



Una Introducción a la Electrónica Orgánica

An overview of Organic Electronics

Susana Lucia Estrada Flores¹, Cesar Garcias-Morales¹, Ricardo Sebastián Mirón Velázquez¹, Catalina M. Pérez Berumen¹ y Fabiola Noemí De la Cruz Duran¹

Recepción: 07/07/2021
Aceptación: 18/12/2021

Resumen

En este documento se da a conocer la importancia de los semiconductores orgánicos en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos, se abordan algunos conceptos fundamentales sobre la estructura molecular que deben ser considerados en el diseño de moléculas semiconductoras. Se resaltan ventajas y desventajas de los semiconductores orgánicos frente a los semiconductores inorgánicos. Para comprender la relación estructura-propiedad de este tipo de moléculas se presentan los conceptos básicos de la electrónica orgánica, la importancia de la ingeniería del band gap (E_g); así como el funcionamiento, características fisicoquímicas, propiedades optoelectrónicas y aplicaciones en celdas solares orgánicas (OPVs y DSSC), Diodos Orgánicos Emisores de Luz (OLEDs) y Transistores Orgánicos de Efecto de Campo (OFETs).

Palabras clave

Semiconductores orgánicos, optoelectrónica, band gap, diseño molecular, aplicaciones.

Abstract

In this review the value of organic semiconductors in the manufacture of optoelectronic devices is highlighted, as well as some fundamental concepts of molecular structure, which must be considered in the design of the semiconductor molecule. Some advantages and disadvantages of organic semiconductors over inorganic semiconductors are discussed. To understand the structure-properties relationship of this type of molecules, the basic concepts about organic electronics are presented, the importance of band gap engineering (E_g); as well as the operation, physicochemical characteristics, optoelectronic properties, and applications in organic solar cells (OPVs and DSSC), Organic Light Emitting Diodes (OLEDs) and Organic Field Effect Transistors (OFETs).

Keywords

Organic semiconductors, optoelectronics, band gap, molecular design, applications.

¹ Departamento de Química Orgánica, Universidad Autónoma de Coahuila, Saltillo, Coahuila, México.

Introducción

Desde el descubrimiento de la conducción eléctrica de las moléculas orgánicas, los científicos del área se han dedicado a entender y establecer la relación entre la estructura química y sus propiedades ópticas y electrónicas.

A principios de la década de los 70's, con la síntesis del nitruro de azufre polimérico (SN)_x; surge el primer polímero covalente con propiedades de superconducción a temperaturas bajas (Baughman et al., 1977; Greene et al., 1975; Guttman et al., 1973). Posteriormente, se descubrió que el polímero podía incrementar su conductividad al ser dopado con átomos de yodo (Mikulski et al., 1975) (Akhtar et al., 1977), Por su parte, Alan G. MacDiarmid y Alan J. Heeger y Hideki Shirakawa estudiaron y llevaron a cabo la polimerización del poliacetileno (CH)_x utilizando el catalizador de Ziegler-Natta (*The Nobel Prize in Chemistry 2000 - Advanced Information*, n.d.), normalmente se producía este polímero en su forma *cis* (el cual producía películas de color plateado); sin embargo, se podía isomerizar a su forma *trans*-poliacetileno (color cobre) mediante un tratamiento térmico para obtener el isómero más estable (Ito et al., 1974)(Shirakawa et al., 1973). No obstante el *trans*-poliacetileno se trataba de un compuesto aislante y al ser expuesto a vapores de yodo este presentaba conductividad (Shirakawa et al., 1977). En el año 2000 se otorgó el Premio Nobel de Química conjuntamente a Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid y Hideki Shirakawa por el descubrimiento y desarrollo de polímeros conductores (*The Nobel Prize in Chemistry 2000 - Advanced Information*, n.d.). A partir de estos descubrimientos se vino una revolución en el área de la electrónica orgánica y su aplicación en el área energética.

Uno de los temas emergentes más importantes en las últimas décadas es la transición energética, donde el uso de la electrónica orgánica ya es un hecho. Existen dispositivos basados en semiconductores orgánicos que incluso podemos encontrar en tecnologías de uso cotidiano. En la actualidad las universidades empiezan la incorporación de prácticas de laboratorio orientadas a la fabricación de dispositivos electrónicos como OLEDs (Banerji et al., 2013; Pappenfus et al., 2012) y OPVs (Jerez et al., 2020; Nicolaidis et al., 2020), los cuales son caracterizados a través de las curvas de densidad de corriente-voltaje (J-V) y/o corriente-voltaje (I-V) (Alfaro Guerra et al., 2019). Sin embargo, no se abordan los conceptos físicos-químicos que se deben considerar en la síntesis de los materiales orgánicos semiconductores utilizados en cada dispositivo. Este documento provee a los profesores y estudiantes una introducción a los conceptos de la electrónica orgánica, así como al diseño de materiales orgánicos semiconductores con propiedades optoelectrónicas deseables a través de la ingeniería de band-gap modificando la estructura química. Se trata de un documento que pretende, informar e impulsar en los estudiantes de química el tema de la electrónica orgánica.

Características estructurales de los semiconductores orgánicos

Los compuestos orgánicos semiconductores se caracterizan por tener conductividad eléctrica intermedia entre los materiales conductores y los aislantes. La superconducción de las moléculas orgánicas se debe principalmente a los dobles enlaces conjugados.

De acuerdo a la teoría de orbitales frontera, el orbital molecular ocupado de mayor energía se denomina HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*); en este se encuentran

los electrones de la última capa de valencia, por lo tanto, la suma de los orbitales HOMO en un sistema π -conjugado formaran la banda de valencia. Por otra parte, el orbital molecular de menor energía desocupado LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), se encuentra vacío y puede albergar electrones, adicionalmente si estos se encuentran en la misma orientación se puede llevar a cabo una deslocalización electrónica a través de los orbitales, por lo que se puede generar una conducción de electrones. Podemos decir entonces que la suma de los orbitales LUMO formará la banda de conducción.

Los orbitales frontera HOMO y LUMO se encuentran separados por una barrera de energía a la cual se le conoce como *band gap* ($E_g = \text{HOMO-LUMO}$). Con el aumento del número de enlaces π -conjugados en una molécula también aumenta el número de orbitales moleculares los cuales son confinados en un intervalo de energía, casi continuo, reduciendo la energía del *band gap*, como se ilustra en la Figura 1 (Brütting, 2006).

