

DOI: <https://doi.org/10.47300/actasidi-unicyt-2025-122>

ANÁLISIS TEÓRICO DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ESPECTROS DE EMISIÓN DE COMPUESTOS DONADOR-ACEPTOR CON TRIFENILAMINA Y TRIFENILFOSFINA COMO EML PARA OLEDs MEDIANTE DFT Y TD-DFT

Peñuelas-Gómez, Carlos Alberto

Universidad Autónoma de Sinaloa
Los Mochis Sinaloa, México
carlos.apg@uas.edu.mx

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1387-3631>

Báez-Castro, Alberto

Universidad Autónoma de Sinaloa
Los Mochis Sinaloa, México
alberto.baez@uas.edu.mx

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6137-0932>

Delgado Montiel, Tomás

Universidad Autónoma de Sinaloa
Los Mochis Sinaloa, México
tomas.delgado@uas.edu.mx

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5591-6399>

Soto-Rojo, Rody-Abraham

Universidad Autónoma de Sinaloa
Los Mochis Sinaloa, México
rody.soto@uas.edu.mx

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2344-4689>

Baldenebro-López, Jesús-Adrián

Universidad Autónoma de Sinaloa
Los Mochis Sinaloa, México
jesus.baldenebro@uas.edu.mx

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2186-9552>

Glossman-Mitnik, Daniel

Centro de Investigación en Materiales Avanzados
Chihuahua, Chihuahua, México
daniel.glossman@cimav.edu.mx

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9583-4256>

RESUMEN

Se realizó un estudio comparativo de las propiedades electrónicas y químicas de dos compuestos del tipo donador-aceptor: uno a base de trifetilamina y otro de trifetilfosfina. Mediante química

computacional, ambos compuestos fueron analizados empleando la teoría de funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) y la teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT, por sus siglas en inglés). Se realizó el análisis de los niveles de energía del orbital molecular más alto ocupado (HOMO) y del orbital molecular más bajo desocupado (LUMO), con el objetivo de determinar si los niveles cumplen con las condiciones necesarias para su empleo como capa emisora de luz (EML, por sus siglas en inglés) en diodos emisores de luz orgánicos (OLED, por sus siglas en inglés). Además, se estudió el comportamiento espectral de emisión mediante TD-DFT, empleando el conjunto base 6-31G(d) y variando el funcional entre CAM-B3LYP, M06-2X y M11, con el fin de establecer una metodología adecuada para el análisis comparativo. A partir del análisis de la banda de emisión máxima (λ_{emmax}), se concluyó que el compuesto basado en trifenilamina presenta mayor eficiencia energética como material emisor en OLEDs.

Palabras clave: DFT, OLED, emisión, trifenilamina, trifenilfosfina

ABSTRACT

A comparative study was conducted on the electronic and chemical properties of two donor–acceptor type compounds: one based on triphenylamine and the other on triphenylphosphine. Using computational chemistry, both compounds were analyzed employing Density Functional Theory (DFT) and Time-Dependent Density Functional Theory (TD-DFT). The energy levels of the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) were examined to determine whether the levels meet the necessary conditions for use as an emissive layer (EML) in organic light-emitting diodes (OLEDs). Additionally, the emission spectral behavior was studied using TD-DFT with the 6-31G(d) basis set, varying the functional among CAM-B3LYP, M06-2X, and M11, in order to establish an appropriate methodology for comparative analysis. Based on the analysis of the maximum emission band (λ_{emmax}), it was concluded that the compound based on triphenylamine exhibits higher energy efficiency as an emissive material in OLEDs.

