18.97533	527	3.14856	579,2	$7.0 \pm 0.4$
	2	21.92982	456	18.34862	542	3.5812		
	3	21.83406	458	18.05054	554	3.78352		
	4	21.78649	459	17.82531	561	3.96118		
	5	22.22222	450	17.98561	556	4.23661		
Mol III	1	20.40816	490	17.30104	578	3.10713	647,9	$10.4 \pm 0.6$
	2	20.12072	497	16.42036	609	3.70036		
	3	19.96008	501	16.10306	621	3.85702		
	4	20.12072	497	16.02564	624	4.09508		
	5	20.74689	482	16.23377	616	4.51312		
	7	20.79002	481	15.72327	636	5.06675		

## 5. Conclusiones

Se investigó los comportamientos solvatocrómicos de tres moléculas orgánicas derivadas de la trifenilamina (I, II y III) en presencia de diferentes solventes polares. Los análisis se realizaron para la banda de menor energía de la absorción y la fluorescencia del primer estado excitado, donde se evidenció un desplazamiento batocrómico en las tres moléculas. Mostrando que el primer estado excitado de la molécula es más estable el estado fundamental.

Utilizando la función de polaridad de Onsager y el modelo de Lippert-Mataga fue posible determinar la diferencia de momento dipolo permanente entre el estado excitado y el fundamental. Los valores de  $\Delta\mu$  en todas las moléculas son moderadamente altos, lo que confirma que la emisión en estas moléculas se origina en un estado más polarizado que el fundamental, por tanto, es más sensible a los efectos de los disolventes. Este cambio en el momento dipolar del estado excitado sugiere que el estado excitado es por naturaleza de transferencia de carga intramolecular (ICT). Además, estos excelentes valores de  $\Delta\mu$  revelan que existe una gran movilidad electrónica en todo el compuesto orgánico llevando a inferir que los compuestos presentarán un mayor efecto en sus propiedades ópticas no lineales.

## Agradecimientos

Partes de este trabajo fueron presentadas en el XVII Encuentro Nacional de Óptica VIII Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones en RF59, 2021.