

---

# Estudio Comparativo de las Propiedades Electrónicas de la Molécula de Benzoxazole y Algunas Moléculas Derivadas en el Contexto de la Química Cuántica Computacional

Rafael Carrasquilla<sup>1,2</sup>, Oscar Neira Bueno<sup>1</sup>, Ricardo Vivas<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Espectroscopia y Láser, Universidad Popular del Cesar,

<sup>2</sup> Estudiante de Maestría en Ciencias Físicas del Sue-Caribe

<sup>3</sup> Grupo de Química Cuántica Computacional, Universidad de Cartagena

---

## RESUMEN

En este artículo se presenta un avance de un estudio comparativo de la estructura electrónica de cuatro moléculas orgánicas sustituidas del 1,3 Benzoxazol. Para una mejor interpretación de los resultados se hizo el estudio de benceno y el Oxazol. Para este fin se utilizaron como herramientas de cálculo el paquete de programas Gaussian 03, haciendo uso de los enfoques de Hartree-Fock y de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), Para el caso DFT se empleó la funcional híbrida B3LYP junto con las funciones base 6-31+G (d). Se estimaron varios descriptores moleculares globales tales como la dureza, potencial químico, electronegatividad, y el momento dipolar para cada molécula y se determinó la influencia de la alteración de la cadena molecular en los valores de éstos descriptores moleculares como una forma de poder hacer una comparación entre ellos y su relación con las estructuras moleculares, tomando como criterio la influencia de la alteración de una estructura molecular inicial (1,3 Benzoxazol no sustituido) mediante la adición de algún tipo de anillo que cambie la longitud de su cadena de enlaces pi-conjugados o mediante la sustitución de uno de los hidrógenos laterales por un halógeno.

**Palabras clave:** benzoxazoles, enlaces pi-conjugados, Gaussian, Hartree-Fock, y la Teoría de los Funcionales de la Densidad.

## ABSTRACT

In this paper an advance of a comparative study of the electronic structure of four the 1.3 appears replaced organic molecules of Benzoxazole. For one better interpretation of the results became the study of benzene and the Oxazole. For this aim it was used like calculation tools the program package Gaussian 03, making use of the approaches of Hartree-Fock and the Density Functional Theory (DFT) one. For case DFT was used hybrid functional B3LYP along with the bases functions 6-31+G (d). Several global molecular descriptors were considered such as the hardness, chemical potential, electronegativity and the dipole moment for each molecule and the alteration influence of the molecular chain in the values of these molecular descriptors was determined as a form to be able to make a comparison among them and its relation with the molecular structures, taking as criterion the influence of the alteration of one structures molecular initial (unsubstitued 1.3 Benzoxazol) by means of the addition of some type of ring that changes the length of its chain of pi-conjugated connections or by means of the substitution of one of lateral hydrogens by a halogen

**Keywords:** benzoxazoles, pi-conjugated bonds, Gaussian, Hartree-Fock and the Density Functional Theory.

---

## 1. INTRODUCCIÓN

La molécula de Benzoxazole y sus derivados son de gran importancia tanto para la Espectroscopia Óptica como para la Física del Láser, dado que experimentalmente se ha encontrado en algunas de ellas el efecto láser<sup>[1-20]</sup>. De otro lado, se sabe que la alteración de la estructura molecular inicial mediante el cambio de su longitud de la cadena molecular a través de la adición de algún tipo de anillo o la sustitución de uno de los hidrógenos laterales de la cadena molecular por un sustituyente (donor o aceptor de electrones) en una posición estratégica de alguno de los anillos de la estructura molecular inicial, en muchos casos ha permitido obtener el efecto láser en otras regiones de interés u obtener el efecto láser en una estructura donde antes no había sido posible<sup>[21-28]</sup>. Todo esto muestra, como es posible ir barriendo diferentes regiones espectrales y ampliar cada vez más el ancho espectral con el efecto láser mediante la utilización de los colorantes como medios activos.