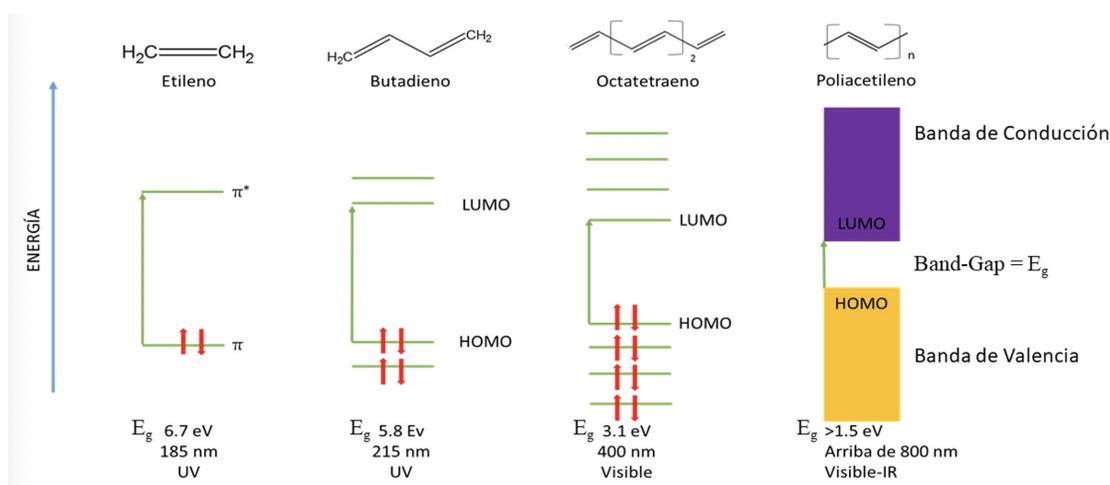


FIGURA 1. Relación entre la energía del *band gap* y el número de dobles enlaces de la molécula.

De una forma simplificada, podemos decir que una molécula orgánica se comporta como un aislante cuando $E_g > 5.0$ eV, mientras que se considera semiconductor cuando el valor de E_g es de 1.5 a 5.0 eV. En cambio en un conductor el valor de E_g es 0 eV (Bronstein et al., 2020).

Ingeniería de band gap en moléculas conjugadas semiconductoras

El valor de E_g , es una de las propiedades fisicoquímicas más importantes en un semiconductor orgánico ya que determina las propiedades ópticas y electrónicas de la molécula y por lo tanto su posible campo de aplicación. Por lo anterior, es importante entender la relación entre la E_g y la estructura química para diseñar moléculas con propiedades específicas. En la Figura 2, se muestran algunas propiedades estructurales que permiten la modulación de la E_g de una molécula. En resumen, el *band gap* de las moléculas está determinado por cinco contribuciones fisicoquímicas distintas $E_g = E^{\delta r} + E^{\theta} + E^{\text{res}} + E^{\text{sub}} + E^{\text{int}}$; donde la primera contribución está relacionada con el tamaño de la cadena conjugada y la conjugación efectiva $E^{\delta r}$ (Utesch & Diederich, 2003), a medida que aumente el número de dobles enlaces conjugados la E_g disminuye. La segunda contribución está relacionada con la desviación de

la planaridad de la molécula E^0 , una molécula plana dispone la alineación de los orbitales p no hibridizados lo que permite el flujo de electrones a través de los orbitales de la cadena conjugada funcionando como una banda de conducción. La tercera contribución es la energía relacionada a la estabilidad de la aromaticidad de un ciclo y la energía de deslocalización para la formación de estructuras quinoides E^{res} . La cuarta contribución se debe a los efectos inductivos electrónicos o mesoméricos causados por la sustitución de grupos funcionales en la molécula E^{sub} , grupos funcionales electro-donadores y electro-aceptores en la molécula favorecen el efecto *push-pull* provocando una redistribución de la densidad electrónica. La quinta contribución se debe al acoplamiento inter e intramoleculares en el estado sólido E^{int} . Consecuentemente, la principal estrategia para la síntesis de moléculas con *band gap* pequeños se basa en la reducción de las condiciones energéticas de cada uno de estos parámetros (Roncali, 1997)(Henson et al., 2012)(Son et al., 2011).

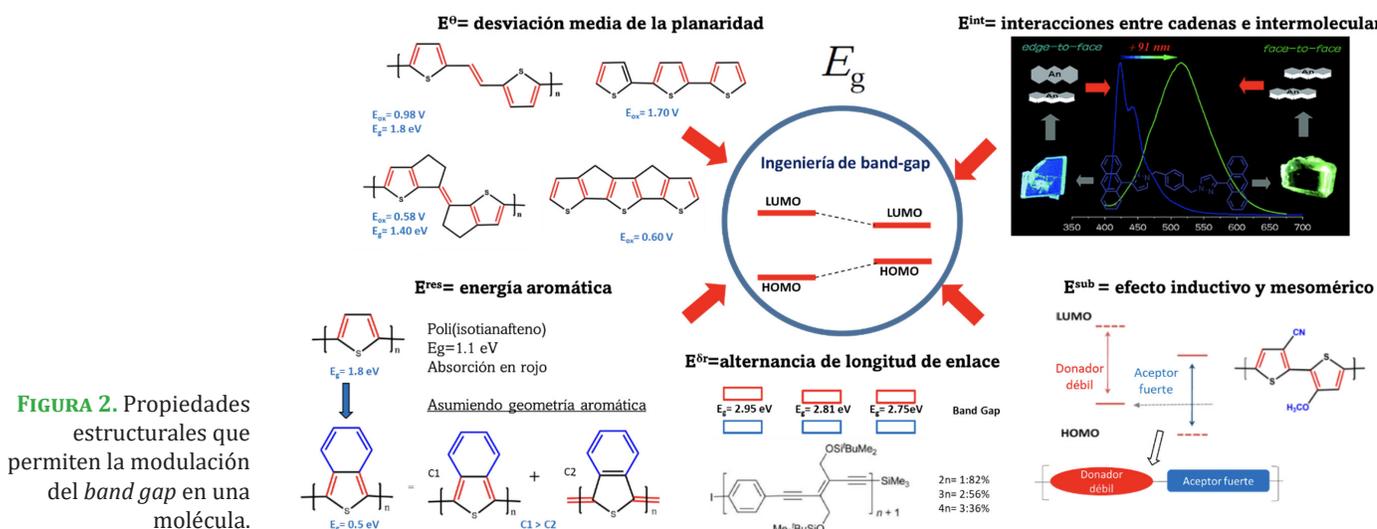


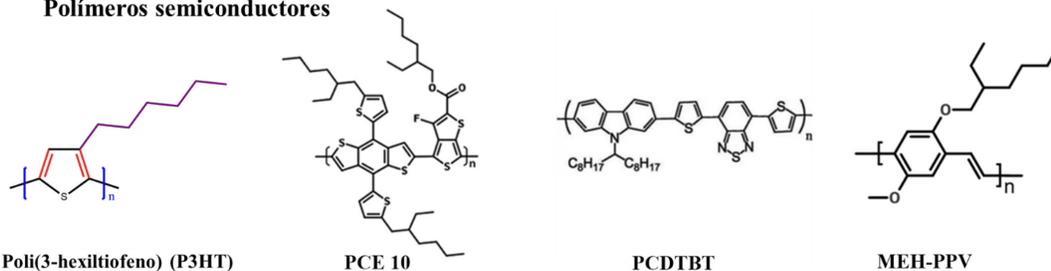
FIGURA 2. Propiedades estructurales que permiten la modulación del *band gap* en una molécula.