Keywords: DFT, OLED, emission, triphenylamine, triphenylphosphine

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los dispositivos más innovadores en la última década son los dispositivos OLEDs los cuales requieren de poca energía para la generación de luz en pantallas electrónicas. Sin embargo, estos dispositivos presentan desafíos al tener un costo elevado y una vida útil limitada (Bauri et al., 2021). Los dispositivos OLEDs se componen principalmente de un ánodo, una capa de transporte de huecos (HIL, por sus siglas en inglés), una capa emisora de luz (EML, por sus siglas en inglés), una capa de transporte de electrones (EIL, por sus siglas en inglés) y un cátodo. En los OLED la capa emisora de luz que se componen de un compuesto “orgánico” se encarga de la recombinación de electrones y huecos para formar excitones que al desexcitarse emiten fotones (luz visible) (Bauri et al., 2021). Los compuestos a base de trifenilamina como EML ha ganado interés científico debido a sus propiedades electrónicas. Por otra parte, la trifenilamina posee una estructura similar a la trifenilfosfina la cual tiene un bajo costo y gran estabilidad química por lo cual podría ser empleada como EML (Rybakiewicz et al., 2017). Con la química computacional es posible hacer un análisis aproximado de las propiedades electrónicas, estructurales y químicas de las moléculas antes de ser llevadas al laboratorio, lo que proporciona información valiosa para la experimentación de nuevos compuestos. Con lo anterior, empleando DFT y TD-DFT se realizó la comparación de un compuesto a base de trifenilamina y uno de trifenilfosfina con el fin de observar su comportamiento y propiedades electrónicas como EML para OLEDs.

2. MARCO CONCEPTUAL

En un estudio experimental, se analizaron las propiedades electrónicas y químicas de nueve compuestos orgánicos a base de oligoeno conjugado con grupos fenilo. De estos, dos compuestos están basados en trifenilamina, los cuales mostraron buenas propiedades fotoelectroquímicas, incluyendo una emisión en la región visible cercano a los 550 nm (Kitamura et al., 2004). Finalmente, el equipo de trabajo realizó un estudio computacional de los compuestos presentados en este trabajo empleando los métodos DFT y TD-DFT para el análisis de las propiedades fotofísicas. En esta investigación, se encontró que la trifenilfosfina cumple con las características necesarias para ser empleada en DSSC; sin embargo, la trifenilamina muestra mejores propiedades como sensibilizador (Báez Castro et al., 2025).

3. MATERIALES Y MÉTODOS

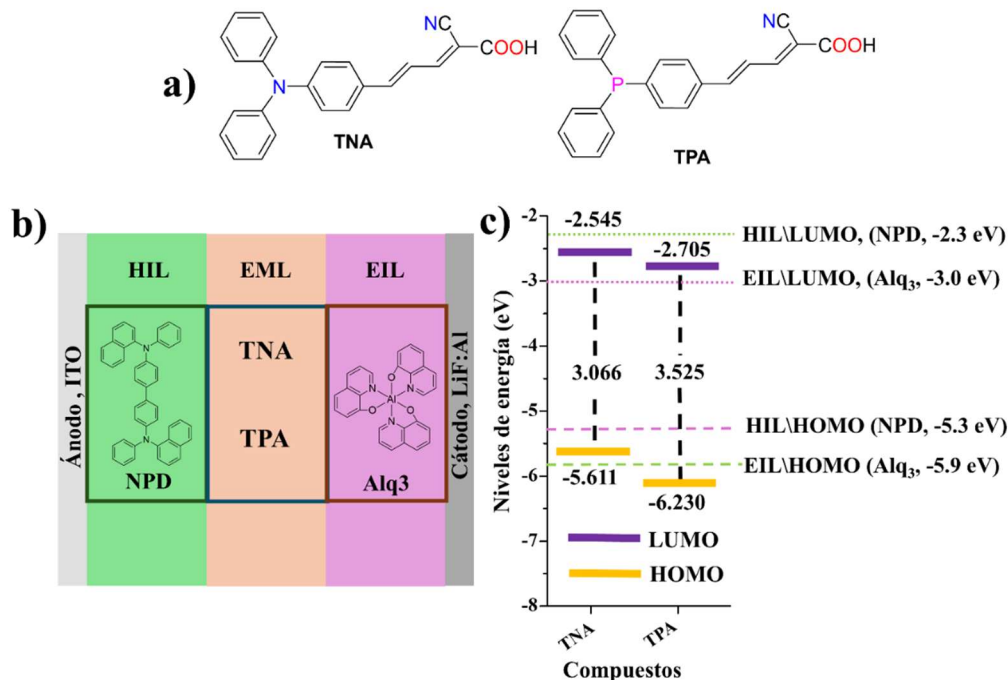
El estudio computacional se realizó con la paquetería Gaussian 16 (Frisch et al., 2016), empleando la teoría funcional de la densidad (DFT) (Vignale & Rasolt, 1987) para la obtención de las estructuras mínima energía y el análisis de niveles de energía se utilizó el funcional híbrido Meta-GGA M06 (Zhao & Truhlar, 2008) y el conjunto de base 6-31G(d) (Hehre et al., 1972; Rassolov et al., 2001). Con la teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT) (Burke et al., 2005), se obtuvieron los espectros de emisión y sus transiciones electrónicas empleando el funcional M06-2X (Zhao & Truhlar, 2008), M11 (Verma et al., 2019) y CAM-B3LYP (Yanai et al., 2004), con el conjunto base 6-31G(d).