La aparición de la Química Computacional a mediados de la década de los 70s ha permitido aplicar los desarrollos de la Química Cuántica, la Mecánica Cuántica y la Mecánica Estadística al diseño y caracterización de moléculas<sup>[24-25,29]</sup>. Todo esto, gracias al avance de las capacidades de cálculo de los ordenadores, lo que posibilitó la optimización de estructuras moleculares para el estudio de su estructura electrónica. Estos aspectos muestran la posibilidad de diseñar nuevas estructuras moleculares sin la previa síntesis. Recientemente como una prueba de los alcances de estos enfoques está el estudio de complejos metálicos de hidroxiquinolina sustituida<sup>[26]</sup>. Entre los paquetes informáticos de Química Cuántica Computacional que han ganado adeptos en los campos de las investigaciones teóricas en estudio de estructuras electrónicas están el Gaussian y el Spartan

Dado que dentro de las sustancias que presentan propiedades apropiadas de fluorescencia y el efecto láser en el UV cercano, se destacan los compuestos orgánicos de tres anillos y en la región visible, estructuras más complejas que incluyen este tipo de fragmentos de tres anillos en su estructura<sup>[23-24,27]</sup>. Considerando que entre las estructuras moleculares de tres anillos juegan un papel importante algunos derivados del 1,3 benzoxazol<sup>[4,12]</sup>, en el presente artículo un primer avance del estudio comparativo de las propiedades electrónicas de cuatro moléculas derivadas, utilizando para su descripción características globales de las moléculas con el propósito de encontrar alguna relación con sus propiedades ópticas; y de esta manera buscar nuevas luces en la comprensión de sus propiedades ópticas de absorción, fluorescencia y de emisión láser, aspectos importantes para la *Espectroscopia Molecular* y la *Física del Láser*.

La modificación de la longitud de la cadena molecular se implementó con la adición de anillos de benceno y el efecto de sustituyentes halógenos en términos de algunos descriptores moleculares globales en el marco de la teoría Ab Initio HF y de la DFT. Para este fin se utilizaron como herramientas de cálculo el paquete de programas Gaussian 03, haciendo uso de los enfoques de Hartree-Fock y de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), junto con las funciones base 6-31+G (d), Para el caso DFT se empleó la funcional híbrida B3LYP.

Para el cálculo de los descriptores moleculares se utilizaron los orbitales moleculares de frontera y el teorema de Koopmans<sup>[28]</sup> que permite expresar estas propiedades globales (potencial químico, dureza, electronegatividad, etc.) en términos de las Energías de los orbitales moleculares de frontera HOMO (High Occupied Molecular Orbital) y LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Se analizó la dureza molecular ( $\eta$ ), la cual es una propiedad global del sistema que mide la resistencia impuesta por éste al cambio en su distribución electrónica. De igual forma se analizó la electronegatividad ( $\chi$ ), propiedad que mide la tendencia de los electrones a permanecer en el sistema en equilibrio. Para calcular  $\eta$  y  $\chi$  se debe hacer uso de la aproximación de diferencias finitas, conduciendo finalmente a las expresiones:

$$\eta \approx \frac{1}{2}(I - A) = \frac{1}{2}(E_L - E_H) \quad \chi \approx \frac{1}{2}(I + A) = -\frac{1}{2}(E_L + E_H)$$

Para obtener estas expresiones, se tuvo en cuenta que

$$\begin{aligned} \eta &\approx \frac{1}{2}(I - A) & \chi &\approx \frac{1}{2}(I + A) \\ I &= -E_H & A &= -E_L \end{aligned}$$

Donde  $I = E(N-1) - E(N)$  es el primer potencial de ionización y  $A = E(N+1) - E(N)$  es la afinidad electrónica.

## 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La búsqueda de medios activos para los láseres sintonizables con base a colorantes, está directamente relacionado con su estructura molecular<sup>[20-28]</sup>. De otro lado, se sabe que al bordar el estudio de algunos aspectos relacionados con el problema “*Primer problema fundamental de interés común de la Espectroscopia Óptica Molecular y la Física del Láser*”<sup>[4,12, 21-23]</sup>, dentro de las propuestas reportadas por la literatura, está el uso de compuestos de tres anillos y estructuras más complejas que incluyen este tipo de fragmentos de tres anillos en su estructura. Una de dichas estructuras es el 1,3 benzoxazol sustituido, dado que poseen buenas propiedades de absorción, fluorescencia y en algunos incluso ha sido posible obtener el efecto láser.

