

# Comparación de enlaces químicos y características ópticas de Semiconductores Orgánicos para su aplicación en Dispositivos Solares



R. Sánchez-Ruiz, M.E. Sánchez-Vergara.

Facultad de Ingeniería, Universidad Anáhuac México, Campus Norte.

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

## 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. Este semiconductor inorgánico puede ser sustituido con semiconductores orgánicos como las **ftalocianinas** (Fts), especialmente por sus derivados metálicos: las MFTs. Lo anterior debido a sus bajos costos y sus **propiedades** ópticas, eléctricas y estructurales, que les permiten mantener una eficiencia en la conversión de energía similar a la del silicio, lo cual facilita su uso en dispositivos optoelectrónicos. Las MFTs pueden ser dopadas con **ligantes** orgánicos para incrementar el número de canales de **conducción** y los enlaces químicos formados al dopar, **definen** dichas propiedades ópticas y eléctricas.

## METODOLOGÍA

Se elaboraron dos tipos de películas delgadas por medio de la técnica de evaporación al alto vacío, empleando la **Ftalocianina de Magnesio** (MgFt) (Figura 1a) dopada tanto con el **aleno** 1 (Figura 1b), como con el compuesto 2 (Figura 1c), para su posterior deposición en diferentes sustratos. A los nuevos materiales se les denominó **Mg+1** y **Mg+2** y posterior a su depósito como películas, fueron evaluados en sus propiedades ópticas a través de espectroscopia **UV-Vis** empleando un 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 dos métodos: espectrometría **IR** y **Raman**. La primera, se realizó en pellets de KBr con un espectrómetro Nicolet iS5-FT y la segunda se realizó en cristales de cada semiconductor con ayuda de un espectrómetro Raman Horiba que cuenta con dos haces de luz: 532 nm (láser verde) y 785 nm (láser rojo). Con estos datos, se determinaron los **enlaces químicos** que influyeron en las propiedades ópticas determinadas inicialmente.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la **Tabla 1** se presentan las energías de activación de cada película, en la que se muestra la similitud de resultados entre los dos compuestos dopados. Todos los valores se encuentran dentro del rango de los **semiconductores orgánicos**: energía de activación < 4eV. Las gráficas de Tauc se presentan en la **Figura 2**.

Tabla 1. Energía de activación de las películas semiconductoras

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

Cada medición de espectroscopia **Raman** se realizó tres veces con el **láser** que permitía en su momento obtener más información, es decir, que no saturaba o degradaba la muestra. El espectrómetro obtuvo datos acerca de los **estados vibracionales** del material, lo cual permite obtener información del estado de los enlaces entre la ftalocianina y sus dopantes, descritos anteriormente (ver **Figura 1**). Para lograr lo anterior se analizaron los espectros de las bandas de absorción (las crestas) en la **Figura 3**, que corresponden a los desplazamientos de las vibraciones de los enlaces, característicos de cada material.