Clasificación de semiconductores orgánicos

Los semiconductores orgánicos se pueden dividir principalmente en; polímeros y moléculas de bajo peso molecular SM (*Small Molecules*). Los polímeros poseen buenas propiedades mecánicas (forman películas delgadas con morfologías regulares y buena flexibilidad), debido al tamaño de la cadena conjugada se consideran buenos semiconductores y muy estables. Sin embargo, tienen baja solubilidad, lo que los hace difíciles de procesar durante la fabricación de los dispositivos. Además, los polímeros generalmente no tienen un peso molecular bien definido por lo que cada lote de síntesis podría presentar propiedades ópticas y electrónicas diferentes.

Por otra parte, las SM tienen una estructura molecular y peso definido; se pueden depositar por evaporación debido al bajo punto de fusión, poseen mayor solubilidad por lo que pueden ser depositadas en un sustrato mediante deposición por centrifugación. Sin embargo, este tipo de moléculas no presentan buenas propiedades mecánicas y tienden a formar agregados cristalinos formando trampas de recombinación de cargas. La Figura 3 muestra algunos polímeros y moléculas de bajo peso molecular semiconductores empleadas en la fabricación de dispositivos electrónicos (J. Yang et al., 2018).

Polímeros semiconductores



Moléculas de bajo peso molecular semiconductoras

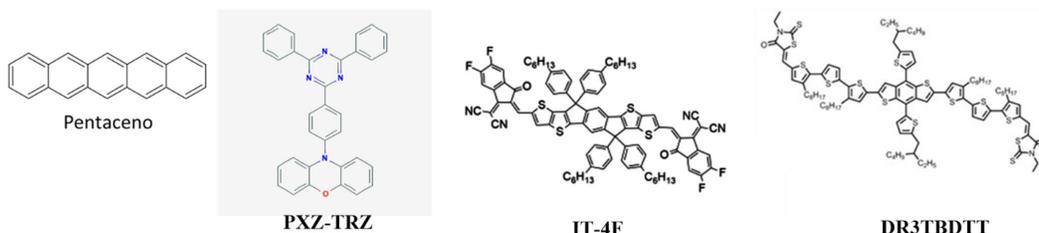


FIGURA 3. Algunas moléculas orgánicas de bajo peso molecular y polímeros semiconductores.

Ventajas y desventajas de los semiconductores orgánicos

Una de las principales ventajas de los dispositivos basados en semiconductores orgánicos frente a los inorgánicos es su bajo costo de fabricación, menor contaminación asociada a su fabricación y su disposición al final de la vida útil es amigable con el medio ambiente. Por otra parte los semiconductores orgánicos tienen mayor flexibilidad y presentan transparencia lo que permite colocarlos en diferentes superficies como en ventanas de edificios (Figura 4); al poder modificar los sustituyentes con los distintos grupos funcionales, se pueden favorecer las propiedades optoelectrónicas (Po et al., 2015). Los semiconductores orgánicos son solubles por lo que el método de fabricación puede ser por impresión permitiendo la fabricación de dispositivos de área grande y en sustratos flexibles empleando la técnica *Roll to Roll*, por lo que su uso puede ir desde nano-procesadores hasta la fabricación de piel electrónica (Figura 4). Una de las desventajas principales de las moléculas semiconductoras orgánicas es su rápida degradación (Henson et al., 2012) (Kang et al., 2016).

Transparencia de materiales



Flexibilidad de Materiales



Fabricación de dispositivos empleando *Roll to Roll*



Celdas solares orgánicas



Piel electrónica



OLEDs en pantallas flexibles



Microprocesador flexible



FIGURA 4. Algunas ventajas de los semiconductores orgánicos y sus aplicaciones.

Diseño de semiconductores orgánicos en la fabricación de dispositivos electrónicos

Celdas Fotovoltaicas Orgánicas (OPVs)

El funcionamiento de las OPVs (*Organic Photovoltaics*) se basa en la heterounión de un compuesto orgánico donador de electrones (D) encargado de la absorción de la luz solar y un material aceptor de electrones (A) que se encuentran localizados entre dos electrodos (Ánodo y Cátodo). De forma general, se requieren cuatro pasos para la generación de energía eléctrica: 1) La absorción de luz solar y formación del excitón, por los materiales de la capa activa (D); 2) La difusión del excitón hacia la interfase donador-aceptor, desde el sitio de formación del excitón; 3) La disociación del excitón en portadores de carga, debido a la transferencia de cargas entre el donador y el aceptor; 4) La recolección de los portadores de carga en los electrodos: huecos en el ánodo y electrones en el cátodo (Figura 5). La heterounión entre el donador y el aceptor en la celda se puede dar bajo dos arquitecturas principalmente; la heterounión de bicapa y la heterounión de bulto (BHJ).

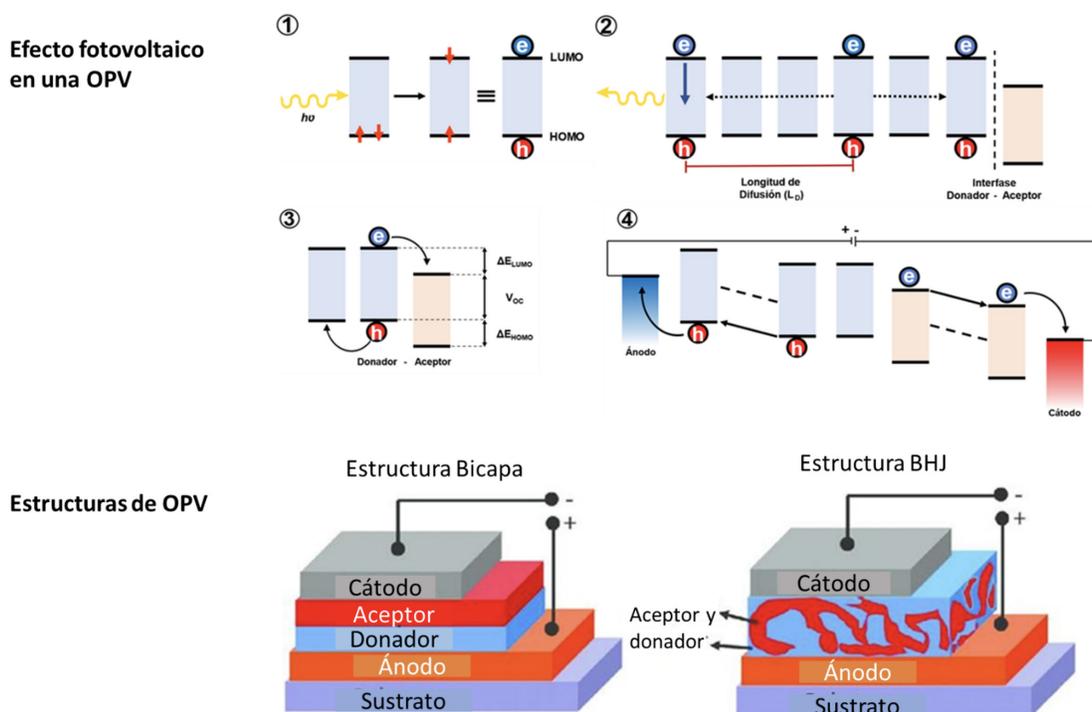
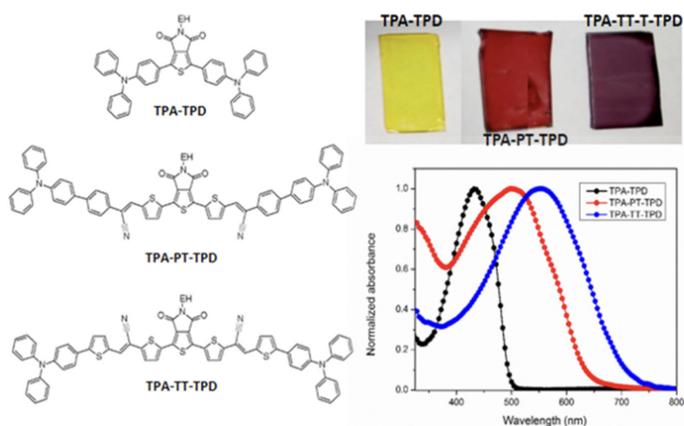


FIGURA 5.
Funcionamiento de una OPV.