En el marco de la teoría Ab Initio HF y de la DFT teórica de estas moléculas con base a descriptores moleculares globales en el marco de la teoría Ab Initio HF y de DFT surge la inquietud ¿Qué puede aportar la comparación de las estructuras electrónicas del estado fundamental de cuatro moléculas derivadas del 1,3 benzoxazol, con base a descriptores moleculares globales tales como la dureza, potencial químico, electronegatividad, momento bipolar entre otros, para una mejor comprensión de las propiedades ópticas del benzoxazole y algunas moléculas derivadas, teniendo en cuenta que ellas presentan un interés en la física del láser?.

### 3. METODOLOGIA Y DETALLES COMPUTACIONALES


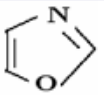
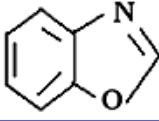
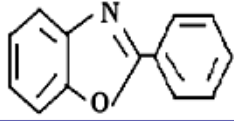
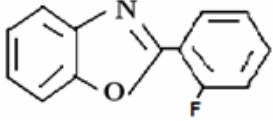
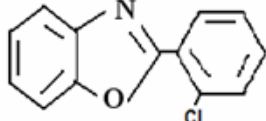
Para encontrar una respuesta al interrogante planteado se decidió iniciar con un estudio teórico de la estructura electrónica del benzoxazole y algunas moléculas derivadas, cuyas estructuras fueron seleccionadas tomando como criterio la influencia de la alteración de una estructura molecular inicial (1,3 Benzoxazol no sustituido ) mediante la adición de algún tipo de anillo que cambie la longitud de su cadena de enlaces pi-conjugados o mediante la sustitución de uno de los hidrógenos laterales por un halógeno y su conexión con la influencia en los valores de los diferentes descriptores moleculares globales (dureza, potencial químico, electronegatividad, momento bipolar entre otros) para cada molécula.

La modificación de la longitud de la cadena molecular se implementó con la adición de anillos de benceno y el efecto de sustituyentes halógenos en términos de algunos descriptores moleculares globales en el marco de la teoría Ab Initio HF y de la DFT. Para este fin se utilizaron como herramientas de cálculo el paquete de programas Gaussian 03, haciendo uso de los enfoques de Hartree-Fock y de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), junto con las funciones base 6-31+G (d), Para el caso DFT se empleó la funcional híbrida B3LYP.

### 4. ESTRUCTURAS MOLECULARES Y JUSTIFICACIÓN

Las estructuras moleculares que se proponen como objeto de estudio se muestran en la Tabla No.1, las cuales pertenecen a la familia de los Benzoxazoles. Algunas de este tipo de moléculas hacen parte de la gran variedad de moléculas orgánicas que presentan el efecto láser. Dado que las moléculas objetos de estudio incluyen como parte de su estructura el fragmento que surge de la fundición de un anillo de benceno y uno de oxazol se consideró conveniente incluir estos dos anillos para hacer una mejor comparación.

Tabla No. 1 Estructuras Moleculares Objeto de Estudio

	ESTRUCTURA MOLECULAR		ESTRUCTURA MOLECULAR
I		II	
III		IV	
V		VI	

### 5. RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSIÓN

Las tablas No 2 y No 3 muestran las diferentes propiedades moleculares globales determinadas para cada una de las estructuras moleculares estudiadas usando los enfoques DFT y HF respectivamente.