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La estructura de TFN y TPN se encuentran representados en la figura 1a. En la figura 1b se representa la estructura básica de un OLED donde el ánodo es a base Óxido de Indio y Estaño (ITO), el HIL se compone de N,N'-Di(1-naftil)-N,N'-difenil-(1,1'-bifenil)-4,4'-diamina (NPD), la EML se representan con los compuestos TNA y TPA mostrados en la figura 1a, la EIL se compone del complejo tris(8-hidroxiquinolinato) de aluminio (Alq_3) y el cátodo a base de Fluoruro de litio y aluminio (LiF:Al). Una de las condiciones para que la EML cumpla su función en el mecanismo de un OLED es necesario que el nivel LUMO de EIL (Alq_3 , -3.0 eV) debe estar ligeramente debajo del nivel LUMO de la EML, para un transporte eficiente de electrones del cátodo hacia la EML. Además, el nivel LUMO de la HIL (NPD, -2.3 eV) debe estar sobre el nivel LUMO de la EML para evitar que los electrones se filtren hacia el ánodo. Por otra parte, el nivel HOMO de la EML debe estar por debajo del nivel HOMO de la HIL (NPD, -5.3 eV) y del nivel HOMO de la EIL (-5.9 eV) lo que mejora la recombinación de cargas en la EML y con ello la eficiencia luminosa del OLED, ya que facilita la inyección de huecos desde la HIL hacia la EML y evita la fuga de huecos hacia la EIL. Con el análisis anterior y la figura 1c se observa que TNA cumple con lo necesario para ser una EML eficiente. Por otra parte, el compuesto TPA cumple solo con algunas de las condiciones mencionadas por lo que no tendría una buena eficiencia energética.

Figura 1

a) Estructura química de TNA y TPA. b) Diagrama básico de un OLED para TNA y TPA. c) Esquema de los niveles de energía HOMO/LUMO de TNA y TPA como EML en OLEDs.



El análisis de los espectros de emisión en la figura 2 y la Tabla 1 de TNA y TPA muestra que TNA presenta una banda de absorción máxima ($\lambda_{em,max}$) cercana al valor experimental (494 nm), siendo M06-2X el funcional más preciso (493 nm). En contraste, TPA exhibe desplazamiento hipsocrómico con CAM-B3LYP (467 nm) y M11 (422 nm), mientras que M06-2X genera un desplazamiento batocrómico, atribuido a la sobrestimación energética del funcional. Por su precisión en sistemas con fuerte transferencia de carga, se seleccionó CAM-B3LYP para el análisis. Con este nivel de cálculo, se observa que sustituir nitrógeno por fósforo reduce la $\lambda_{em,max}$ de 477 nm a 467 nm, indicando que TNA requiere menos energía para emitir luz.

