



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE HIDALGO

Estudio computacional de oligómeros con estructura D-A-D basado en los segmentos
aceptores DPP y BT

A. B. Enríquez^{1*}, R. A. Vázquez¹, M. A. Rodríguez², O. J. Hernandez¹

¹Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, ²Centro de Investigaciones en Óptica A.C.

Tabla de Contenido

1	Resumen.....	3
1.1	< Palabras Clave. >	3
2	Abstract.....	3
2.1	< Keywords: (3-5 word)>	4
3	Referencias.....	4

1 Resumen

En el presente trabajo se reporta el estudio teórico de 4 nuevas moléculas orgánicas usando DFT (Teoría del Funcional de la Densidad); las moléculas se diseñaron con arquitectura electrónica cuadripolar (D-A-D; donador-aceptor-donador), las cuales se proponen como materiales fotovoltaicos para su uso dentro de la capa activa de celdas solares orgánicas (OPVs). El estudio de la geometría molecular de las moléculas en estudio se realizó usando el programa Gaussian 09, GaussView 5, ChemCraft utilizando el modelo funcional B3LYP y un conjunto base 6-31G(d), dichos parámetros teóricos están reportados para evaluar la planaridad de las moléculas de sistemas π -conjugados y para predecir sus propiedades ópticas y eléctricas. (1)

El diseño de los oligómeros estudiados en este trabajo se basa en anillos aceptores como Diketopirrolpirrol (DPP) y Benzotiadiazol (BT), los cuales son buenos candidatos para diseñar materiales fotovoltaicos. La estructura de los oligómeros estudiados se completa enlazando covalentemente puentes π -conjugados y segmentos donadores de electrones como el Trifenilamino (TPA), Dietilfenilamina (DEA) y 5-hexil-2,2'-ditiofeno (HEDT).

Los resultados obtenidos revelan que los compuestos estudiados presentan valores de Band Gap teóricos en el rango de 1.4 a 2.0 eV, lo que los sitúa como semiconductores orgánicos, de igual manera los máximos de absorción calculados están dentro del rango de 200 a 1100 nm, confirmando la potencial generación de excitones por absorción en la región del visible. De acuerdo con el análisis de los parámetros eléctricos estimados para las moléculas indica que estas son candidatos con alto potencial para su uso en dispositivos fotovoltaicos.

1.1 < Palabras Clave. >

Orgánicos, cuadripolar, OPVs, excitones

2 Abstract

In the present work, the theoretical study of 4 new organic molecules is reported using DFT (Density Functional Theory); the molecules were designed with quadripolar electronic architecture (D-A-D, donor-acceptor-donor), which are proposed as photovoltaic materials for use within the active layer of organic solar cells (OPVs). The study of the molecular geometry of the molecules under study was performed using the Gaussian 09 program, GaussView 5, ChemCraft using the functional model B3LYP and a base set 6-31G (d), these theoretical parameters are reported to evaluate the planarity of the molecules of π -conjugated systems and to predict their optical and electrical properties. (1)

The design of the oligomers studied in this work is based on acceptor rings such as Diketopyrrolopyrrole (DPP) and Benzothiadiazole (BT), which are good candidates for designing photovoltaic materials. The structure of the oligomers studied is completed by covalently linking π -conjugated bridges and electron donor segments such as Trifenilamino (TPA), Diethylphenylamine (DEA) and 5-hexyl-2,2'-dithiophene (HEDT).

The obtained results reveal that the studied compounds have theoretical Band Gap values in the range of 1.4 to 2.0 eV, which places them as organic semiconductors, in the same way the calculated absorption maxima are within the range of 200 to 1100 nm, confirming the potential generation of excitons by absorption in the visible region. According to the analysis of the estimated electrical parameters for the molecules it indicates that these are candidates with high potential for use in photovoltaic devices.

2.1 < Keywords: (3-5 word)>

Organic, quadrupolar, OPVs, excitons

3 Referencias

Lal, N. (2014). International Journal of Advanced Research in Computer Science and Software Engineering. *International Journal*, 4(5).