La eficiencia de fotoconversión *PCE* (Photoconversion Efficiency) es el parámetro más importante para considerar en una celda solar orgánica y se define como la relación entre la potencia máxima que se obtiene de la celda y la luz incidente. Este parámetro se obtiene por la medición del voltaje de circuito abierto (*Voc*), corriente de corto-circuito (*Jsc*) y el factor de llenado (*FF*) empleando la formula $PCE = Voc \times Jsc \times (FF/Pin)$ (Lu et al., 2015).

El *Voc* se relaciona con la diferencia de energía del orbital HOMO del donador y el LUMO del aceptor (por lo general un derivado del fullereno, $PC_{61}BM$) que conforman la

capa activa del dispositivo. Un valor grande de E_g , da como resultado valores altos de V_{oc} . Sin embargo, existe una restricción importante, debe existir una diferencia de ~ 0.3 eV entre el LUMO del donador y el LUMO del aceptor que permita garantizar la disociación del excitón, si esta condición no se cumple no habrá generación de carga. La corriente de cortocircuito (J_{sc}) está relacionada con el número de excitones durante la iluminación solar, es decir con el número de moléculas que se excitan por fotón absorbido, así como el número de fotones que inciden en el material. Por lo tanto, la molécula debe tener un coeficiente de absorción molar alto, además el 70% de la radiación solar que incide en la tierra, se encuentra en el rango de longitud de onda de 380-900 nm, la banda de absorción de la molécula semiconductora debe absorber de preferencia toda la región del espectro solar o principalmente en la región infrarroja. Para poder absorber en esta región, el *band gap* de la molécula debe estar entre 3.2 y 1.38 eV. Para disminuir el valor del band-gap en las moléculas semiconductoras, se puede aumentar el tamaño del sistema π -conjugado, se debe además propiciar un sistema electrónico donador-receptor (efecto push-pull) que lleva a la formación un complejo de transferencia de carga interna, el cual disminuye el valor del *band-gap* a través de la introducción de grupos electro-donadores y electro-aceptores, los cuales además aumentan el coeficiente de absorción molar de las moléculas (Figura 6) (Garcias-Morales et al., 2017).



SM	λ_{max} (nm) ^a	λ_{max} (nm) ^b	ϵ ($M^{-1} cm^{-1}$)	E_g^{opt} (eV)
TPA-TPD	433	434	52,382	2.48
TPA-PT-TPD	495	500	51,200	1.90
TPA-TT-TPD	527	551	52,892	1.74

FIGURA 6. Relación entre la estructura química y el *band-gap* (Garcias-Morales et al., 2017).

El FF , está relacionado con la resistencia en serie (R_s) y la resistencia en paralelo (R_p). Un valor bajo de $R_s = 1.0 \Omega \cdot cm^2$ y un valor alto de $R_p = 1.1 \times 10^5 \Omega \cdot cm^2$, favorecen la extracción de carga y pequeñas fugas de corriente. Estas resistencias son trampas donde se pueden llevar a cabo la recombinación de cargas y por lo tanto la pérdida de densidad de corriente. (R_s) y (R_p) están directamente relacionadas con la morfología de las películas que forma el semiconductor, que a su vez depende de la procesabilidad en solución (debe ser totalmente soluble en disolventes orgánicos y formar películas con baja rugosidad) y la estabilidad de la molécula (baja degradación, estabilidad térmica y no formar agregados cristalinos). En la actualidad se han reportado la fabricación de OPVs con PCE de $\sim 18\%$, a través de la fabricación de celdas

tipo tándem, que consisten en la unión de dos celdas que absorben luz en diferentes partes del espectro maximizando el campo eléctrico (Meng et al., 2018).

Transistores Orgánicos de Efecto de Campo (OFETs)

Un transistor orgánico de efecto de campo OFET (*Organic field-effect transistor*) es un dispositivo electrónico que amplifica y conmuta señales eléctricas. Los OFETs consisten en tres terminales conformadas por una capa de un material semiconductor orgánico, una capa dieléctrica, un electrodo de compuerta y un electrodo de origen. Su funcionamiento depende de la tensión aplicada (V_g) que induce un campo eléctrico en la interfase de las capas semiconductoras y dieléctricas, donde gracias a una diferencia de voltaje (V_{SD}), se puede medir la intensidad de corriente que ocurre (I_{SD}).

El interés en los OFETs se debe al hecho de que estos dispositivos son más fáciles de fabricar que los transistores tradicionales basados en silicio. La incorporación de grupos funcionales y cadenas alquílicas en la estructura química de los semiconductores mejora la solubilidad en disolventes orgánicos, facilitando la formación de películas delgadas mediante el uso de técnicas de impresión en solución, esta metodología disminuye el costo de fabricación en comparación con las técnicas convencionales de deposición por evaporación. Actualmente, el rendimiento de los OFET supera al de los FETs de silicio amorfo (a-Si) con movilidades de efecto transporte de carga de 0.1 -1 cm^2 / Vs y una relación de encendido/apagado de 106-108.

Las propiedades electrónicas de los semiconductores orgánicos dependen en gran medida del empaquetamiento cristalino y la morfología de la película delgada, por lo que el diseño molecular es crucial (Figura 7) (Mei et al., 2013).

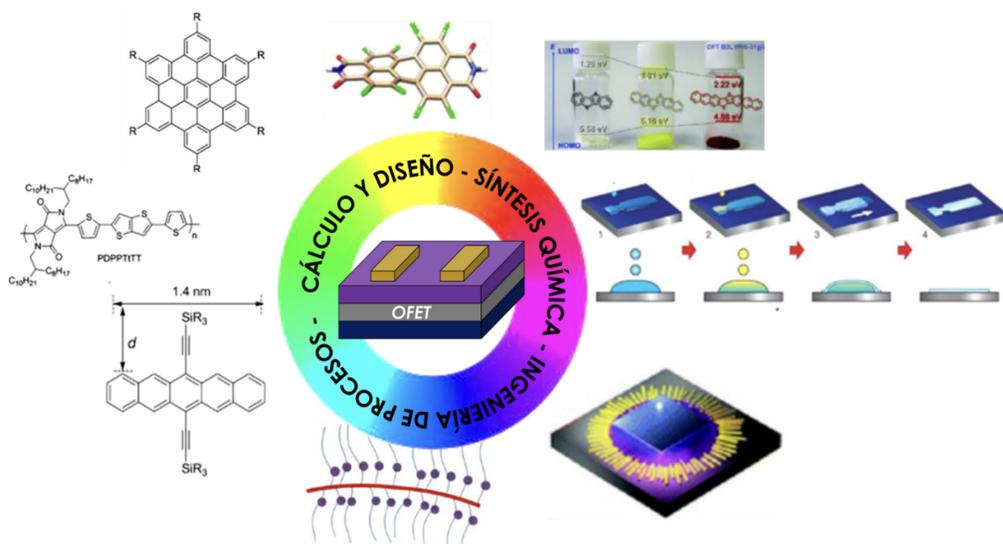


FIGURA 7. Diseño de moléculas semiconductoras para la fabricación de OFET (Mei et al., 2013).