Figura 2
Espectros de emisión teóricos de los compuestos TNA y TPA.

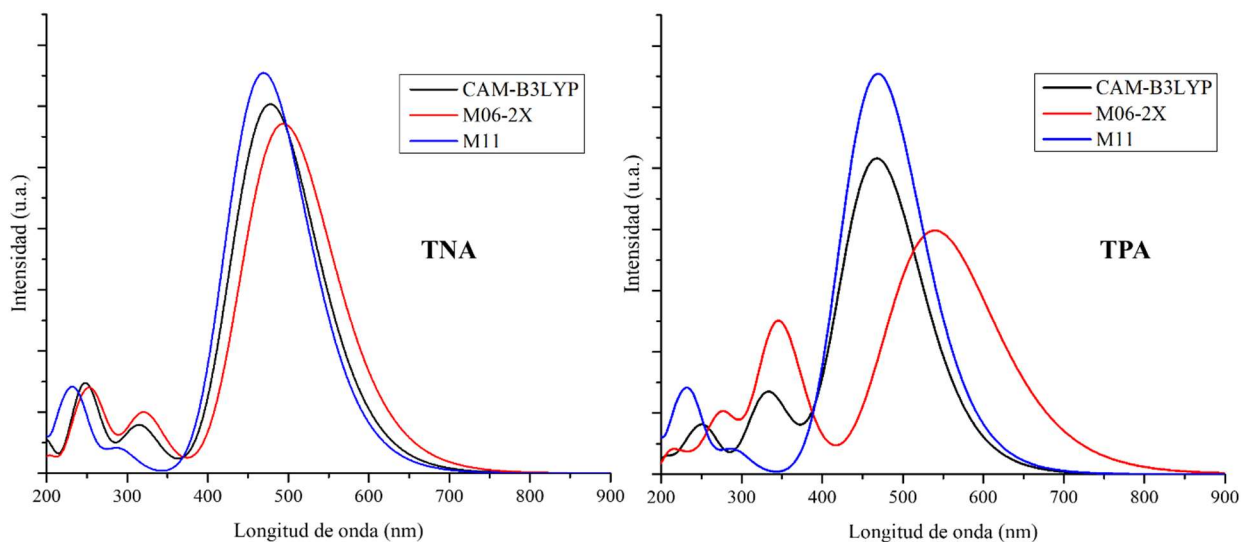


Tabla 1

Banda de emisión máxima de los espectros de emisión teóricos.

Compuestos	Banda de emisión máxima (λ_{emmax})			Experimental
	Funcional			
	CAM-B3LYP	M06-2X	M11	
TNA	477 nm	493 nm	469 nm	494 nm
TPA	467 nm	540 nm	422 nm	-----

5. CONCLUSIONES

El análisis comparativo de los compuestos TNA y TPA como materiales emisores en OLEDs muestra que TNA tiene características electrónicas y ópticas superiores para su uso en dispositivos emisores de luz. La alineación de los niveles HOMO/LUMO indica que TNA cumple con los requisitos necesarios para una inyección y recombinación de cargas eficientes, lo que mejora su rendimiento como capa emisora. Por otro lado, TPA no cumple del todo con estos criterios, lo que limita su eficiencia energética. Los espectros de emisión teóricos, calculados mediante TD-DFT con diferentes funcionales, revelan que TNA tiene una banda de emisión máxima que se acerca más al valor experimental, especialmente con el funcional M06-2X. Sin embargo, se eligió CAM-B3LYP como el más adecuado para el análisis debido a su precisión en sistemas con fuerte transferencia de carga.