Observando los valores para el momento dipolar de cada sistema, se puede ver que para el benceno es cero mientras que para el oxazol es diferente de cero en ambos enfoques teóricos (HF y DFT). Para el caso del benceno, los resultados teóricos concuerdan con el comportamiento real del benceno como una molécula no polar en ambos enfoques teóricos

(HF y DFT), al igual que los resultados teóricos obtenidos para la distancia  $C \cdots C$  en el benceno, están de acuerdo con los valores obtenidos mediante estudios de difracción electrónica y espectroscopia IR, los cuales muestran que dicho valor es de 1.39 Å [34]

**Tabla No 2.** Propiedades moleculares globales de las moléculas objeto de estudio según Teoría del Funcional de la Densidad, con la funcional híbrida B3LYP y las funciones base 6-31+G (d)

MOLÉCULA	MÉTODO	FUNCIONES BASE	ENERGÍA (eV)	M. DIPOL. (Debye)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	GAP DE ENERGÍA (eV)	ELECTR. ( $\gamma$ )	DUR. ( $\eta$ )
I	DFT RB3LYP	6-31+G(d)	-6319,97	0,00	-7,02	0,30	6,72	3,36	3,66
II	DFT RB3LYP	6-31+G(d)	-6695,98	1,52	-7,10	-0,82	6,29	3,96	3,14
III	DFT RB3LYP	6-31+G(d)	-10.877,28	1,40	-6,86	-5,68	1,18	6,27	2,84
IV	DFT RB3LYP	6-31+G(d)	-17.165,04	1,16	-6,30	-1,78	4,51	4,04	2,25
V	DFT RB3LYP	6-31+G(d)	-19.865,36	0,92	-6,37	-1,90	4,46	4,14	2,23
VI	DFT RB3LYP	6-31+G(d)	-29.670,84	0,72	-6,39	-1,97	4,42	4,18	4,42

**Tabla No 3.** Propiedades moleculares globales de las moléculas objeto de estudio según el enfoque HF a nivel de teoría funciones base 6-31+G (d).

MOLÉCULA	MÉTODO	FUNCIONES BASE	ENERGÍA (eV)	M. DIPOL. (Debye)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	GAP DE ENERGÍA (eV)	ELECTR. ( $\gamma$ )	DUR. ( $\eta$ )
I	RHF	6-31+G(d)	-6277,87	0,00	-9,17	2,29	11,46	3,44	5,73
II	RHF	6-31+G(d)	-6656,47	1,44	-9,39	2,01	11,40	3,69	5,70
III	RHF	6-31+G(d)	-10.811,11	1,35	-8,91	1,97	10,88	3,47	5,44
IV	RHF	6-31+G(d)	-17.057,87	1,27	-8,23	1,81	10,04	3,21	5,02
V	RHF	6-31+G(d)	-19.747,65	1,23	-8,31	1,71	10,02	3,30	5,01
VI	RHF	6-31+G(d)	-29.544,64	1,02	-8,34	1,61	9,95	3,36	4,97

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos para los momentos dipolares del benceno y el Oxazol, se puede inferir que en caso de usar estos anillos para alargar la cadena molecular con base a los enlaces pi conjugados, permitirá alcanzar regiones de longitudes de onda mayores, con la diferencia que el oxazol creará la tendencia de interactuar mas con las moléculas del solvente polar, debido a su momento bipolar, aspecto importante para el caso de medios activos de Láseres de colorantes en fase líquida. Otro aspecto interesante que surge al comparar los resultados encontrados para el Benceno y el Oxazol es que el primero tiene una dureza mayor, una electronegatividad menor y una brecha(gap) de energía mayor, aspectos que explican la mayor estabilidad química (menor reactividad química) del benceno en comparación con el Oxazol, sugiriendo según los resultados teóricos obtenidos que se necesita mayor energía para que se de la transición de electrón del orbital electrónico pi al orbital electrónico pi conjunto; con la particularidad que la molécula de benceno presenta una mayor resistencia a su deformación para la variación de su dipolo involucrado en la transición óptica en comparación con la misma situación para el Oxazol.

