



Rocío Sánchez Ruiz
Estudiante de Ingeniería Ambiental
rociosanchez@hotmail.com



María Elena Sánchez Vergara
Directora del Centro en Innovación Tecnológica CENIT
elena.sanchez@anahuac.mx

INTRODUCCIÓN

Tecnologías alternativas se han desarrollado durante los últimos años para los dispositivos solares convencionales, fabricados comúnmente a partir de semiconductores inorgánicos como el silicio. Dichas tecnologías comprenden el uso de semiconductores orgánicos como las metalofthalocianinas (MFts), por sus bajos costos, excelentes propiedades ópticas y eléctricas, que les permiten mantener una eficiencia en la conversión de energía similar a la del silicio. Las MFts son dopadas con ligantes orgánicos para potenciar su uso en dispositivos optoelectrónicos [1]. Este estudio tiene como objetivo determinar, a través de técnicas de espectrometría Raman, los enlaces químicos que generan la diferencia en las propiedades ópticas de la ftalocianina de magnesio (MgFt), dopada con dos diferentes ligantes derivados de la familia de los alenos.

MATERIAL Y MÉTODO

Se elaboraron dos tipos de películas delgadas en distintos sustratos por medio de la técnica de evaporación al alto vacío, empleando la MgFt (figura 1a) dopada con el ligante 1 denominado L1 (figura 1b) y con el ligante 2, denominado L2 (figura 1c). A los nuevos materiales se les denominó Mg+1 y Mg+2 y fueron evaluados en sus propiedades ópticas a través de espectroscopia UV-Vis (espectrofotómetro Unicam). Por medio de la medición de la absorbancia, la transmitancia y aplicando la relación de Urbach y el modelo de Tauc, se determinó la energía de activación de cada película. La presencia de enlaces químicos se midió a través de espectrometría Raman (espectrómetro Raman Horiba). Con estos datos, se determinaron los enlaces químicos que influyeron en las propiedades ópticas determinadas inicialmente.

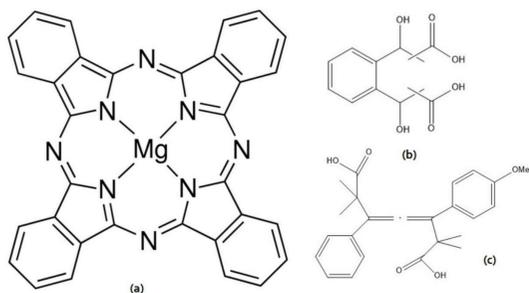


Figura 1.

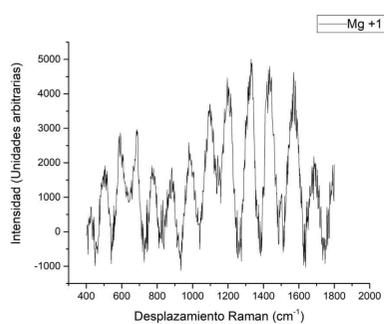


Figura 2a

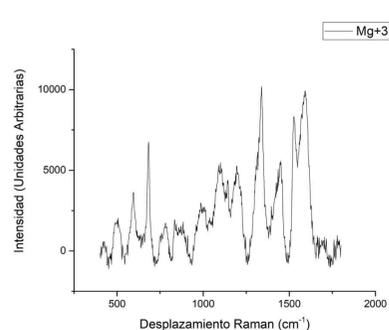


Figura 2b

RESULTADOS

En la tabla 1 se presentan las energías de activación de cada película obtenidas por los análisis ópticos. Por otro lado, se analizaron los espectros de las bandas de absorción (las crestas) en la figura 2, que corresponden a los desplazamientos de las vibraciones de los enlaces, característicos de cada material. A partir de estos valores experimentales, en la tabla 2 se compararon los valores teóricos correspondientes los ligantes 1, 2 y a MgFt puro [2]. Se encontraron señales presentes en los Mg+1 y Mg+2, que corresponden a intensidades características y presentes en MgFt pura.

	Mg+1	Mg+2
Energía de activación (eV)	1.15, 1.41, 2.64	1.15, 1.8, 2.8

Tabla 1. Energía de activación de las películas semiconductoras

Experimentales		Teóricos		
Mg+1	Mg+2	Compuesto orgánico 1	Compuesto orgánico 2	Grupo funcional
592	595	590 ± 2, 1000 ± 2 cm ⁻¹	590 ± 2, 1000 ± 2 cm ⁻¹	Anillo bencénico
815.5	819.4	Grandes intensidades y diferentes desplazamientos		
822.87	827			
831	835			
851.55	851.6	Grandes intensidades e iguales desplazamientos		
910	910			
915.89	916			
1000.77	1000.5	590 ± 2, 1000 ± 2 cm ⁻¹	590 ± 2, 1000 ± 2 cm ⁻¹	Anillo bencénico
1116	1119.9	1165 ± 2, 1118 ± 2 cm ⁻¹	1166 ± 2, 1118 ± 2 cm ⁻¹	C-Anillo
1169.77	1166.5	1165 ± 2, 1118 ± 2 cm ⁻¹	1166 ± 2, 1118 ± 2 cm ⁻¹	C-Anillo
1203.1	-----	1206 ± 2 cm ⁻¹	-----	C=C-H
1215.89	1214.8	1211 ± 2 cm ⁻¹	1211 ± 2 cm ⁻¹	C-H
1616.27	---	1610 ± 5 cm ⁻¹	-----	C=C
1662.4	1662	1662 ± 2 cm ⁻¹	1663 ± 2 cm ⁻¹	O=C
1724	1723	1610 - 1740 cm ⁻¹	1610 - 1740 cm ⁻¹	Carboxílico

Tabla 2. Desplazamiento Raman experimentales vs. Teóricas de grupos funcionales presentes

DISCUSIÓN

En las figuras 2a y 2b se observan diferencias en las señales Raman de Mg+1 y Mg+2, esto puede deberse a los distintos enlaces que se formaron después del dopaje. En cuanto a las propiedades ópticas, las energías de activación están en el rango de los semiconductores orgánicos (<4eV) y se obtuvieron mejores resultados en Mg+1 (tabla 1). Aunque los enlaces hidroxilo son débiles, son lo suficientemente abundantes en la molécula del L1 y favorecen las propiedades ópticas, a pesar de que la molécula del L2 tiene mayor cantidad de enlaces dobles. Asimismo, los enlaces C=C y C=C-H están presentes únicamente en el L1, lo cual indica que estos grupos funcionales también favorecen la conducción y determinan el comportamiento óptico.

REFERENCIAS

- Plows F, Jones A. Laser-Desorption Supersonic Jet Spectroscopy of Phthalocyanines. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 1999;194:163-170.
- Sánchez-Vergara M, Medrano-Gallardo D, Vera Estrada IL, Jiménez SO. Optical absorption and electrical properties of MPc (M Fe, Cu, Zn)-TCNQ interfaces for optoelectronic applications, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2018;115:373-380.