REFERENCIAS

- Báez Castro, A., Delgado Montiel, T. de J., Baldenebro Lopez, J. A., Soto Rojo, R. A., Glossman Mitnik, D., & Peñuelas Gámez, C. A. (2025). Análisis computacional de la trifenilamina y trifenilfosfina como sensibilizadores del tipo donador-aceptor en celdas solares sensibilizadas por colorante. *Energías Renovables*, 12(55). <https://doi.org/10.59730/rer.v12n55a1>
- Bauri, J., Choudhary, R. B., & Mandal, G. (2021). Recent advances in efficient emissive materials-based OLED applications: a review. In *Journal of Materials Science* (Vol. 56, Issue 34, pp. 18837–18866). Springer. <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06503-y>
- Burke, K., Werschnik, J., & Gross, E. K. U. (2005). Time-dependent density functional theory: Past, present, and future. *The Journal of Chemical Physics*, 123(6), 062206. <https://doi.org/10.1063/1.1904586>
- Cancès, E., Mennucci, B., & Tomasi, J. (1997). A new integral equation formalism for the polarizable continuum model: Theoretical background and applications to isotropic and anisotropic dielectrics. *Journal of Chemical Physics*, 107(8), 3032–3041. <https://doi.org/10.1063/1.474659>
- Cester, A., Bari, D., Framarin, J., Wrachien, N., Meneghesso, G., Xia, S., Adamovich, V., & Brown, J. J. (2010). Thermal and electrical stress effects of electrical and optical characteristics of Alq3/NPD OLED. *Microelectronics Reliability*, 50(9–11), 1866–1870. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2010.07.114>
- Cossi, M., & Barone, V. (2001). Time-dependent density functional theory for molecules in liquid solutions. *Journal of Chemical Physics*, 115(10), 4708–4717. <https://doi.org/10.1063/1.1394921>
- Cui, D., Wang, S., Li, S., Liu, Y., Du, H., Du, Q., Zhao, L., Wang, W., & Dong, X. (2021). Enhanced performance of OLED based on molecular orientation of emission layer by optimized substrate temperature. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 32(9), 12075–12083. <https://doi.org/10.1007/s10854-021-05836-3>
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Li, X., Caricato, M., Marenich, A.