La velocidad de transporte de carga (conocida como movilidad de carga $\mu_n \text{cm}^2/\text{Vs}$, en los semiconductores orgánicos se rige por la transferencia integral (el grado de superposición de orbitales moleculares con moléculas adyacentes), que depende de la distancia $\pi \dots \pi$, la orientación de las moléculas y la energía de reorganización. Tanto la transferencia de energía

integral como la de reorganización están estrechamente relacionadas con la estructura molecular, así como con el empaquetamiento cristalino en el estado sólido. En términos generales, una combinación de una mayor transferencia integral y pequeña energía de reorganización conduce a una mayor movilidad de carga. Sin embargo, otros factores como defectos (desórdenes), impurezas, densidades de portadores de carga, campos eléctricos, temperatura y presión pueden tener efectos sobre μ_h (Zhang et al., 2018).

El diseño de moléculas para uso en OFETs sigue los mismos principios del diseño de semiconductores que hemos discutido anteriormente. Sin embargo, se debe resaltar algunos puntos importantes. La Figura 8 ilustra un sistema π -conjugado de una molécula semiconductor, donde se pueden identificar 4 componentes principales: el sistema π -conjugado el cual determina las propiedades ópticas y electrónicas e influye en el empaquetamiento molecular, heteroátomos (X=N, O, S, etc.) que ayudan al empaquetamiento molecular mediante la modificación de dipolos e interacciones por puente de hidrógeno, sustituyentes (electro-donadores o electro-atradores que permitan la polarización de la densidad electrónica) y cadenas laterales que generalmente se incorporan para impartir solubilidad, aunque también pueden afectar las propiedades electrónicas en el estado sólido al cambiar la estructura de empaquetamiento molecular o alterar la conformación de torsión de la cadena conjugada (Mei et al., 2013)(Bronstein et al., 2020).

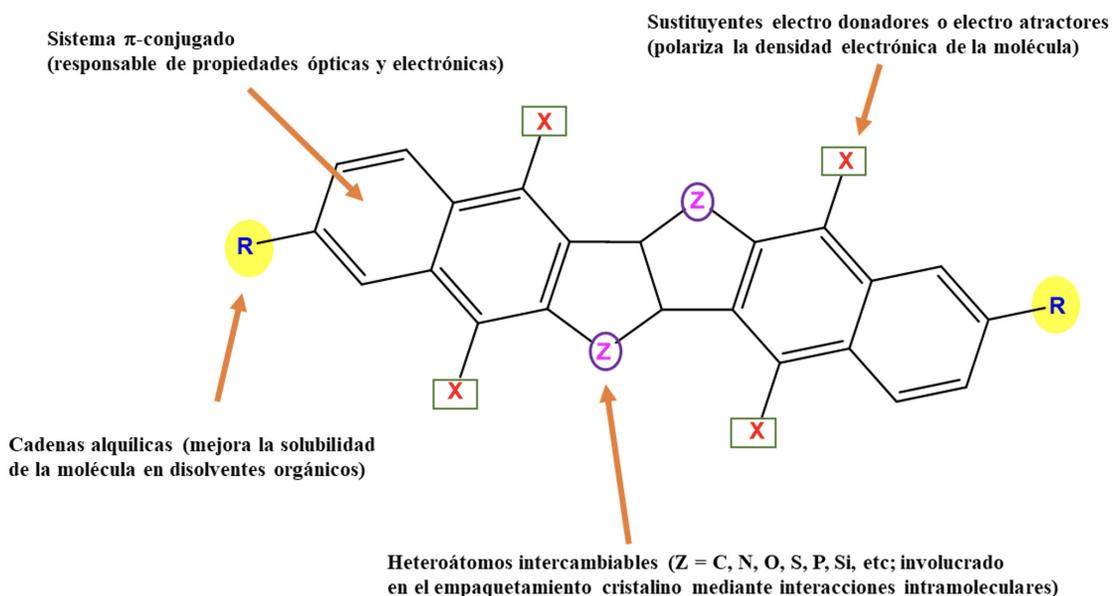


FIGURA 8. Estructura de una molécula orgánica con un sistema π conjugado.

Diodos Orgánicos Emisores de Luz (OLEDs)

Los diodos orgánicos emisores de luz OLEDs (*Organic Light Emitting Diode*) utilizan compuestos orgánicos semiconductores electroluminiscentes como moléculas de bajo peso molecular o polímeros, los cuales pueden emitir luz en diferentes longitudes de onda en el espectro visible cuando son excitados por una fuente eléctrica. La longitud de onda de la emisión está directamente relacionada a la estructura de la molécula y está a su vez se puede modificar mediante el diseño molecular.

En la estructura del OLED, el sólido semiconductor es conocido como capa emisora (*emitting layer*, EML); este se encuentra intercalado entre dos electrodos que aplican un campo eléctrico (ánodo y cátodo). En estos dispositivos los electrones son inyectados a través del cátodo, mientras que a través del ánodo se inyectan huecos (Figura 9), estos migran hasta encontrarse y formar el par llamado excitón, el cual es emitido en forma de luz (Thejo Kalyani & Dhoble, 2012).

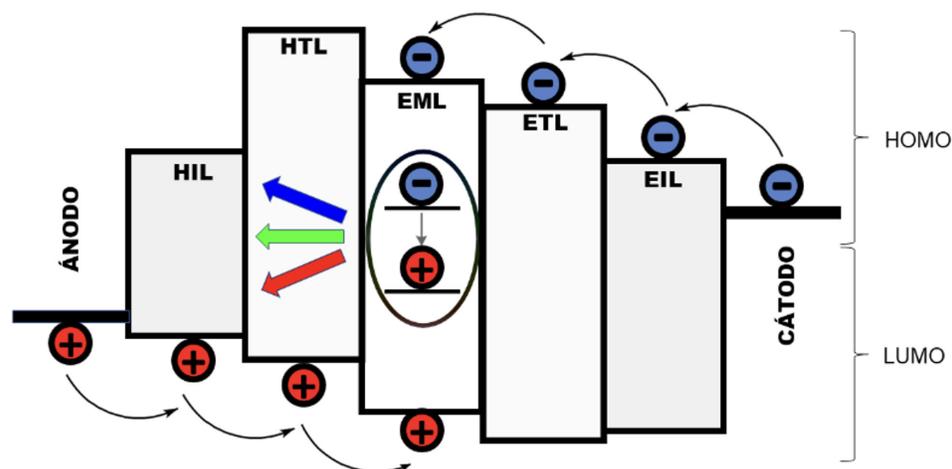


FIGURA 9. Migración de los electrones a través del ánodo y cátodo.

