

SÍNTESIS DE SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS A TRAVÉS DE PROCESOS DE QUÍMICA VERDE

A. Arreola-Castillo, M. E. Sánchez-Vergara

Facultad de ingeniería, Universidad Anáhuac México. Avenida Universidad Anáhuac 46, Col. Lomas Anáhuac, 52786, Huixquilucan, Estado de México, México.

INTRODUCCIÓN

La síntesis de semiconductores orgánicos dopados a base de ftalocianinas metálicas (MFt), es muy importante en el desarrollo de la microelectrónica orgánica, esto debido a su excelente respuesta fotoeléctrica, propiedades ópticas, alta estabilidad química y térmica. Además, no son moléculas tóxicas ni contaminantes, lo que promueve el uso de la química verde en su fabricación. La química verde consiste en una revolucionaria forma de enfocar la síntesis de productos o procesos, para reducir los riesgos que estos representan para la salud y el ambiente.

OBJETIVO Y MÉTODO EXPERIMENTAL

El objetivo del presente trabajo es llevar a cabo la síntesis y caracterización de MFts a partir de derivados del Tetratiafulvaleno (TTF), esto con el fin de generar películas delgadas por sublimación al alto vacío en dos tipos de sustratos: vidrio y tereftalato de polietileno (PET). La MFt empleada fue la ZnFt (C32H16N8Zn) y los derivados del TTF empleados fueron el dibenzotetratio de fulvaleno (C14H8S4) y el octahidrodibenzotetratio de fulvaleno (C14H16S4), estas estructuras se muestran en la Figura 1. Los semiconductores dopados se obtuvieron mediante reacciones basadas en Química Verde en etanol absoluto y utilizando un reactor con presión controlada. El reactor operó con tubos de vidrio de borosilicato a una presión integrada de 20 bar. Las síntesis de los semiconductores dopados se llevaron a cabo mediante las reacciones entre (a) 578 mg (1 mmol) de ZnFt agregados a 152 mg (0.5 mmol) de DBTTF y (b) 578 mg (1 mmol) de ZnFt añadidos a 156 mg (0,5 mmol) de ODBTTF. Estas reacciones se mantuvieron en el reactor durante 35 minutos, y se enfriaron en el mismo reactor al disminuir la presión y la temperatura del sistema. Posteriormente se llevó a cabo el proceso de filtrado, lavado con etanol absoluto y el secado al vacío. Los semiconductores se caracterizaron por espectroscopia IR (Figura 2), espectrometría de masas (Figura 3) y finalmente se depositaron como películas delgadas que fueron analizadas por microscopía electrónica de barrido MEB (Figura 4).

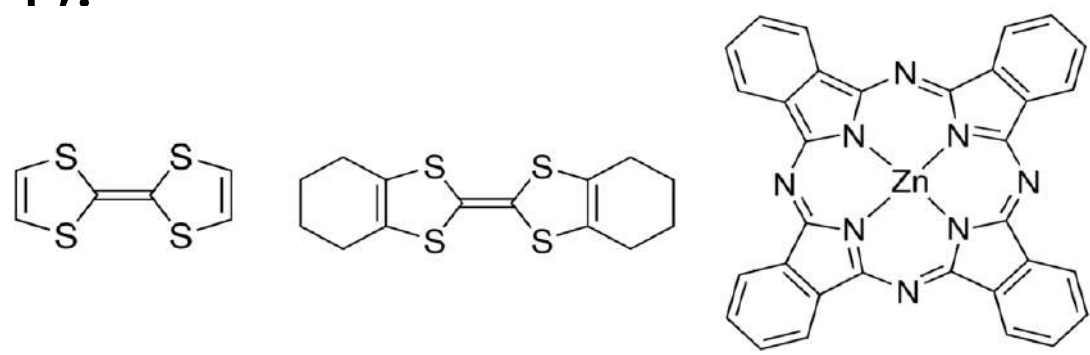


Figura 1. Compuestos utilizados como materia prima.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Mediante espectroscopia se compararon los espectros IR de la materia prima y de los nuevos semiconductores dopados, lo anterior con el fin de asegurarnos que la síntesis se llevó a cabo y descartar el hecho de haber obtenido simplemente una mezcla de reactivos. A través de la espectrometría de masas se realizó un análisis de los pesos moleculares de la materia prima, con las presentes en el espectro. Esto para así confirmar que la reacción se haya logrado de manera correcta y obtener los pesos moleculares de las sustancias sintetizadas.