- V, Bloino, J., Janesko, B. G., Gomperts, R., Mennucci, B., Hratchian, H. P., Ortiz, J. V, ... Fox, D. J. (2016). *Gaussian 16 Rev. C.01*.
- Hehre, W. J., Ditchfield, R., & Pople, J. A. (1972). Self—Consistent Molecular Orbital Methods. XII. Further Extensions of Gaussian—Type Basis Sets for Use in Molecular Orbital Studies of Organic Molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 56(5), 2257–2261. <https://doi.org/10.1063/1.1677527>
- Kitamura, T., Ikeda, M., Shigaki, K., Inoue, T., Anderson, N. A., Ai, X., Lian, T., & Yanagida, S. (2004). Phenyl-Conjugated Oligoene Sensitizers for TiO₂ Solar Cells. *Chemistry of Materials*, 16(9), 1806–1812. <https://doi.org/10.1021/cm0349708>
- Lewars, E. G. (2011). Computational Chemistry. In *Scientific Data Mining and Knowledge Discovery* (2nd Ed.). Springer Netherlands.
- Lu, S.-I. (2015). On the performance of range-separated hybrid in computations of dynamic quadratic polarizability of solution-phase organic molecules: a comparison to MP2(Full) calculation. *Theoretical Chemistry Accounts*, 134(1), 1589. <https://doi.org/10.1007/s00214-014-1589-z>
- Meunier, F. (2007). The greenhouse effect: A new source of energy. *Applied Thermal Engineering*, 27(2–3), 658–664. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2006.05.028>
- Olabi, A. G., & Abdelkareem, M. A. (2022). Renewable energy and climate change. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 158(January), 112111. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112111>
- OSRAM GmbH. (2025). *Color Calculator (7.77)*. OSRAM.
- Parr, R. G., Levy, M., & Balduz, J. L. (1982). Density-Functional Theory for Fractional Particle Number: Derivative Discontinuities of the Energy. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 49(23), 1691–1694. <https://doi.org/https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.1691>
- Pinato, A., Cester, A., Meneghini, M., Wrachien, N., Tazzoli, A., Xia, S., Adamovich, V., Weaver, M. S., Brown, J. J., Zanoni, E., & Meneghesso, G. (2010). Impact of trapped charge and interface defects on the degradation of the optical and electrical characteristics in NPD/Alq₃ OLEDs. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 57(1), 178–187. <https://doi.org/10.1109/TED.2009.2034505>
- Rassolov, V. A., Ratner, M. A., Pople, J. A., Redfern, P. C., & Curtiss, L. A. (2001). 6-31G* basis set for third-row atoms. *Journal of Computational Chemistry*, 22(9), 976–984. <https://doi.org/10.1002/jcc.1058>
- Rybakiewicz, R., Zagorska, M., & Pron, A. (2017). Triphenylamine-based electroactive compounds: Synthesis, properties and application to organic electronics. In *Chemical Papers* (Vol. 71, Issue 2, pp. 243–268). De Gruyter Open Ltd. <https://doi.org/10.1007/s11696-016-0097-0>
- S. I. Gorelsky. (1997). *AOMix: Program for Molecular Orbital Analysis (6.94)*. <http://www.sg-chem.net/>. <http://www.sg-chem.net/>
- Verma, P., Wang, Y., Ghosh, S., He, X., & Truhlar, D. G. (2019). Revised M11 Exchange-Correlation Functional for Electronic Excitation Energies and Ground-State Properties. *Journal of Physical Chemistry A*, 123(13), 2966–2990. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.8b11499>
- Vignale, G., & Rasolt, M. (1987). Density-functional theory in strong magnetic fields. *Physical Review Letters*, 59(20), 2360–2363. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.2360>
- Walker, M., Harvey, A. J. A., Sen, A., & Dessent, C. E. H. (2013). Performance of M06, M06-2X, and M06-HF density functionals for conformationally flexible anionic clusters: M06 functionals perform better than B3LYP for a model system with dispersion and ionic hydrogen-bonding interactions. *Journal of Physical Chemistry A*, 117(47), 12590–12600. <https://doi.org/10.1021/jp408166m>

- Whangbo, M.-H. (2005). Theory and Applications of Computational Chemistry. In *Theory and Applications of Computational Chemistry*.
- Xia, C., Wang, X., Lin, J., Jiang, W., Ni, Y., & Huang, W. (2009). Organic light-emitting devices (OLED) based on new triphenylamine derivatives. *Synthetic Metals*, 159(3–4), 194–200. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2008.08.014>
- Yanai, T., Tew, D. P., & Handy, N. C. (2004). A new hybrid exchange-correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP). *Chemical Physics Letters*, 393(1–3), 51–57. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.06.011>
- Zaier, R., Hajaji, S., Kozaki, M., & Ayachi, S. (2019). DFT and TD-DFT studies on the electronic and optical properties of linear π -conjugated cyclopentadithiophene (CPDT) dimer for efficient blue OLED. *Optical Materials*, 91, 108–114. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.03.013>
- Zhao, Y., & Truhlar, D. G. (2008). The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other function. *Theoretical Chemistry Accounts*, 120(1–3), 215–241. <https://doi.org/10.1007/s00214-007-0310-x>

Los autores del trabajo autorizan a la Universidad Internacional de Ciencia y Tecnología (UNICYT) a publicar este resumen en extenso en las Actas del Congreso IDI-UNICYT 2025 en Acceso Abierto (Open Access) en formato digital (PDF) e integrarlos en diversas plataformas online bajo la licencia CC: Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International (CC BY-NC-SA 4.0) <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>.

La Universidad Internacional de Ciencia y Tecnología y los miembros del Comité Organizador del Congreso IDI-UNICYT 2025 no son responsables del contenido ni de las implicaciones de lo expresado en este artículo.