Otro aspecto que muestra la validez de los resultados teóricos obtenidos, es el hecho que para el caso que éstos dos anillos estén como fragmentos en una estructura molecular similar mas compleja, pero que estén en la misma posición específica, es decir, el benceno en una estructura y el Oxazol en la otra, debido a su diferencia de valores de electronegatividad el benceno es menos activo que el Oxazol en tendencia de capturar electrones, es decir, originar transferencia de carga, cuando estén cerca de un sustituyente donador de carga, que esté cerca de ellos. Los resultados teóricos obtenidos para la distancia  $C \cdots C$  en el benceno, están de acuerdo con los valores obtenidos mediante estudios de difracción electrónica y espectroscopia IR, los cuales muestran que dicho valor es de 1.39 Å <sup>[31]</sup>

Para el caso del Benzoxazol por ser una estructura más compleja que el benceno y el Oxazol, los resultados teóricos obtenidos tanto en el enfoque HF y DFT, muestran que el Benzoxazol tiene un valor de energía más negativa que el benceno y el Oxazol. Esto puede explicarse que éste sistema visto como el resultado de la fundición de éstos dos anillos, es decir un sistema mas complejo (mas átomos, es decir, mas electrones y núcleos) requiere mas energía para la construcción de dicho sistema como un sistema ligado estable, es decir con energía negativa. Esta regularidad se observa también cuando al bezoxazol se le adiciona un anillo de benceno (compuesto III), dos anillos de benceno (compuesto IV) y luego a éste nuevo compuesto se le hace una sustitución halógena en uno de sus hidrógenos laterales (compuestos V y VI). Los resultados teóricos usando los enfoques HF y DFT precisamente confirman esta regularidad. Los resultados teóricos obtenidos para la distancia  $C \cdots C$  en el benceno, de las nuevas estructuras están de acuerdo con los valores obtenidos mediante estudios de difracción electrónica y espectroscopia IR, los cuales muestran que dicho valor es de 1.39 Å <sup>[31]</sup>

Los resultados teóricos del momento dipolar muestran que para el Benzoxazol tenga un momento dipolar mayor que el del benceno, pero menor que el del Oxazol. Esto también es posible de ser interpretado si se tiene en cuenta que el bezoxazol visto como un sistema resultado de la fundición del benceno cuyo momento dipolar es nulo, con el Oxazol cuyo momento dipolar, y debería obtenerse una estructura con un momento dipolar no nulo, cuyo valor este mas cercano al del Oxazol. Para el caso de la electronegatividad (tendencia del sistema a captar electrones), los cálculos sugieren una tendencia intermedia entre el del benceno y el Oxazol, lo cual si se desea construir una estructura molecular que se use como medio activo en fase líquida, con solventes que pueden ser polares, éste compuesto tendría menos influencia del solvente que cuando se usa un anillo de Oxazol. Los resultados teóricos muestran una gran concordancia con el comportamiento experimental de compuestos, cuya estructura molecular es de este tipo <sup>[2, 6, 12]</sup> construidos. En ese caso para cubrir zonas de mayores longitudes espectrales, bastaría con agregar anillos de benceno si el solvente es polar y podría combinar anillos de benceno y Oxazol si el medio no es polar. Esto está de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos en los reportes de los trabajos <sup>[22-23, 27]</sup>.

## 6. CONTRIBUCIÓN CIENTÍFICA

Se logró obtener un aporte para una mejor comprensión de las propiedades ópticas del benzoxazole y algunas moléculas derivadas, a partir de la comparación de las estructuras electrónicas del estado fundamental de cuatro moléculas derivadas del 1,3 benzoxazol, con base a descriptores moleculares globales tales como la dureza, potencial químico, electronegatividad, momento dipolar