La espectrometría IR fue el primer criterio para comprobar o descartar la síntesis de nuevos compuestos obtenidos con las reacciones anteriormente mencionadas. Con base en una serie de puntos de interés obtenidos en el espectro comparamos los valores de transmitancia de la materia prima con los de los nuevos compuestos obtenidos.

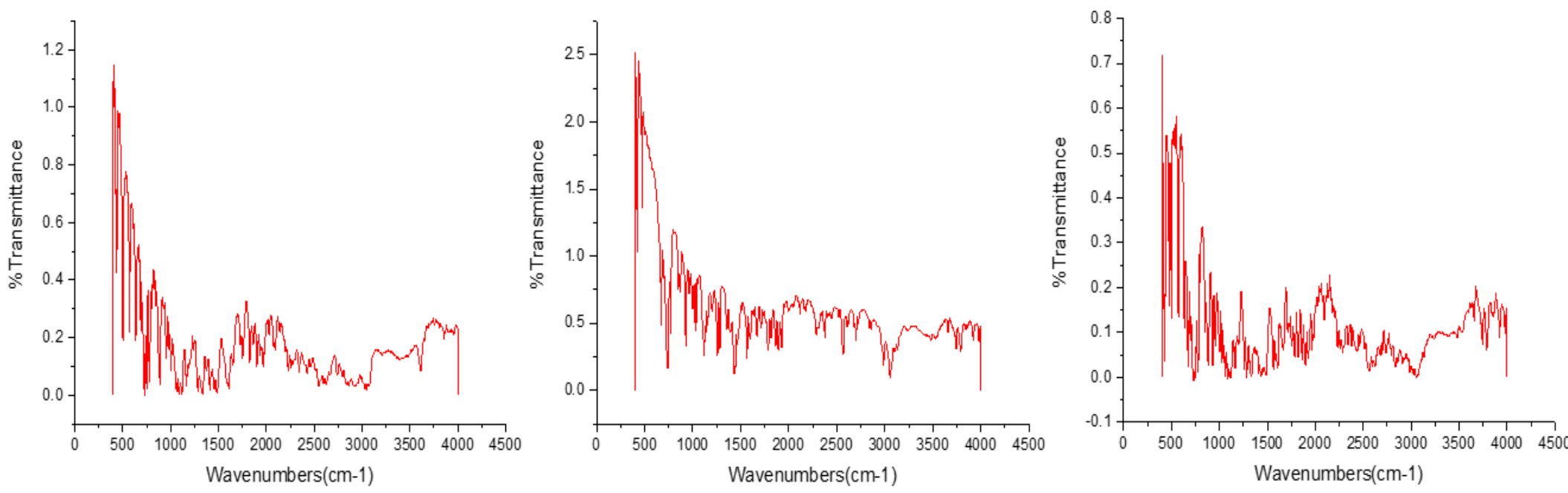


Figura 2.1. Espectro IR materia prima y reacción a).

El semiconductor obtenido mediante la reacción (a), muestra que la región infrarroja del espectro electromagnético presenta una composición semejante a la de ambos ZnFt y DBTTF, con una coincidencia de aproximadamente el 65% de sus puntos de interés que incluyen valores de 500 hasta 3789 de transmitancia.

La reacción (b) presenta un espectro de IR similar al ODBTTF y la ZnFt. La principal observación que se realizó fue la similitud de las tres graficas, lo que nos hace pensar que la síntesis fue exitosa. Posteriormente en el análisis de puntos de interés encontramos más de 50% de coincidencias para ambas materias primas incluyendo valores de 436 hasta 2093 de transmitancia.

