



María Elena Sánchez Vergara
Anáhuac México Norte
elena.sanchez@anahuac.mx

Roberto Salcedo
Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México
salcevitc@gmail.com



Vincent Sebastián Medel Mota
Anáhuac México Norte
vincent.medelmo@anahuac.mx

Citlalli Ríos
Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México

INTRODUCCIÓN

La búsqueda de nuevos semiconductores orgánicos para aplicaciones optoelectrónicas se ha convertido en un objetivo atractivo para el campo microelectrónico. Dentro de la familia de materiales orgánicos están los compuestos organometálicos, que contienen al menos un enlace metal-carbono en el cual el carbono es parte de un grupo orgánico; esta clase incluye compuestos tales como el ferroceno.

METODOLOGÍA

Se sintetizaron dos semiconductores organometálicos mediante la reacción simple en metanol absoluto, entre $C_{12}H_{14}Fe$, $C_{14}H_8O_4$ y $C_{14}H_{10}N_2O_2$. Se mantuvo el reflujo a 15 bar durante 30 minutos y los semiconductores S1 y S2 (figura 1) se filtraron, purificaron en metanol-agua 1:1 y se secaron al vacío. Posteriormente se depositaron mediante evaporación a alto vacío. El material en polvo se calentó a 573 K para producir inicialmente su cambio de fase a estado gaseoso y finalmente depositarse en forma de película delgada al contacto con los sustratos.

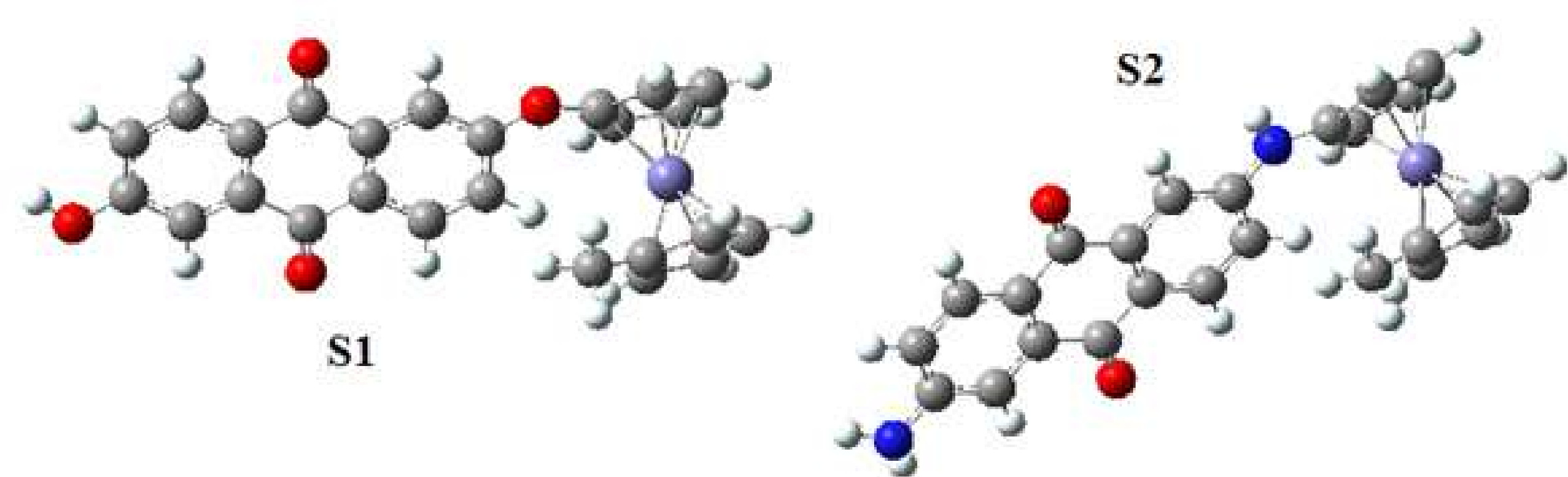


Figura 1. Estructuras moleculares optimizadas de los compuestos organometálicos



RESULTADOS

S1 y S2 actúan como semiconductores de tipo-p o transportadores de huecos. En el dispositivo fabricado a partir de S1 se observó que no hay una simetría perfecta al intercambiar la polaridad en el dispositivo. La corriente medida es mucho mayor cuando se aplica un voltaje de polaridad, y la corriente es casi cero cuando se aplica la polaridad inversa, lo que indica que el dispositivo podría usarse como un diodo Schottky. Con el dispositivo fabricado a partir de S2, el efecto del derivado de antraquinona en el esqueleto de Fc cambia drásticamente el comportamiento eléctrico hacia el de una resistencia. Aunque la presencia de CuPc como HIL influye en el proceso de inyección de cargas en los dispositivos, la similitud de las energías en los HOMO de los materiales moleculares sintetizados, parece mostrar cierta relación entre las propiedades de carga y la estructura molecular de los semiconductores orgánicos sintetizados. Adicionalmente, las transiciones electrónicas entre los orbitales HOMO y LUMO son importantes en el comportamiento de los semiconductores, debido a que cuantifican las propiedades de estos materiales (figura 2).