Debido a flexibilidad de los semiconductores orgánicos, los OLEDs han sido empleados como fuente de iluminación directa en lámparas. Además, debido a sus propiedades como; alta resolución, tiempo de respuesta rápido, amplio rango de temperaturas de operación, se han comercializado en los últimos años en dispositivos electrónicos como pantallas planas, tablets, computadoras, smartwatch, smartphones, desplazando a los dispositivos basados en compuestos inorgánicos. También, se ha estudiado su uso en el mercado como etiquetas o láminas inteligentes que emitan luz a través en un sustrato flexible (FOLED) o transparente (TOLED).

Evolución en el diseño de materiales para la fabricación de OLEDs

El principal parámetro que se debe considerar en los OLEDs es la eficiencia interna de conversión de electrones a fotones, llamada eficiencia cuántica interna (IQE), en el mejor de los casos esta puede llegar a ser 100% (Figura 10).

Los primeros OLED se basaron en semiconductores que emiten luz por el fenómeno de fluorescencia, y son llamados OLEDs de primera generación. La IQE máxima de estos materiales puede llegar a ser 25% debido a que estadísticamente existe una relación 3:1 en la formación de excitones triplete y singulete, respectivamente; y únicamente pueden ser cosechados los excitones singulete para producir luz por fluorescencia. La segunda generación de OLEDs, también denominados PHOLEDs, se trata de complejos organometálicos fosforescentes, los cuales poseen un tiempo de vida de emisión más prolongado que los OLEDs fluorescentes, pueden llegar a ser de microsegundos, y en ocasiones milisegundos (Z. Yang et al., 2017). Los PHOLEDs cosechan eficientemente excitones singulete y triplete debido a un sistema eficiente de entrecruzamiento interno

(ISC) por lo que se logran IQE cercanas a 100 %. Sin embargo, se emplean metales como Ir, Pt, etc., por lo que presentan dos desventajas: primero su alto costo de fabricación y segundo estamos frente a una tecnología muy demandante, y los metales son escasos.

La tercera generación de OLEDs se basan en el fenómeno de retardo de la fluorescencia por activación térmica (TADF). Los OLEDs fabricados con semiconductores orgánicos que presentan este fenómeno por lo general, presentan alta IQE, alcanzando incluso a los PHOLEDs, esto se debe a que por este fenómeno se puede cosechar también excitones triplete debido a conversión ascendente de los excitones triplete a singulete a través del cruce inverso entre sistemas (RISC) que es accesible por la energía térmica a temperatura ambiente, seguido de un decaimiento a través de la fluorescencia (Sasaki et al., 2016).

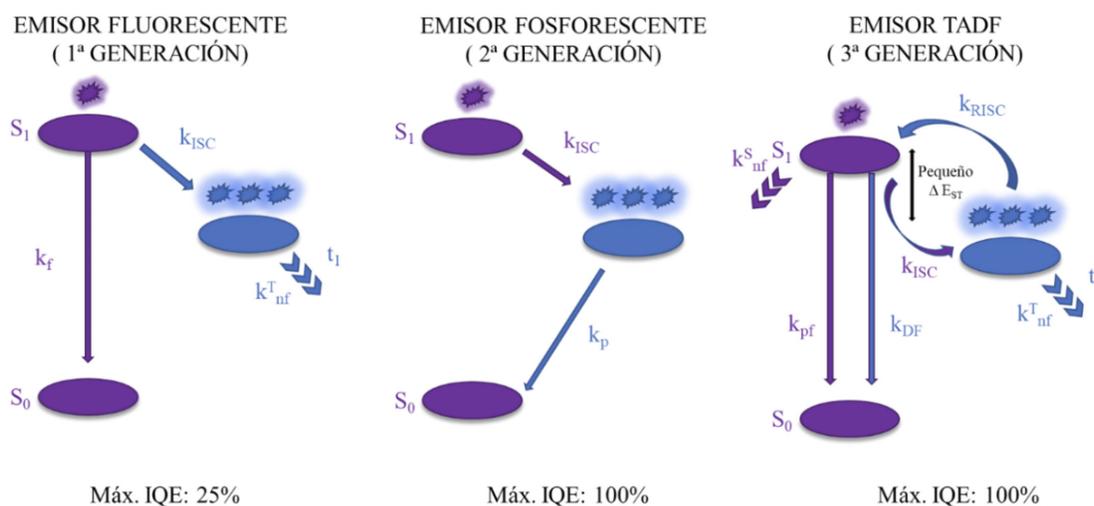


FIGURA 10. IQE de las generaciones de OLEDs.

Diseño de moléculas para favorecer el fenómeno TADF

El diseño de materiales orgánicos para la fabricación de OLEDs se basa en las estrategias de la síntesis de semiconductores mencionados anteriormente. Sin embargo, para que las moléculas presenten el fenómeno de TADF (Hoover et al., 2021), estas deben poseer en su diseño ciertas características para obtener un IQE alto. Principalmente depende de un ΔE_{ST} pequeño, el cual representa el *gap* de energía entre E_s y E_T , el cual puede definirse por una serie de fórmulas:

$$E_s = E + K + J$$

$$E_T = E + K - J$$

$$\Delta E_{ST} = E_s - E_T = 2J$$

Donde E es la energía orbital, K es la energía de repulsión de electrones y J es la energía de intercambio que es relativo a la superposición de la función de onda espacial de los niveles de HOMO y LUMO en moléculas orgánicas. Un valor pequeño de ΔE_{ST} se puede lograr forzando a los orbitales HOMO y LUMO a rescindir en diferentes partes de la molécula lo cual se logra priorizando la separación espacial de las densidades de electrones de los orbitales frontera utilizando una estructura donador-aceptor (Figura 11), con una pequeña torsión en su geometría para obtener una mayor estabilidad. La rigidez de la estructura molecular debe ser asegurada para mejorar la eficiencia de la luminiscencia radiativa.