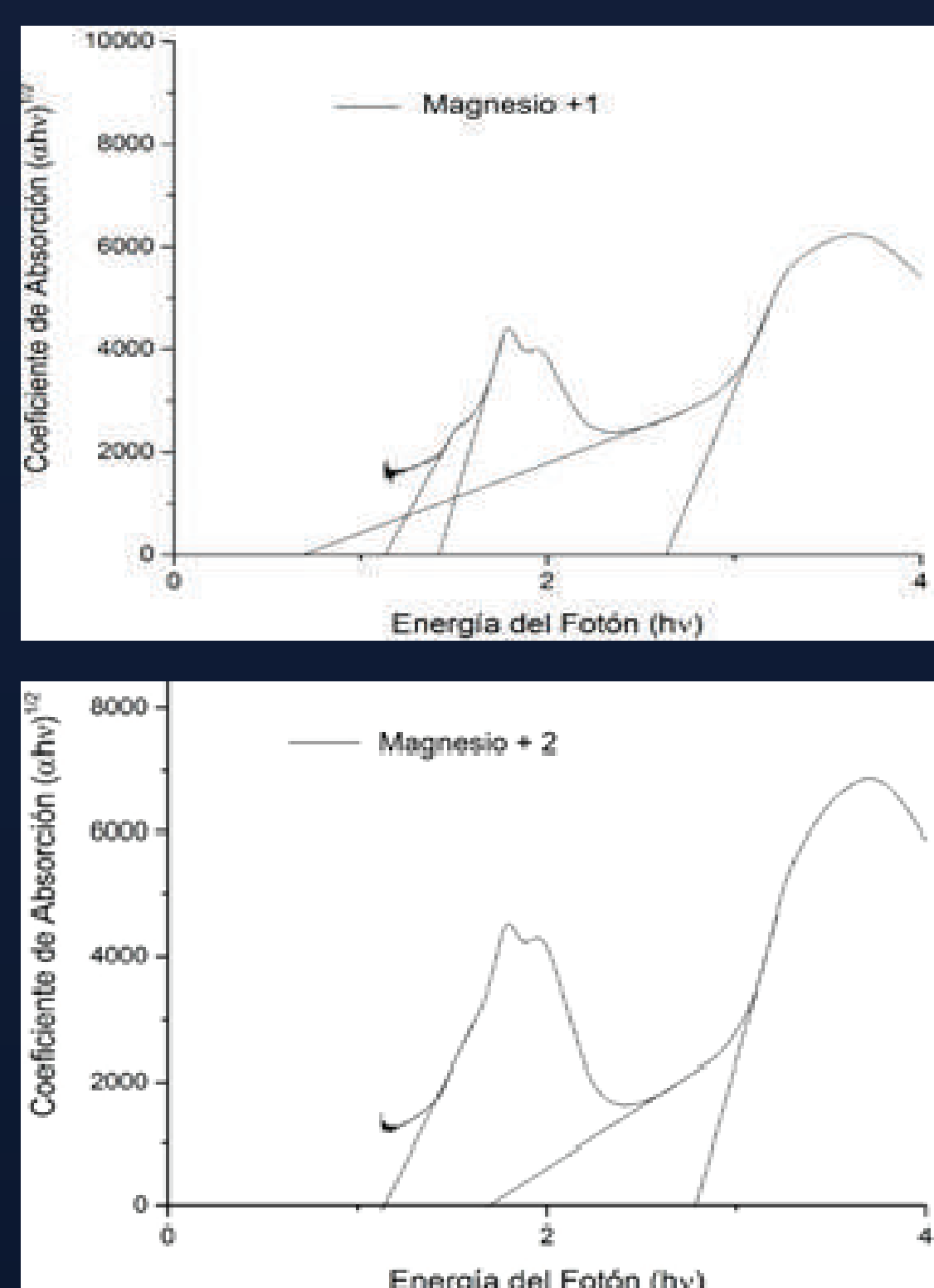


Figura 2. Determinación de la energía de activación para Mg+1 y Mg+2

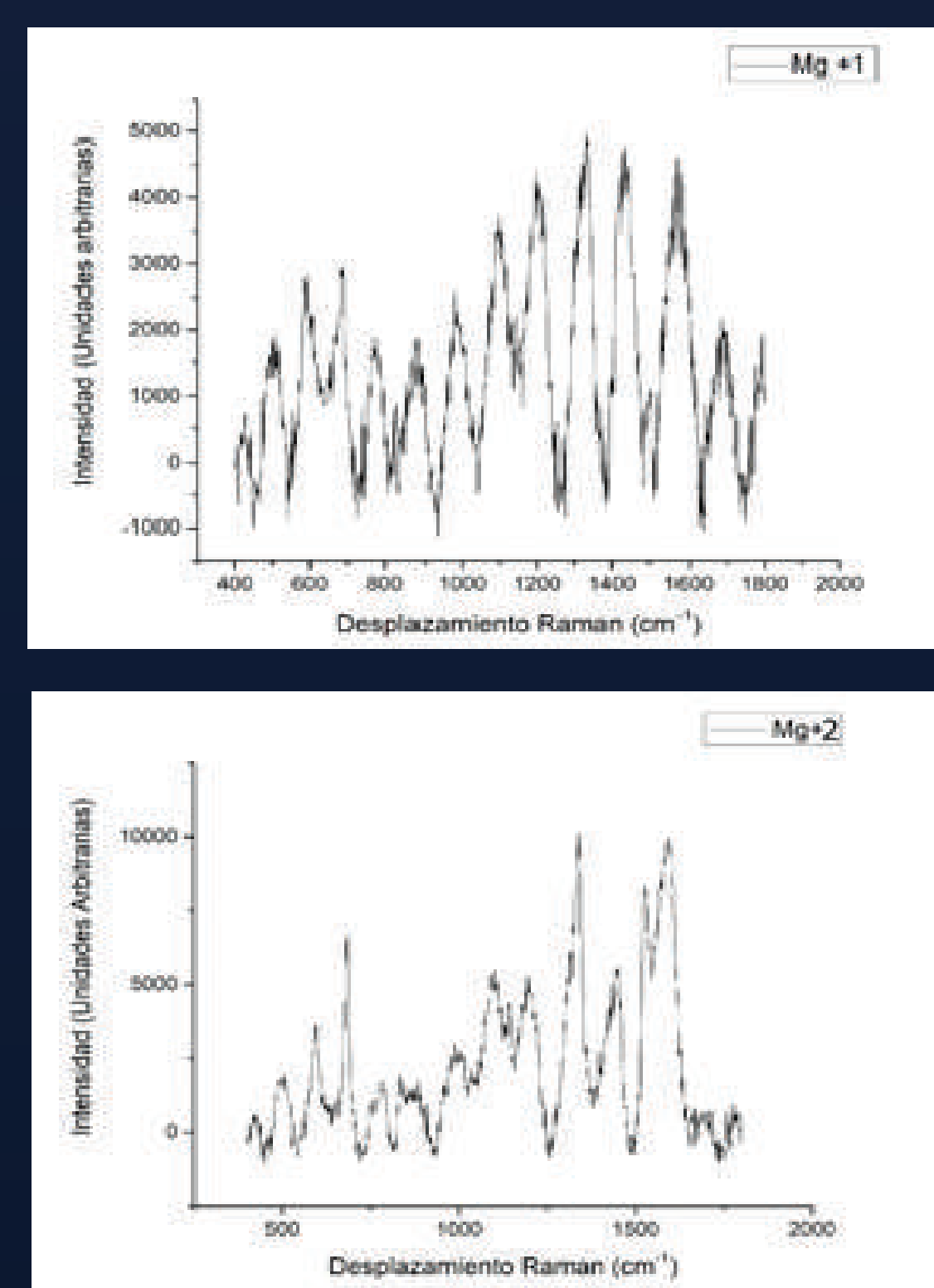


Figura 3. Características J-V del dispositivo sometido a distintas radiaciones.

## OBJETIVO

Determinar a través de técnicas de **espectrometría** Infrarroja (IR) y 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**. La estructura de las tres moléculas se presenta en la **Figura 1**.