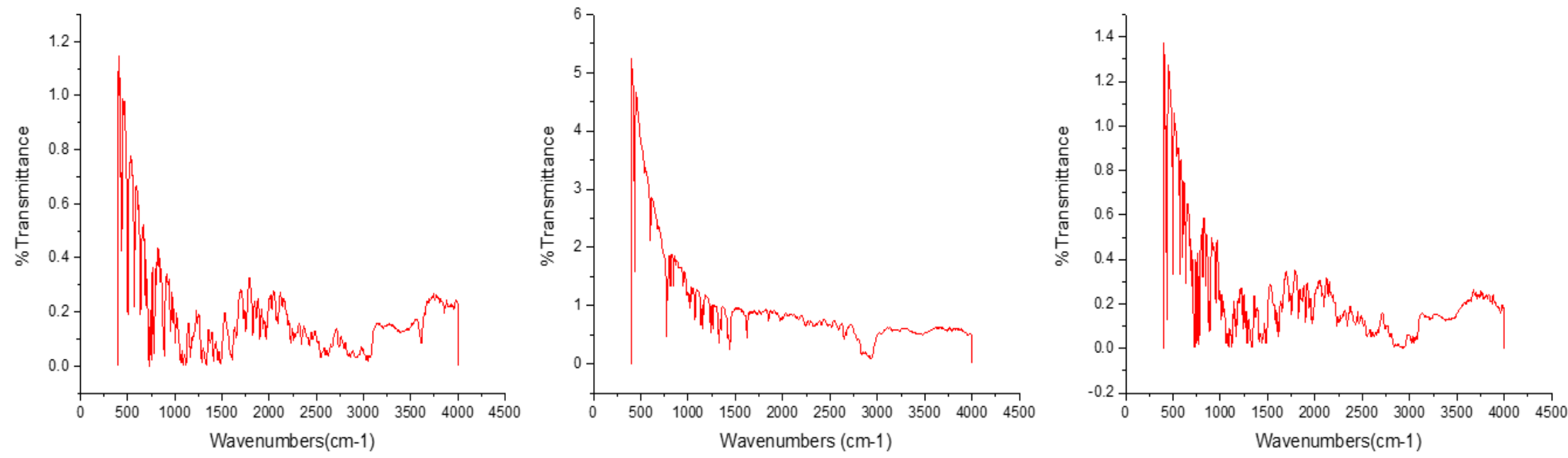


Figura 2.2. Espectro IR materia prima y reacción (b).

A continuación se realizó una segunda prueba para asegurar que se llevó a cabo la síntesis de nuevos semiconductores. Lo anterior a partir de la espectrometría de masas FAB+, con la cual se pudo elaborar una hipótesis de como es que las moléculas de la materia prima se unieron para formar los nuevos compuestos.

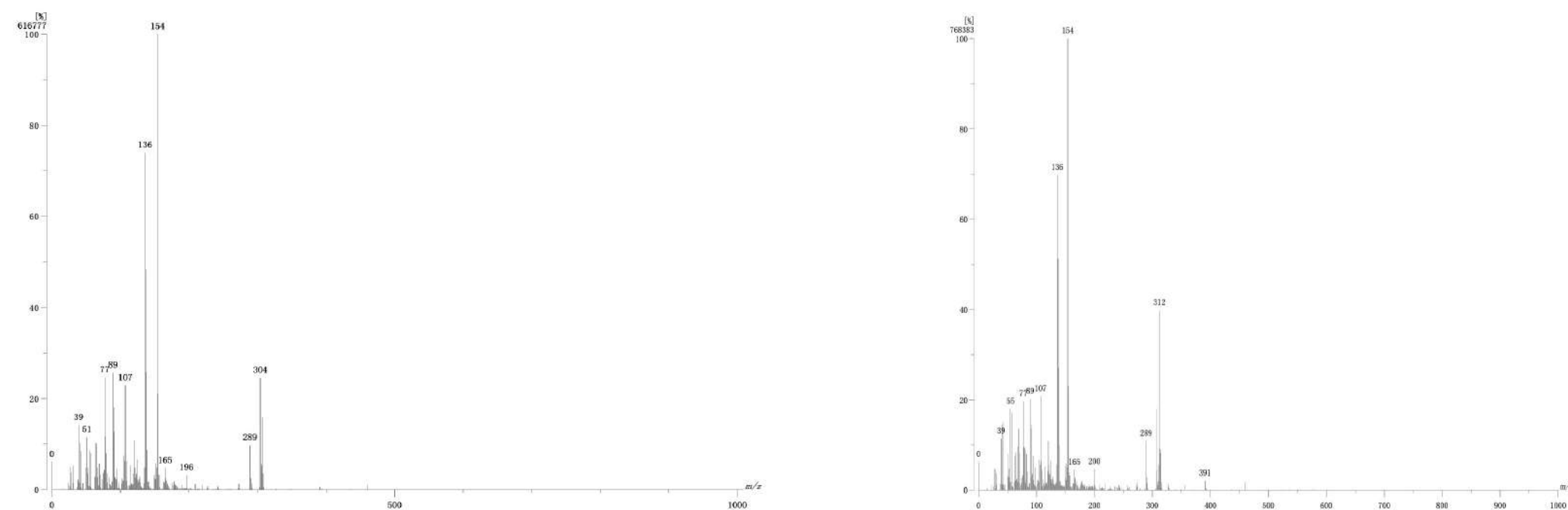


Figura 3. Espectrometría de masas reacción (a) y (b).