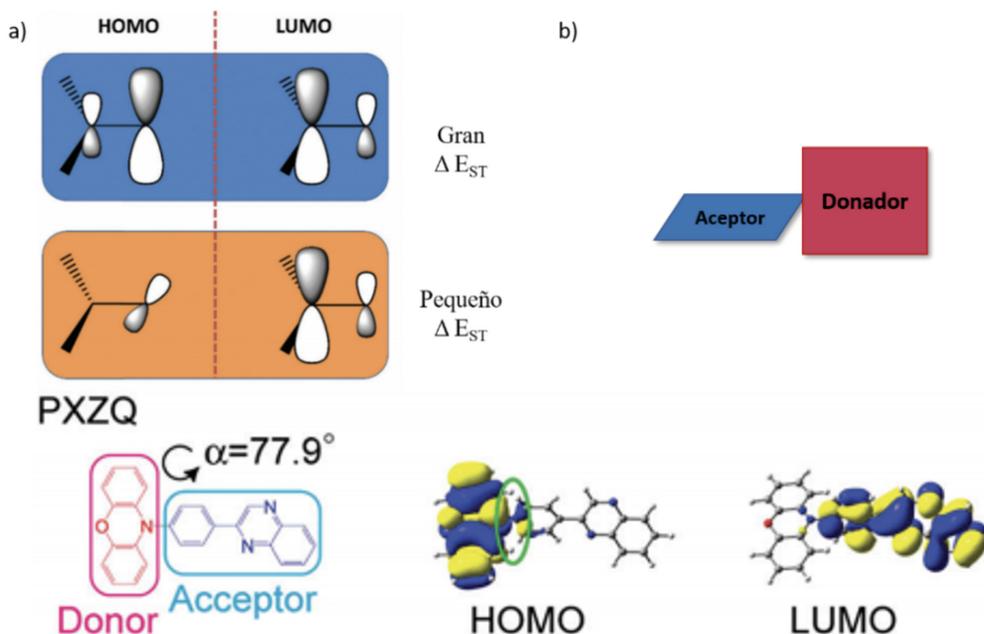


FIGURA 11. Estructura molecular de una molécula y su relación con el ΔE_{ST} .

En la literatura se han reportado una variedad grande de fragmentos donadores y aceptores que se han empleado en la síntesis de moléculas que presentan el fenómeno TADF y con los cuales se han podido fabricar OLEDs con EQE mayores a 20% (Figura 12) (Lozano-Hernández et al., 2018). La alta eficiencia obtenida en los OLEDs que fueron fabricados empleando semiconductores orgánicos garantizan la viabilidad y uso en la fabricación de dispositivos electrónicos flexibles con aplicaciones electrónicas.

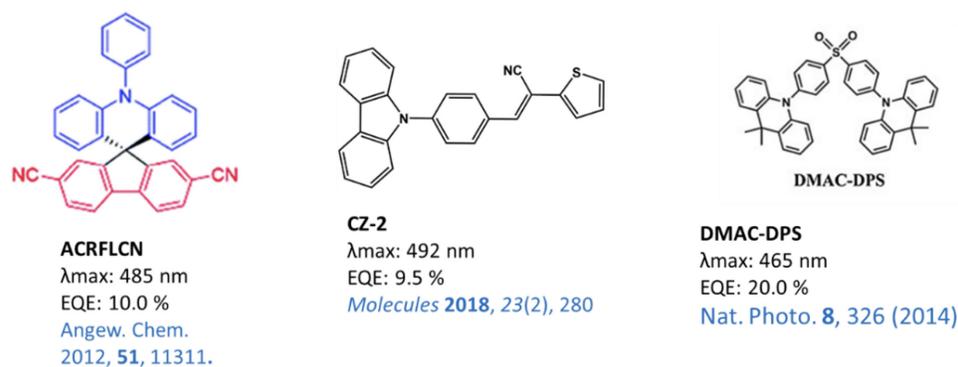


FIGURA 12. Algunas moléculas que tienen el efecto TADF empleadas en la fabricación de OLEDs.

Conclusión

Las moléculas orgánicas semiconductoras han llamado la atención debido a que su campo de aplicación es muy variado, desde la fabricación de dispositivos electrónicos para generar electricidad (OPVs) como para la iluminación (OLEDs), también por su uso en el campo biomédico (OFETs). A través del diseño molecular, se pueden proponer moléculas con gran variedad de cambios estructurales que permitan modelar las propiedades fisicoquímicas y ópticas, por lo que muchos investigadores se han dedicado a estudiar la relación de la estructura con las propiedades de las moléculas y entender los fenómenos físicos de cada

dispositivo que se desea fabricar (OPVs, OLEDs y OFETs), y de esta forma se han sintetizado moléculas inteligentes. No obstante, queda camino que recorrer para obtener mejores dispositivos con el diseño y síntesis de mejores semiconductores orgánicos, esto representa un área de crecimiento científico para las futuras generaciones de jóvenes científicos.

Agradecimientos

Susana Lucia Flores Estrada agradece el apoyo financiero que se ha brindado con la Beca CONACyT número 787927 para la formación de maestría en el programa de Maestría en Ciencia y Tecnología Química de la Universidad Autónoma de Coahuila.

Referencias

- Akhtar, M., Chiang, C. K., Heeger, A. J., & MacDiarmid, A. G. (1977). Novel route to metallic polythiazyl bromides: Direct bromination of S₄N₄. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, 23, 846. <https://doi.org/10.1039/C39770000846>
- Alfaro Guerra, M. A., Alfaro Alcaino, I. A., & Guerra Rojas, R. A. (2019). Solución y análisis del modelo de Södergren para celdas solares tipo Grätzel usando la función Solver de Excel. *Educación Química*, 30(4), 16. <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2019.4.67971>
- Banerji, A., Tausch, M. W., & Scherf, U. (2013). Classroom Experiments and Teaching Materials on OLEDs with Semiconducting Polymers. *Educación Química*, 24(1), 17–22. [https://doi.org/10.1016/S0187-893X\(13\)73190-2](https://doi.org/10.1016/S0187-893X(13)73190-2)
- Baughman, R. H., Apgar, P. A., Chance, R. R., MacDiarmid, A. G., & Garito, A. F. (1977). Shear transformation to produce a new phase of polymeric sulfur nitride (SN) x. *The Journal of Chemical Physics*, 66(2), 401–409. <https://doi.org/10.1063/1.433933>
- Bronstein, H., Nielsen, C. B., Schroeder, B. C., & McCulloch, I. (2020). The role of chemical design in the performance of organic semiconductors. *Nature Reviews Chemistry*. <https://doi.org/10.1038/s41570-019-0152-9>
- Brütting, W. (2006). Introduction to the Physics of Organic Semiconductors. In *Physics of Organic Semiconductors* (pp. 1–14). <https://doi.org/10.1002/3527606637.ch>
- Garcias-Morales, C., Romero-Borja, D., Maldonado, J.-L., Roa, E. A., Rodríguez, M., García-Merinos, P. J., & Ariza-Castolo, A. (2017). Small Molecules Derived from Thieno[3,4-c]pyrrole-4,6-dione (TPD) and Their Use in Solution Processed Organic Solar Cells. In *Molecules* (Vol. 22, Issue 10). <https://doi.org/10.3390/molecules22101607>
- Greene, R. L., Street, G. B., & Suter, L. J. (1975). Superconductivity in polysulfur nitride (SN)_x. *Physical Review Letters*, 34(10), 577–579. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.34.577>
- Guttman, L., Lander, J. J., Laramore, G. E., Duke, C. B., Holland, B. W., Atomic, L., Feder, R., Mooney, M., Nowick, A. S., Jones, R. W., Jepsen, D. W., Marcus, P. M., Jona, F., Fosdick, L. D., Walatka, V. V., & Company, E. K. (1973). *PHYSICAL REVIEW Polysulfur Nitride — a One-Dimensional Chain with a Metallic Ground State*. 31(18), 1139–1142.

