



## Estudio teórico DFT de semiconductores orgánicos basados en isoindigo

OSCAR JAVIER HERNANDEZ ORTIZ<sup>1</sup>, Arian Espinoza<sup>2</sup>, Rosa Ángeles Vazquez García<sup>1</sup> y Mario Alejandro Rodríguez Rivera<sup>3</sup>

1 Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 2 Universidad Nacional Autónoma de México, 3 Centro de Investigaciones en Óptica, A. C.. ojavier.hdez@gmail.com

El desarrollo de nuevos materiales orgánicos con propiedades específicas para la fabricación de dispositivos fotovoltaicos y optoelectrónicos ha cobrado interés en los últimos años. La simulación computacional representa una alternativa para diseñar moléculas candidatas para su potencial aplicación en dispositivos tales como diodos emisores de luz (OLEDs), Celdas solares orgánicas (OSCs), entre otros. (1)

En este trabajo se presenta el estudio teórico DFT de una familia de ocho moléculas con arquitectura electrónica cuadrupolar basadas en el fragmento isoindigo (aceptor), acoplado a distintos grupos donadores mediante un puente  $\pi$ -conjugado. Los resultados obtenidos revelan que los compuestos estudiados presentan valores de band gap teóricos en el rango de 2.1-2.4 eV, lo que los sitúa en el rango de los semiconductores orgánicos. Las estimaciones teóricas de los niveles HOMO y LUMO indican una posible disociación de par electrón hueco en la interface del material donador y aceptor en al menos 3 de las moléculas, así como voltajes de circuito abierto (Voc) en un rango de 1.41-1.72 V, lo cual nos indica la facilidad de inyección de electrones. De acuerdo con las predicciones teóricas estos oligómeros son candidatos prometedores para su aplicación en dispositivos optoelectrónicos.

### Referencias

1. *The Harvard Clean Energy Project: Large-Scale Computational Screening and Design of Organic Photovoltaics on the World Community Grid*. **Hachmann, Johannes, y otros.** 17, s.l. : American Chemical Society Publications, 2011, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 2, págs. 2241-2251.