



# 5th International Symposium on Master Engineering *Booklets*



RENIECYT - LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - Google Scholar DOI - REDIB - Mendeley - DIALNET - ROAD - ORCID - V|LEX - EBSCO

## Title: Study of the correlation between theoretical-experimental vibrational analysis using ftir and raman techniques for the analysis of polypyrrole particles obtained by oxidative polymerization

Authors: García-Juárez, Monserrat, López-Hernández, Juan, Kantun-Uicab, María Cristina, Torres-Ochoa, Jorge Alejandro and Rodríguez-Sánchez, Isis

Editorial label MARVID: 607-8695

BMARVID Control Number: 2025-01

BMARVID Classification (2025): 021025-0001

Pages: 05

RNA: 03-2010-032610115700-14

### MARVID-México

Park Pedregal Business. 3580,  
Anillo Perif., San Jerónimo  
Aculco, Álvaro Obregón,  
01900 Ciudad de México, CDMX,  
Phone: +52 1 55 6159 2296  
Skype: MARVID-México S.C.  
E-mail: [contact@marvid.org](mailto:contact@marvid.org)  
Facebook: MARVID-México S. C.  
X: @Marvid\_México

[www.marvid.org](http://www.marvid.org)

### Holdings

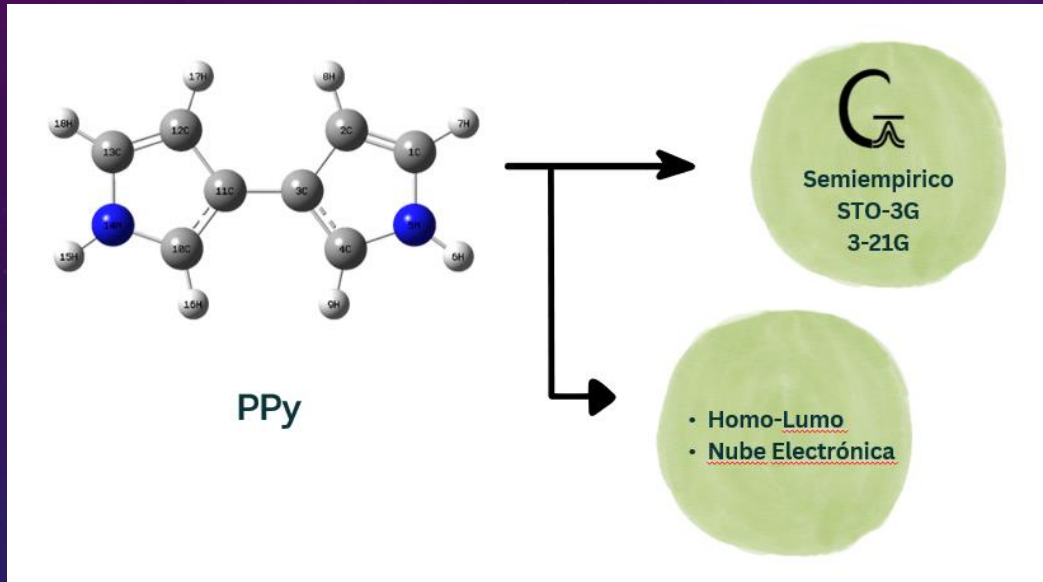
Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic
Spain	El Salvador	Republic
Ecuador	Taiwan	of Congo
Peru	Paraguay	Nicaragua

