



CÁLCULOS DFT EN MATERIALES ORGÁNICOS CONJUGADOS: IMPORTANCIA EN EL ANÁLISIS DE LOS DATOS EXPERIMENTALES

Rafael C. González-Cano¹, Juan T. López Navarrete¹, M. Carmen Ruiz Delado¹

¹Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, c/ Louis Pasteur s/n, 29071, Málaga, rafacano@uma.es.

Actualmente, y cada vez con mayor intensidad, los materiales orgánicos policonjugados se están erigiendo como la alternativa ecológica real al uso de silicio en materiales para dispositivos electrónicos. Este hecho se debe principalmente a una serie de ventajas que presentan frente a los materiales inorgánicos tradicionales, tales como bajo coste de producción, ligereza, flexibilidad, disponibilidad para ser impresos y posibilidad de interacción con material biológico. Éstos pueden estar constituidos por diferentes estructuras, desde moléculas discretas a polímeros, pasando por macromoléculas de mayor complejidad (fullereno, nanotubos, grafeno...). Hoy en día es posible encontrarlos integrados en dispositivos electrónicos como diodos emisores de luz orgánicos (OLEDs), células solares orgánicas (OSCs) y transistores orgánicos de efecto campo (OFETs) y presentados en diferentes soportes¹, constituyendo de este modo parte fundamental de la actualidad tecnológica comercial. Dado su impacto, son uno de los principales objetos de estudio, ya sea como estructuras moleculares^{2,3} o poliméricas⁴⁻⁶.

En el trabajo desarrollado se analizan las estructuras electrónicas y moleculares de diferentes materiales π -conjugados, las modificaciones que se pueden ejercer en los mismos y las propiedades exclusivas derivadas de éstas, pudiendo, de este modo, determinar su capacidad como potencial material semiconductor en aplicaciones optoelectrónicas. Para ello se han llevado a cabo una serie de experimentos (espectroscopía Raman y espectroscopía electrónica de absorción) cuyo resultado ha sido analizado en profundidad utilizando cálculos químico-cuánticos en DFT como herramienta analítica. Gracias, por tanto, a los cálculos realizados, es posible obtener una visión completa del comportamiento electrónico observado en diferentes modelos moleculares y poliméricos, así como esclarecer la causa que genera ciertos comportamientos inéditos hasta el momento en este tipo de materiales.

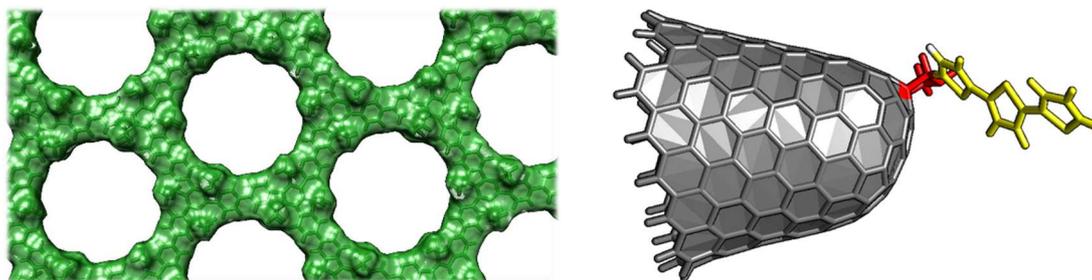


Fig. 1.- Ejemplos de algunas estructuras macromoleculares objeto de estudio

Referencias

- [1] S. R. Forrest, M. E. Thompson. *Chem Rev.* 107, (2007) 923.
- [2] R. C. González-Cano, G. Saini, J. Jacob, J. T. López Navarrete, J. Casado and M. C. Ruiz Delgado. *Chem. Eur. J.* 19, (2013), 17165.
- [3] J. L. Zafra, R. C. González-Cano, M. C. Ruiz Delgado, Z. Sun, Y. Li, J. T. López Navarrete, J. Wu and J. Casado, *J. Chem. Phys.*, 140, (2014), 054706.
- [4] M. Goll, A. Ruff, E. Muks, F. Goerigk, B. Omiecienski, I. Ruff, R. C. González-Cano, J. T. López Navarrete, M. C. Ruiz Delgado, S. Ludwigs, *Beilstein J. Org. Chem.* 11, (2015), 335.
- [5] D. Herrero-Carvajal, A. de la Peña, R. C. González-Cano, C. Seoane, J. T. López Navarrete, J. L. Segura, J. Casado, M. C. Ruiz Delgado, *J. Phys. Chem. C*, 118, (2014), 9899.
- [6] M. Scheuble, Y. M. Gross, D. Trefz, M. Brinkmann, J. T. López Navarrete, M. C. Ruiz Delgado, and S. Ludwigs, *Macromolecules*, 48 (2015), 7049.