Para el caso de la reacción (b) (Figura 3.1) se cree que la síntesis del semiconductor se logró cuando la ZnFt pierde cuatro grupos hexano, el ODBTTF pierde dos grupos hexanos cuando se separa y los fragmentos de que contienen azufre se acomodaron en estos espacios formando un nuevo compuesto con una masa aproximada de 391 g/mol.

Posteriormente, estos semiconductores se depositaron como películas delgadas mediante sublimación de alto vacío. La sublimación de alto vacío presenta importantes ventajas en términos de disminución de tiempo, costo y materiales. En el análisis de MEB a las películas delgadas, se muestra la formación de estructuras aparentemente policristalinas sobre una base homogénea. La mayoría de las partículas presentan tamaños inferiores a las 10µm.

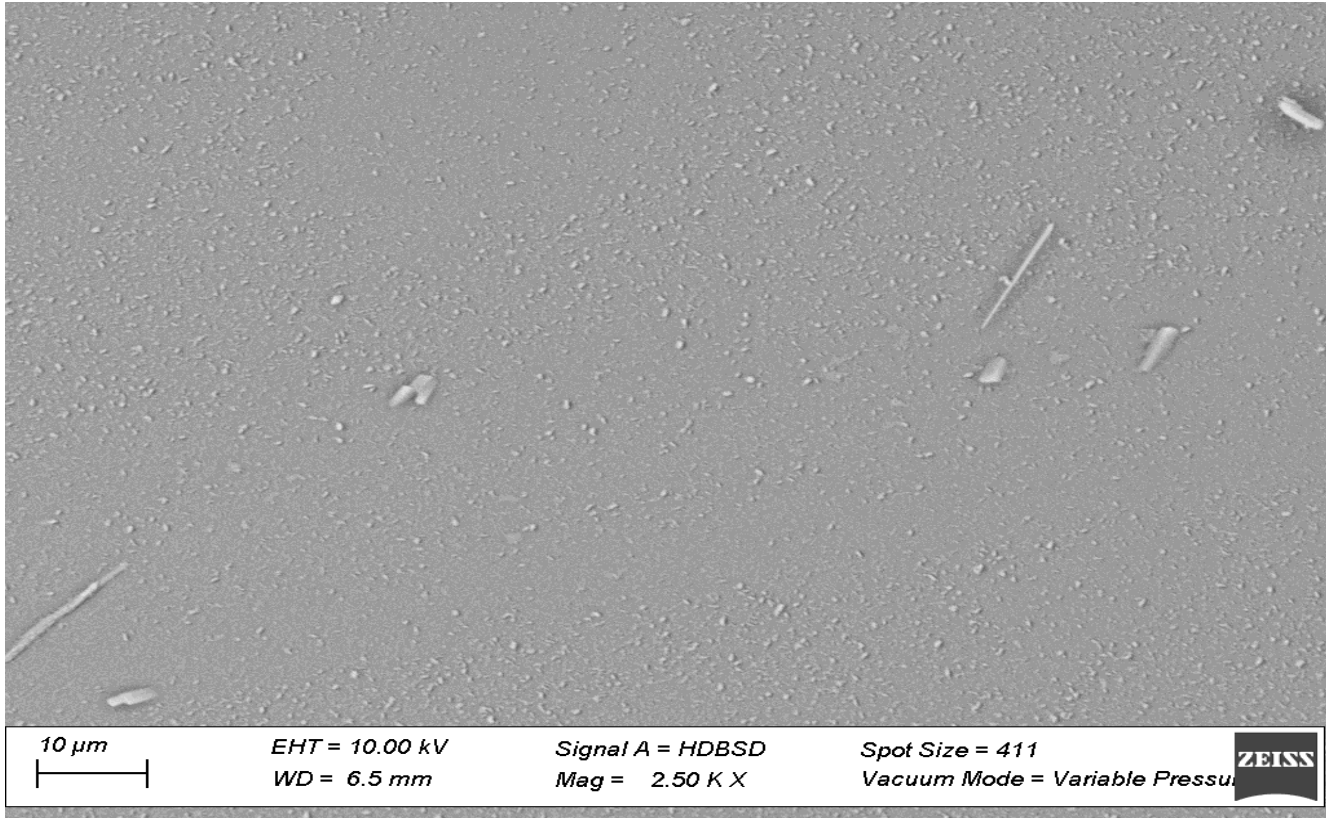


Figura 4.1 Microscopia electrónica de barrido (2.5K X) reacción a).