# INTRODUCCIÓN

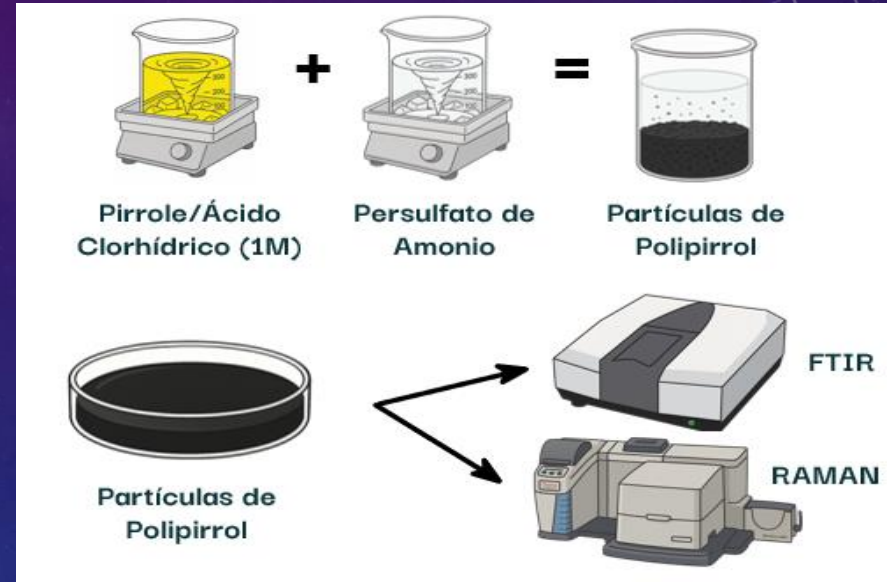
El polipirrol (PPy) es un polímero conductor ampliamente estudiado por sus aplicaciones en sensores, electrónica y sistemas energéticos. Su estructura y estado de oxidación pueden evaluarse mediante técnicas vibracionales, especialmente FTIR y Raman, que permiten identificar modos vibracionales característicos y cambios en la conformación del polímero.

La comparación entre los espectros experimentales y el análisis teórico aporta una visión más precisa de la estructura molecular del PPy y de los efectos de su proceso de síntesis. En este trabajo se analiza la correlación entre ambos enfoques para partículas de polipirrol obtenidas por polimerización oxidativa, con el objetivo de comprender mejor sus propiedades estructurales y vibracionales

# METODOLOGÍA



Análisis computacional en Gaussian 9 del Polipirrol (PPy) en estado neutro



Síntesis y caracterización del Polipirrol (PPy)

# RESULTADOS

Análisis del HOMO- LUMO y la nube electrónica realizado en Gaussian 9

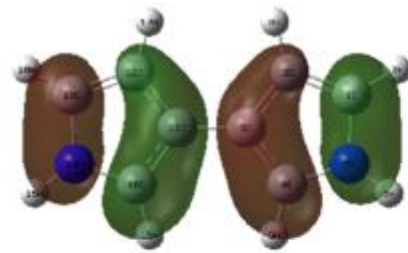


Fig. 1. HOMO

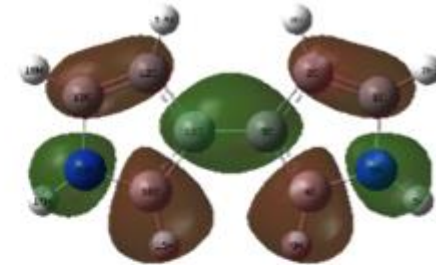
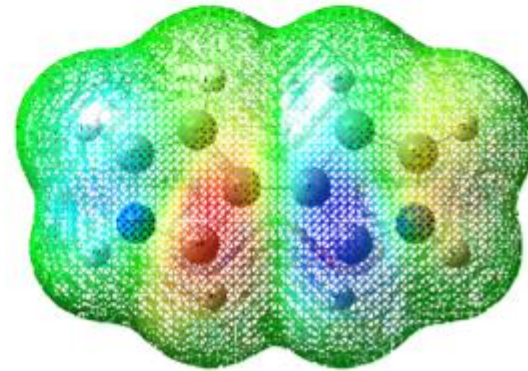