## 7. REFERENCIAS

1. [Ernsting, N. P.](#); [Nikolaus, B.](#) Dye-laser pulse shortening by transient absorption following excited-state intramolecular proton transfer, [Applied Physics B: Lasers and Optics](#), Volume 39, No 3, pp.155-164. **1986**
2. Sehoon Kim, Soo Young Park. Synthesis and Properties of Highly Fluorescent Liquid Crystals Containing Benzoxazole Moiety [Molecular Crystals and Liquid Crystals](#), Volume **337**, pages 405 – 408, **1999**
3. Emmanuel Marfo-Owusu, Masafumi Yoshio, Takashi Kato. The Influence of Hydrogen Bonding on Generation and Stabilization of Self-Assembled Layer Structure of 6-[4-(*Trans*-4-pentylcyclohexyl)phenoxy]hexane-1,2-diol , [Molecular Crystals and Liquid Crystals](#), Volume **490**, pages 43 – 51, **2008**
4. [Barkova, L.A.](#) ; [Gruzinskii, V.V.](#) ; [Danilova, V.I.](#) ; [Degtvarenko, K.M.](#) ; [Kopylova, T.N.](#) ; [Kuznetsov, A.L.](#) Stimulated emission of Benzoxazoles dye lasers. Sov. J. Quant. Electron. Vol/Issue: 11:8, 1981
5. [Yukie Kanegae](#), [Katrina Peariso](#), and [Studer Shannon Martinez](#) Class of Photostable, Highly Efficient UV Dyes: 2-Phenylbenzoxazoles [Applied Spectroscopy](#), Vol. 50, Issue 3, pp. 316-319. **1996**
6. Masashi Ikegami<sup>1)</sup> and Tatsuo Arai, Laser Flash Photolysis Study on Hydrogen Atom Transfer of