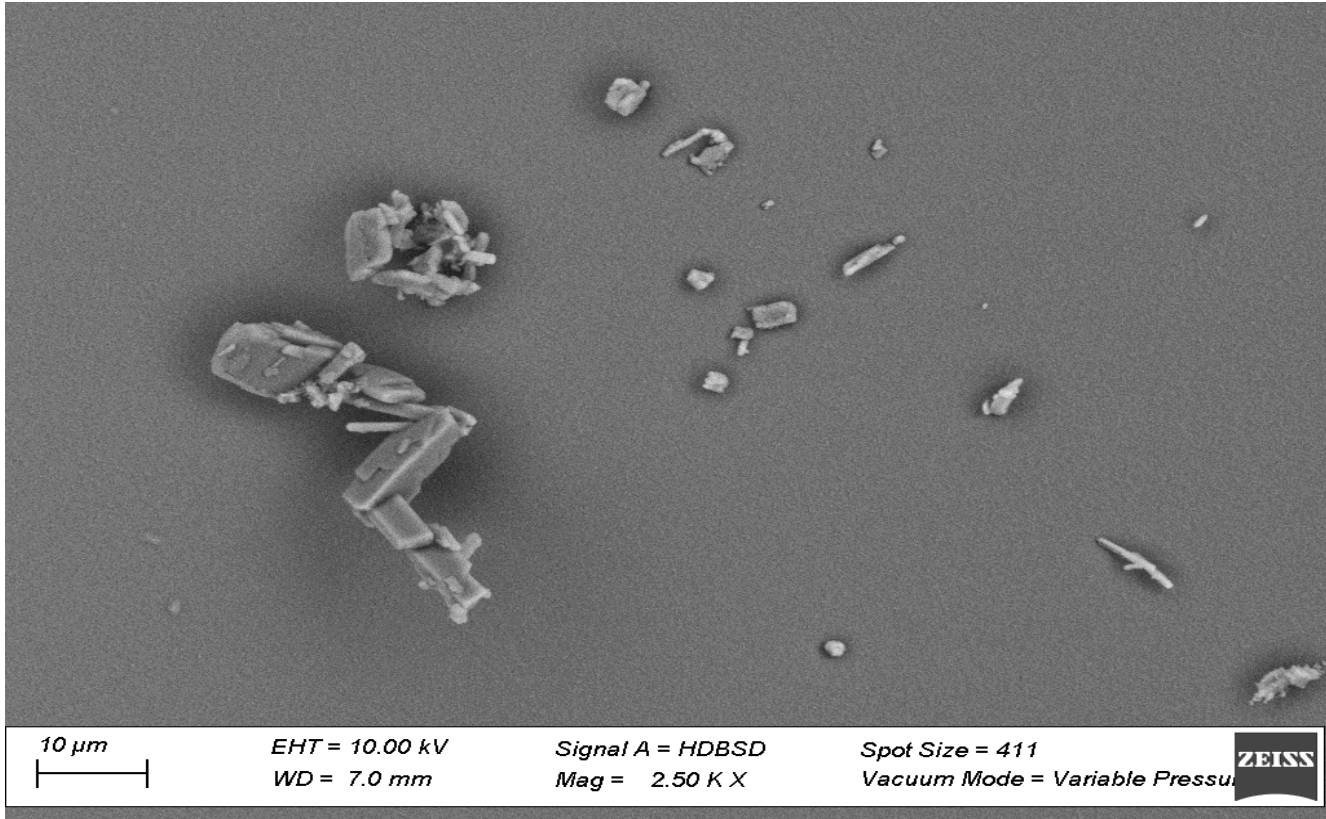


Figura 4.2 Microscopia electrónica de barrido (2.5K X) reacción b).

CONCLUSIONES

Con base en los resultados obtenidos, estos materiales pueden tener un gran potencial como semiconductores orgánicos, los cuales posteriormente podrían ser utilizados en dispositivos fotovoltaicos. A demás podemos afirmar que al momento de hacer reaccionar la materia prima obtuvimos nuevos compuestos pues ambos presentan características similares en el espectro IR y mediante espectrometría de masas logramos observar como todos los elemento se encontraban presentes en el nuevo semiconductor.