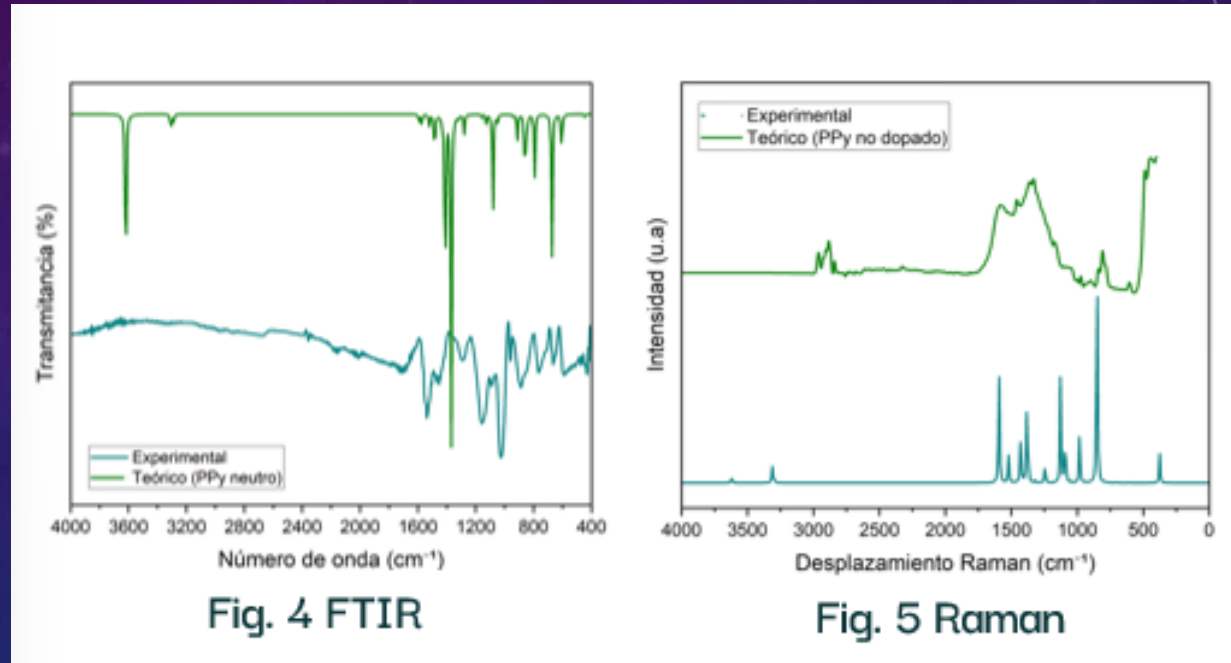
Fig. 2. LUMO

Fig. 3  
NUBE ELECTRONICA



# RESULTADOS

Comparativa del FTIR teórico y experimental y Raman teórico y experimental



# CONCLUSIONES

El análisis vibracional mediante FTIR y Raman confirma diferencias claras entre el polipirrol sintetizado y el modelo teórico del PPy no dopado. En FTIR en la región de  $900\text{--}1300\text{ cm}^{-1}$  indica la existencia de especies cargadas y un estado de oxidación significativo, mientras que el PPy no dopado muestra un espectro más definido, con la banda característica de estiramiento N–H ( $\sim 3400\text{ cm}^{-1}$ ).

Del mismo modo, el Raman experimental presenta bandas intensificadas y desplazadas respecto al espectro teórico, especialmente en  $1500\text{--}900\text{ cm}^{-1}$ , lo que respalda la presencia de dopaje. En conjunto, ambos análisis vibracionales demuestran que las partículas de polipirrol obtenidas por polimerización oxidativa no corresponden a la forma neutra del polímero, sino que presentan un grado notable de dopaje y una estructura más conjugada y cargada que la predicha por el modelo teórico.



**MARVID®**

© MARVID-Mexico

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162, 163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169, 209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BMARVID is part of the media of MARVID-Mexico., E: 94-443.F: 008- ([www.marvid.org/booklets](http://www.marvid.org/booklets))