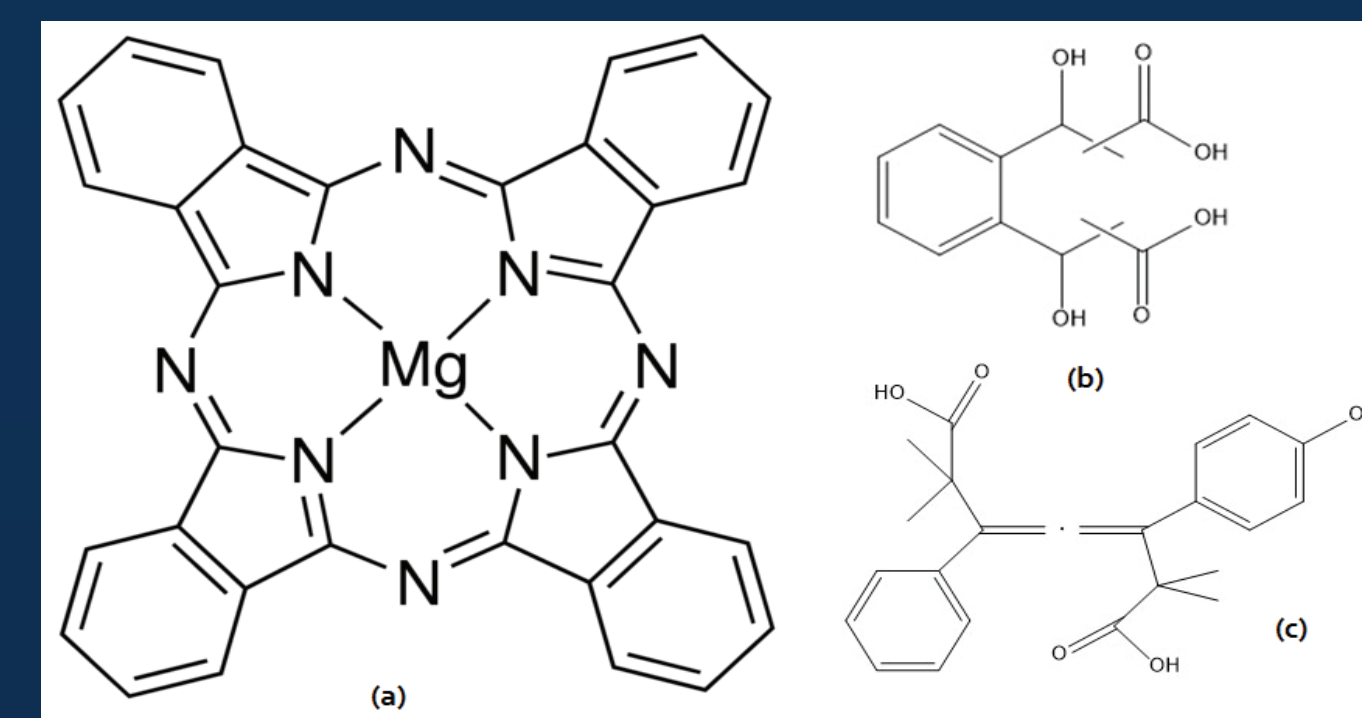


Figura 1. a) Estructura molecular de (1) MgFt, (b) Compuesto 1- C1 y (c) Compuesto 2- C2

En la **Tabla 2** se observan los valores del desplazamiento Raman en  $\text{cm}^{-1}$  característicos de los distintos enlaces y grupos funcionales **presentes** en C1 y C2. El punto negro indica la presencia del enlace en el C1, en C2 o en ambos compuestos. Los enlaces que resultan **diferentes** son: C=C, C=C-H, alquenos e hidroxilos.

Tabla 2. Señales Raman de enlaces de cada enlace o grupo funcional

| Enlace           | Desplazamiento Raman                     | Compuesto 1 | Compuesto 3 |
|------------------|--|-------------|-------------|
| C-C              | $1601 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$             | •           | •           |
| O=C              | $1662 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$             | •           | •           |
| C=C              | $1610 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$             | •           | •           |
| C=C-H            | $1206 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$             | •           | •           |
| C-Anillo         | $1165 \pm 2, 1118 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$ | •           | •           |
| C-H              | $1211 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$             | •           | •           |
| Anillo bencénico | $590 \pm 2, 1000 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$  | •           | •           |
| Grupo funcional  | Desplazamiento Raman                     | Compuesto 1 | Compuesto 3 |
| Carboxílico      | $1610-1740 \text{ cm}^{-1}$              | •           | •           |
| Alqueno          | $1638-1650 \text{ cm}^{-1}$              | •           | •           |
| Hidroxilo        | $3000 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$             | •           | •           |