- Henson, Z. B., Müllen, K., & Bazan, G. C. (2012). Design strategies for organic semiconductors beyond the molecular formula. *Nature Chemistry*, 4(9), 699–704. <https://doi.org/10.1038/nchem.1422>
- Hoover, G. C., Dicks, A. P., & Seferos, D. S. (2021). Upper-Year Materials Chemistry Computational Modeling Module for Organic Display Technologies. *Journal of Chemical Education*, 98(3), 805–811. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c01325>
- Ito, T., Shirakawa, H., & Ikeda, S. (1974). Simultaneous Polymerization and Formation of Polyacetylene. *Journal of Polymer Science: Polymer Chemistry Edition*, 12(1974), 11–19.
- Jerez, J. E. N., Alfaro, M., Alfaro, I., & Guerra, R. (2020). Determining the efficiency of a mini photovoltaic solar panel: A laboratory experience in renewable energy. *Educacion Quimica*, 31(2), 22–37. <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2020.2.70300>
- Kang, H., Kim, G., Kim, J., Kwon, S., Kim, H., & Lee, K. (2016). Bulk-Heterojunction Organic Solar Cells: Five Core Technologies for Their Commercialization. *Advanced Materials*, 28(36), 7821–7861. <https://doi.org/10.1002/adma.201601197>
- Lozano-Hernández, L.-A., Maldonado, J.-L., Garcias-Morales, C., Espinosa Roa, A., Barbosa-García, O., Rodríguez, M., & Pérez-Gutiérrez, E. (2018). Efficient OLEDs fabricated by solution process based on carbazole and thienopyrrolediones derivatives. *Molecules*, 23(2). <https://doi.org/10.3390/molecules23020280>
- Lu, L., Zheng, T., Wu, Q., Schneider, A. M., Zhao, D., & Yu, L. (2015). Recent Advances in Bulk Heterojunction Polymer Solar Cells. *Chemical Reviews*, 115(23), 12666–12731. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00098>
- Mei, J., Diao, Y., Appleton, A. L., Fang, L., & Bao, Z. (2013). Integrated Materials Design of Organic Semiconductors for Field-Effect Transistors. *Journal of the American Chemical Society*, 135(18), 6724–6746. <https://doi.org/10.1021/ja400881n>
- Meng, L., Zhang, Y., Wan, X., Li, C., Zhang, X., Wang, Y., Ke, X., Xiao, Z., Ding, L., Xia, R., Yip, H.-L., Cao, Y., & Chen, Y. (2018). Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency. *Science*, 361(6407), 1094 LP – 1098. <https://doi.org/10.1126/science.aat2612>
- Mikulski, C. M., Russo, P. J., Saran, M. S., MacDiarmid, A. G., Garito, A. F., & Heeger, A. J. (1975). Synthesis and Structure of Metallic Polymeric Sulfur Nitride, (SN)_x, and Its Precursor, Disulfur Dinitride, S₂N₂. *Journal of the American Chemical Society*, 97(22), 6358–6363. <https://doi.org/10.1021/ja00855a012>
- Nicolaidis, N. C., Hollott, P. V., Stanwell, B., Gill, I. A., Bull, J. E., Bentsen, S., Iredale, J., Pappenfus, T. M., Dastoor, P. C., Feron, K., Griffith, M. J., & Holmes, N. P. (2020). Developing a Portable Organic Solar Cell Kit Suitable for Students to Fabricate and Test Solar Cells in the Laboratory. *Journal of Chemical Education*, 97(10), 3751–3757. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00941>
- Pappenfus, T. M., Schliep, K. B., Dissanayake, A., Ludden, T., Nieto-Ortega, B., López Navarrete, J. T., Ruiz Delgado, M. C., & Casado, J. (2012). Organic Materials in the Undergraduate Laboratory: Microscale Synthesis and Investigation of a Donor–Acceptor Molecule. *Journal of Chemical Education*, 89(11), 1461–1465. <https://doi.org/10.1021/ed200248m>

- Po, R., Bianchi, G., Carbonera, C., & Pellegrino, A. (2015). "All That Glitters Is Not Gold": An Analysis of the Synthetic Complexity of Efficient Polymer Donors for Polymer Solar Cells. *Macromolecules*, 48(3), 453–461. <https://doi.org/10.1021/ma501894w>
- Roncali, J. (1997). Synthetic Principles for Bandgap Control in Linear π -Conjugated Systems. *Chemical Reviews*, 97(1), 173–206. <https://doi.org/10.1021/cr950257t>
- Rothberg, L. J., & Lovinger, A. J. (1996). Status of and prospects for organic electroluminescence. *Journal of Materials Research*, 11(12), 3174–3187. <https://doi.org/10.1557/JMR.1996.0403>
- Sasaki, S., Drummen, G. P. C., & Konishi, G. (2016). Recent advances in twisted intramolecular charge transfer (TICT) fluorescence and related phenomena in materials chemistry. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(14), 2731–2743. <https://doi.org/10.1039/C5TC03933A>
- Shirakawa, H., Ito, T., & Ikeda, S. (1973). Raman scattering and electronic spectra of poly(acetylene). *Polymer Journal*, 4(4), 460–462. <https://doi.org/10.1295/polymj.4.460>
- Shirakawa, H., Louis, E. J., MacDiarmid, A. G., Chiang, C. K., & Heeger, A. J. (1977). Synthesis of electrically conducting organic polymers: Halogen derivatives of polyacetylene, (CH)_x. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, 16, 578–580. <https://doi.org/10.1039/C39770000578>
- Son, H. J., He, F., Carsten, B., & Yu, L. (2011). Are we there yet? Design of better conjugated polymers for polymer solar cells. *Journal of Materials Chemistry*, 21(47), 18934–18945. <https://doi.org/10.1039/C1JM12388B>
- The Nobel Prize in Chemistry 2000 - Advanced information.* (n.d.).
- Thejo Kalyani, N., & Dhoble, S. J. (2012). Organic light emitting diodes: Energy saving lighting technology—A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 16(5), 2696–2723. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.02.021>
- Utesch, N. F., & Diederich, F. (2003). Acetylenic scaffolding on solid support: poly(triacetylene)-derived oligomers by Sonogashira and Cadiot–Chodkiewicz-type cross-coupling reactions. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 1(2), 237–239. <https://doi.org/10.1039/B210184J>
- Yang, J., Zhao, Z., Wang, S., Guo, Y., & Liu, Y. (2018). Insight into High-Performance Conjugated Polymers for Organic Field-Effect Transistors. In *Chem* (Vol. 4, Issue 12, pp. 2748–2785). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2018.08.005>
- Yang, Z., Mao, Z., Xie, Z., Zhang, Y., Liu, S., Zhao, J., Xu, J., Chi, Z., & Aldred, M. P. (2017). Recent advances in organic thermally activated delayed fluorescence materials. *Chemical Society Reviews*, 46(3), 915–1016. <https://doi.org/10.1039/c6cs00368k>
- Zhang, X., Dong, H., & Hu, W. (2018). Organic Semiconductor Single Crystals for Electronics and Photonics. *Advanced Materials*, 30(44), 1801048. <https://doi.org/10.1002/adma.201801048>