



ESTUDIO TEÓRICO DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS BASADAS EN FENILBENZOFURANO CON MEJORAS EN EL TRANSPORTE ELECTRÓNICO

Damián Delgado-Montiel¹, Daniel Glossman-Miknit^{2,3}, Rody Soto-Rojo¹, Jesús Baldenebro-López¹

¹ Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa. Prol. Ángel Flores y Fuente de Poseidón, S/N, C.P. 81223, Los Mochis, Sinaloa; México

² Departament de Química, Universitat de les Illes Balears, 07122, Palma de Mallorca; Spain

³ NANOCOSMOS Virtual Lab, Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Miguel de Cervantes 120, C.P. 31136, Chihuahua, Chihuahua; México
e-mail: damian.delgado@uas.edu.mx

En el presente trabajo se expone un estudio sobre el modelado de moléculas orgánicas basadas en benzofurano en combinación con la molécula de benceno, cuyo objetivo es una mejora de del transporte electrónico de moléculas que puedan tener una potencial aplicación en el desarrollo de dispositivos electrónicos realizando la sustitución del componente orgánico. Actualmente es necesario cumplir con las demandas que en la actualidad hace el área de la electrónica orgánica en los diversos dispositivos que utilizan como componente principal algún tipo de polímero conductor orgánico^{1,2}. El modelado se ha realizado a distintas propuestas moleculares a través de un estudio de sus propiedades ópticas y electrónicas con respecto al incremento de unidades monoméricas y a las distintas conformaciones que son planteadas para cada propuesta. El estudio se realiza mediante la teoría de funcionales de la densidad, con los niveles de cálculo PBE0/6-31G(d), M06/6-31G(d) y B3LYP/6-31G(d). La correlación de resultados entre los funcionales muestra una tendencia favorable en la energía de reorganización a través del impacto de la inyección de carga sobre la geometría molecular y a la polarización de las moléculas. También se expone el análisis para la conducción de huecos, así como para la conducción de electrones. Un aspecto que se incluye en el análisis, es la determinación de algunos parámetros de reactividad que surgen a de DFT conceptual.

Referencias:

- (1) Yu P., Fundamentals of semiconductors, Springer, Berlin, 2010.
- (2) Xu J., Nie G., Zhang S.; *Eur. Polym. J.* **2005**, 41, 1654-1661.