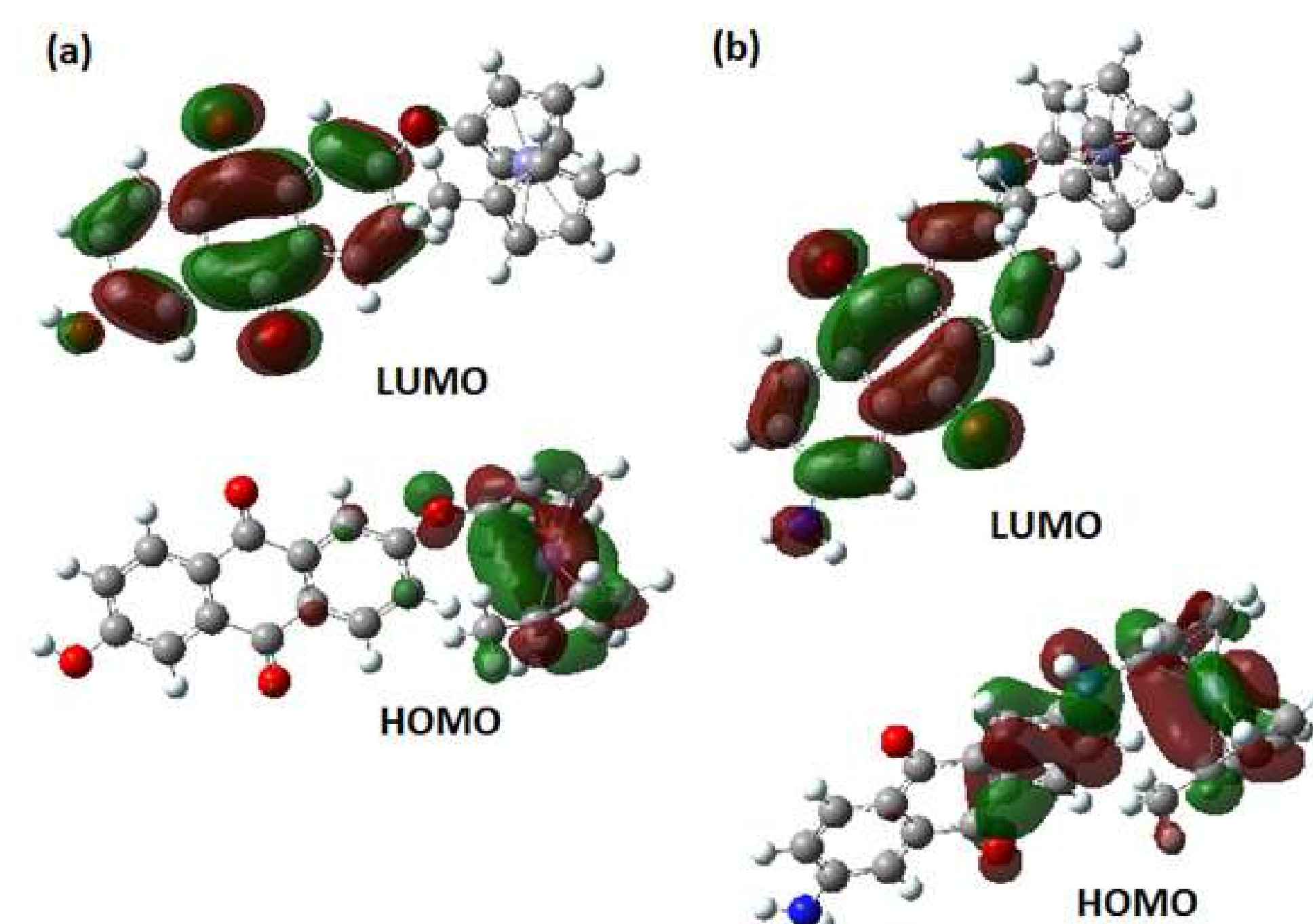


Figura 2. Orbitales moleculares de la frontera para ambos sistemas: (a) molécula con puente de oxígeno S1 y (b) molécula con puente de nitrógeno S2

DISCUSIÓN

Se sintetizaron dos semiconductores organometálicos a partir de la reacción entre el Fc y los derivados de la antraquinona: 2,6-dihidroxi-antraquinona (S1) y 2,6-diaminoantraquinona (S2). En el caso de S1, la molécula de hidroxiantraquinona, está directamente vinculada al Fc por medio de un átomo de H de su grupo OH, al desplazar un grupo metilo del anillo organometálico del compuesto, y en el material S2 se observa una situación similar. En este caso la síntesis es a través de uno de los grupos amino de aminoantraquinona. El intervalo de banda teórico de cada película también se comparó con el obtenido por espectroscopia UV-vis, obteniendo resultados similares en el rango de 2 a 2,9 eV. Estos valores colocan los materiales sintetizados dentro del rango de semiconductores orgánicos. A partir de los cálculos de HOMO-LUMO, se ha sugerido que los materiales sintetizados podrían utilizarse como un p-tipo semiconductor.

REFERENCIAS

1. Alfazuddin T, Biswanath M. Observation of persistent photoconductivity at room temperature in ferrocene-doped poly(methyl methacrylate) thin films containing chloroform molecules. *Solid State Communications*, 2002;121(2-3):159-164.
2. Becke AD. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior, *Physical Review A*, 1998;38:3098-3100.
3. Perdew JP, Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy, *Phys. Rev. B*, 1992;45:13244-13249.