Tabla 3. Desplazamiento Raman  $\text{cm}^{-1}$  encontradas vs. Teóricas de grupos funcionales

| Mg+1    | Mg+3   | Compuesto orgánico 1                      | Compuesto Orgánico 2     | Grupo funcional  |
|---------|--------|---|--------------------------|------------------|
| 592     | 595    | $590 \pm 2, 1000 \pm 2$                   | $590 \pm 2, 1000 \pm 2$  | Anillo bencénico |
| 815.5   | 819.4  | Grandes intensidades y diferentes señales |                          |                  |
| 822.87  | 827    |   |                          |                  |
| 831     | 835    |   |                          |                  |
| 842.25  | 847    |   |                          |                  |
| 851.55  | 851.6  | Grandes intensidades e iguales señales    |                          |                  |
| 910     | 910    |   |                          |                  |
| 915.89  | 916    |   |                          |                  |
| 1000.77 | 1000.5 | $590 \pm 2, 1000 \pm 2$                   | $590 \pm 2, 1000 \pm 2$  | Anillo bencénico |
| 1116    | 1119.9 | $1165 \pm 2, 1118 \pm 2$                  | $1166 \pm 2, 1118 \pm 2$ | C-Anillo         |
| 1169.77 | 1166.5 | $1165 \pm 2, 1118 \pm 2$                  | $1166 \pm 2, 1118 \pm 2$ | C-Anillo         |
| 1203.1  | 1202   | $1206 \pm 2$                              | $1206 \pm 2$             | C=C-H            |
| 1215.89 | 1214.8 | $1211 \pm 2$                              | $1211 \pm 2$             | C-H              |
| 1616.27 | ---    | $1610 \pm 5$                              | ---                      | C=C              |
| 1662.4  | 1662   | $1662 \pm 2$                              | $1663 \pm 2$             | O=C              |
| 1724    | 1723   | $1610-1740$                               | $1610-1740$              | Carboxílico      |

A partir de estos valores teóricos, en la **Tabla 3** se compararon los valores del **desplazamiento** Raman obtenido a partir de las mediciones que se encuentran en la **Figura 3**. Se puede observar que no todas las señales Raman coinciden y esto puede deberse a los **distintos** enlaces que se pudieron haber formado después del **dopado**. Los que coinciden son enlaces que ambos compuestos presentan, como los anillos bencénicos que se pueden observar en la **Tabla 2**.

## CONCLUSIONES

En cuanto a las propiedades ópticas, se obtuvieron **mejores** resultados en **Mg+1**, como se puede observar en la **Tabla 1**, ya que entre **menores** sean los valores, menor energía de excitación es necesaria para que el semiconductor, **conduzca** electrones. Por lo anterior se puede decir que los enlaces **hidroxilo** son débiles, pero **abundantes** en el **C1** y favorecen las propiedades ópticas, a pesar de que el **C2** tiene mayor cantidad de enlaces dobles.

En la **Tabla 2** se pueden observar señales presentes en ambos compuestos, que corresponden a **intensidades** características y presentes en MgFt puro [1]. Las señales diferentes se pueden atribuir a los enlaces formados en la síntesis de los compuestos orgánicos 1 y 2, con la **MgFt**. Se puede decir que los **grupos** funcionales que determinan el comportamiento óptico de estos semiconductores son los **alquenos** presentes en el **C2** y los **hidroxilos** presentes en el **C1**.

## REFERENCIAS

[1] F. Plows & A. Jones. Laser-Desorption Supersonic Jet Spectroscopy of Phthalocyanines. Journal of Molecular Spectroscopy 194, 163–170 (1999)

[2] M.E. Sánchez-Vergara, D. Medrano-Gallardo, I.L. Vera Estrada, O. Jiménez Sandoval Optical absorption and electrical properties of MPC (M 1/4Fe, Cu, Zn)-TCNQ interfaces for optoelectronic applications, Journal of Physics and Chemistry of Solids 115 (2018) 373–380. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2018.01.005>