

Caracterización Electrónica y Molecular de Materiales Orgánicos Conjugados: Estudio Experimental y Teórico

Rafael C. González-Cano¹, Juan T. López Navarrete¹, M. Carmen Ruiz Delgado¹

¹ Departamento de Química Física, Universidad de Málaga, Málaga, 29071, España. rafacano@uma.es

Palabras Clave: *Espectroscopía Raman, cálculos DFT, electrónica orgánica, materiales conjugados*

Actualmente, existe una alternativa ecológica plausible al uso de silicio en materiales para dispositivos electrónicos: los materiales orgánicos policonjugados. Éstos presentan una serie de ventajas frente a los materiales inorgánicos: bajo coste de producción, ligereza, flexibilidad, disponibilidad para ser impresos y posibilidad de interactuar con material biológico. Dichos materiales pueden ser desde moléculas discretas a polímeros, pasando por estructuras más complejas (fullereno, nanotubos, grafeno...). Se utilizan en dispositivos electrónicos como diodos emisores de luz orgánicos (OLEDs), células solares orgánicas (OSCs) y transistores orgánicos de efecto campo (OFETs), formando parte de la actualidad tecnológica comercial. Se presentan en diferentes soportes [1], y han sido objeto de estudio distintas estructuras moleculares [2,3] y poliméricas [4-6].

En el presente trabajo se analizan las estructuras electrónicas y moleculares de diferentes materiales π -conjugados y las modificaciones que en éstos se pueden ejercer, pudiendo así estudiar su capacidad como potencial material semiconductor en este tipo de aplicaciones. Para ello, se han llevado a cabo de forma paralela una serie de experimentos, incluyendo la espectroscopía Raman, en comparación con cálculos químico-cuánticos en DFT, obteniendo de este modo una visión completa del comportamiento electrónico observado en diferentes modelos moleculares y poliméricos.

Referencias

- [1] S. R. Forrest, M. E. Thompson. *Chem Rev.* **2007**, *107*, 923.
- [2] R. C. González-Cano, G. Saini, J. Jacob, J. T. López Navarrete, J. Casado and M. C. Ruiz Delgado. *Chem. Eur. J.* **2013**, *19*, 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.*, **2014**, *140*, 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.* **2015**, *11*, 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*, **2014**, *118*, 9899.
- [6] M. Scheuble, Y. M. Gross, D. Trefz, M. Brinkmann, J. T. López Navarrete, M. C. Ruiz Delgado, and S. Ludwigs, *Macromolecules*, **2015**, *48*, 7049.