- 2-(2-Hydroxyphenyl)benzoxazole and 2-(2-Hydroxyphenyl)benzothiazole in the Triplet Excited State, Vol. 29 , No. 9, p.996-1000, **2000**.
7. Shen Yongjia and Ren Shengw, Photophysical and photochemical properties of benzoxazole fluorescent whitening agents , [Dyes and Pigments, Volume 15, Issue 2](#) , , Pages 157-164, **1991**
  8. [Rullière, C.](#); [Joussot-Dubien, J.](#) , Dye laser action at 330 nm using benzoxazole: A new class of lasing dyes Optics Communications, Volume 24, Issue 1, p. 38-40., **1978**
  9. US Patent 4933948 - Dye laser solutions, June 12, **1990**.
  10. N. P. Ernsting and B. Nikolaus. Dye-laser pulse shortening by transient absorption following excited-state intramolecular proton transfer [Applied Physics B: Lasers and Optics](#), Volume 39, Number 3 , **1986**
  11. Jian-Mei Lu, Qing-Feng Xu, Xin Yuan, Xue-Wei Xia, Li-Hua Wang. Synthesis of AB-type block copolymers containing benzoxazole and anthracene groups by ATRP and fluorescent property [Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry](#), Volume 45 Issue 17, Pages 3894 – 3901, **2007**
  12. [V V Gruzinskiĭ](#), [V I Danilova](#), [T N Kopylova](#), [P I Petrovich](#) and [E Yu Shishkina](#). Stimulated emission of ultraviolet radiation by benzoxazoles, *Sov. J. Quantum Electron.* Vol.10, 678-681, **1980**
  13. X. Shang, G. Tang, G. Zhang, Y. Liu, W. Chen, B. Yang, and X. Zhang, " Optical nonlinearities and transient dynamics of 2-(2'-hydroxyphenyl) benzoxazole studied by single-beam and time-resolved two-color Z-scan techniques," *J. Opt. Soc. Am. B* **15**, 854-862, **1998**
  14. Christoph Kocher, Paul Smith and Christoph Weder. Aromatic 2-(2-hydroxyphenyl)benzoxazole esters: a novel class of caged photoluminescent dyes, *J. Mater. Chem.*, 12, 2620 - 2626, 2002.
  15. Asuka Ohshima, Masashi Ikegami, Yoshihiro Shinohara, Atsuya Momotake and Tatsuo Arai. The Effect of *meta*-Substitution on the Photochemical Properties of Benzoxazole Derivatives, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, Vol. 80, No. 3 pp.561-566, **2007**
  16. Ying Wang, Chongqing, Sichuan; Wan-Hui Liu; Ji-Hong Wang; Ke-Min Wang; Guo-Li Shen; Ru-Qin Yu, A New Optical Chemical Sensor Based on Benzoxazole and Its Application to the Determination of Ethacrynic Acid. [Analytical Letters](#), Volume **30**, Issue **2** , pages 221 – 233, **1997**
  17. Lee, L.; Robb, R. Water soluble blue-green lasing dyes for flashlamp-pumped dye lasers, *Quantum Electronics*, IEEE Journal of Volume 16, Issue 7, Page(s): 777 – 784, **1980**  
Digital Object Identifier
  18. Naira Maria Balzaretti, Márcia Russman Gallas, Tânia Maria Haas Costa, Valter Stefani, Cláudio Antônio Perottoni, João Alziro Herz da Jornada. Raman investigation of 2,5-bis(benzoxazol-2 -yl)-4-methoxyphenol under high pressure [Journal of Raman Spectroscopy](#) Volume 34 Issue 3, Pages 244 – 247, 2003
  19. [M A Al'perovich](#), [G G Dyadyusha](#), [O V Przhonskaya](#), [T N Smirnova](#), [Yu L Slominskiĭ](#), [E A Tikhonov](#), [Alexei I Tolmachev](#), [V S Tyurin](#) and [M T Shpak](#) Active media for near-infrared polymethine dye lasers, *Sov. J. Quantum Electron.* **9**, 725-728, 1979
  20. Ying-Hung So; Jeffrey M. Zaleski; Cheryl Murlick y Ahmed Ellaboudy. "Synthesis and Photophysical Properties of Some Benzoxazole and Benzothiazole Compounds". *Macromolecules*, Vol. **29** (8), Pg. 2783 -2795, **1996**.
  21. Tania M. H. Costa; Valter Stefani; Márcia R. Gallas; Naira M. Balzaretti y João A. H., "Fluorescence properties of benzoxazole type dyes entrapped in a silica matrix by the sol-gel method", *Journal of Nuclear Medicine* Vol. **48**, 2001.
  22. Neira Bueno O. L, Gruzinskiy Victor and Seniuk Alexander."Laser generation obtention in complexes that are formed in excited states". *Proceedings SPIE-The International Society for Optical Engineering. Vol. 2730, p. 539-541, 1996*
  23. Neira Bueno O. L, Gruzinskiy Victor y Seniuk Alexander "New active media based on bifluorophormic compounds for dye lasers". *Proceedings SPIE-The International Society for Optical Engineering. Vol. 2730, p. 535-538, 1996*
  24. Christian Diedrich and Stefan Grimme. Systematic Investigation of Modern Quantum Chemical Methods to Predict Electronic Circular Dichroism Spectra. *J. Phys. Chem.* Vol. **107**, pags. 2524-2539, 2003.
  25. Neira B. Oscar Leon", Mejia Elio Fabio " y Rincon B. Elizabeth "Comparative study of three fundamental organic compounds of chain structure of three rings an approach based in the molecular descriptors of the DFT {density functional theory}". *American Institute of Physics*, Vol. 978, p7354-0511, **2008**
  26. Francisco Núñez-Zarur; Ricardo Vivas- Reyes. "Ab initio study of luminescent substituted 8-hydroxyquinoline metal complexes with application in organic light emitting diodes". *Journal of Molecular Structure*, Vol. **850**, p. 127-134, **2008**.

27. V. V. Gruzinskiy, M. A. Senyuk, Neira Bueno Oscar Leon and L. Sh. Afanasiadi. "Spectral-luminescent and lasing characteristics of active media based on new bifluorophormic compounds" *Journal of Applied Spectroscopy*. **Vol. 58**, N° 1-2, 73-77, **1994**.
28. Parr, R. G and Pearson R.G . *J Am. Chem. Soc.* Vol. 105, 7512, **1983**
29. R.G. Parr and W. Yang "*Density Functional Theory of Atoms and Molecules*" Oxford University Press: New York **1989**.
30. Sengupta, S. and Toro-Labbe. *J. Phys. Chem.* **Vol. 106**, p. 4443-4446, **2002**.
31. Tables of Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Lons. **1958**