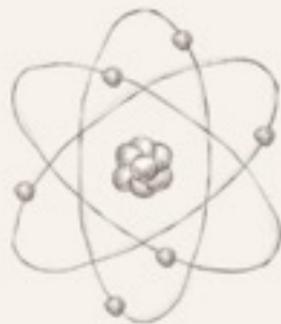


**POSGRADO EN DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES
INSTITUTO DE CIENCIAS**



Presentación #2

**SUBTEMA 1.3
QUÍMICA Y DIAGRAMAS
DE ENERGÍA**



**Presentado por:
Rulier Romero Tellez**

**Profesor:
Dr. Jesús Capistrán**





Introducción

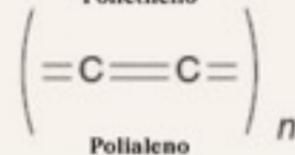
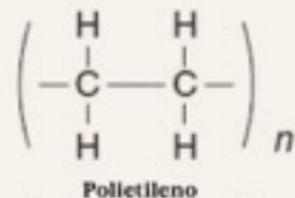
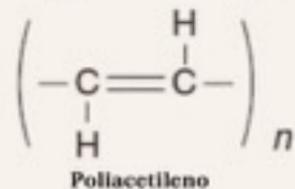
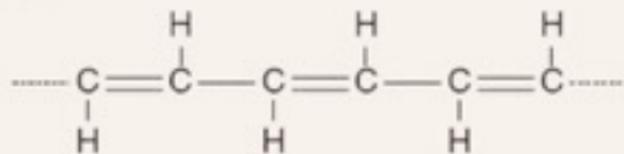
La química de los materiales orgánicos se fundamenta en la presencia de átomos de carbono que forman cadenas conjugadas, es decir, secuencias de enlaces simples y dobles alternados. Esta conjugación permite la deslocalización de electrones, lo que da lugar a la formación de orbitales moleculares.



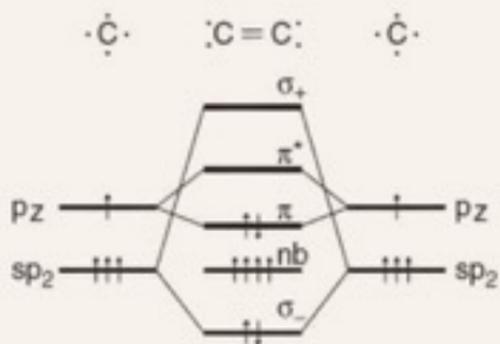
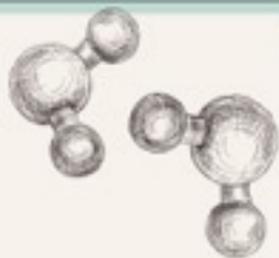
Materiales orgánicos

Principio de conjugación en materiales orgánicos

La conjugación consiste en una cadena de átomos de carbono con enlaces simples y dobles alternados, donde cualquiera de los átomos de hidrógeno puede ser reemplazado por un grupo funcional.

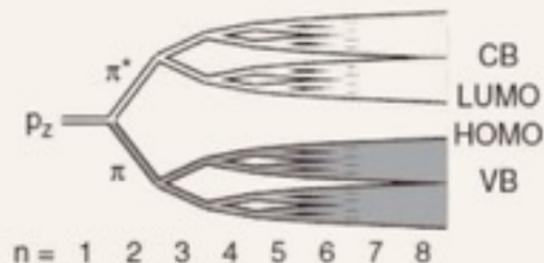


Formación de niveles energéticos



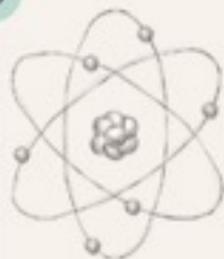
01

Diagrama de energía de dos átomos de carbono en interacción. Los orbitales atómicos sp_2 y p_z de los dos átomos de carbono individuales se combinan para formar orbitales moleculares π , σ y no enlazantes.



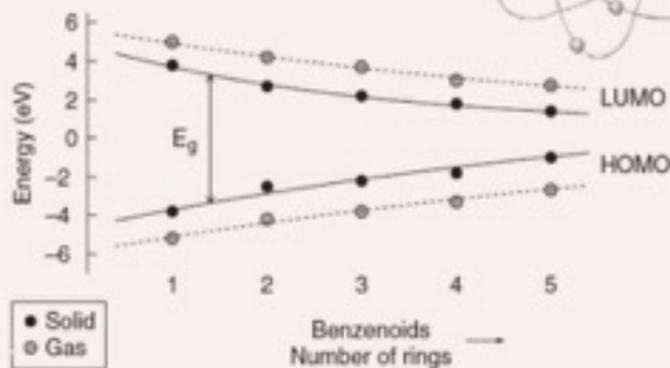
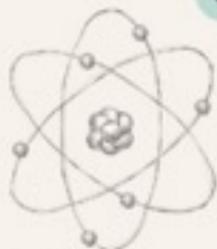
02

Formación de una estructura de banda con una brecha de banda que se estrecha al aumentar la longitud de conjugación de los enlaces simples y dobles alternados. Existen un HOMO y un LUMO que forman parte de la banda de valencia (VB) y la banda de conducción (CB), respectivamente.



Bandas de energía

Al aumentar la longitud de conjugación, del benceno al pentaceno, la banda prohibida se estrecha. Este efecto se debe a una mayor dislocación de las cargas y se amplifica aún más cuando las moléculas están próximas entre sí en los sólidos.



Banda prohibida (E_g) en función del tamaño molecular en Bencenoides



Importante conocer que:

Para muchas moléculas, la ubicación de los enlaces dobles y sencillos no está determinada de forma única, sino que presenta dos configuraciones distintas con exactamente la misma energía. En estos casos, la resonancia de las dos formas provoca una dislocación de los electrones; y ya no sería posible identificar la ubicación de los enlaces sencillos y dobles.



Resonancia entre las dos configuraciones de igual energía



Conclusiones



01

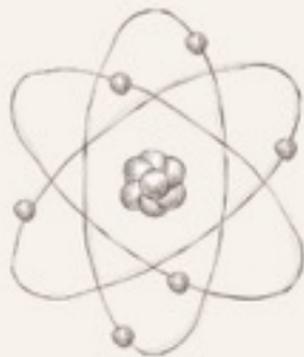
La estructura química de los materiales orgánicos influye en sus propiedades electrónicas.

02

La disposición de los átomos de carbono y la conjugación de enlaces determinan la formación de los niveles de energía molecular, el HOMO y el LUMO.

03

La diferencia de energía entre estos niveles define el "band gap", esencial para las características semiconductoras del material.



¡Gracias!

