

SÍNTESIS DE MATERIALES QUÍMICOS CON COMPONENTE MTAAB, PARA SU USO EN DISPOSITIVOS SOLARES



Renata Maya Rangel
Alumna de Ingeniería Mecatrónica
renata_mayran@hotmail.com



Raquel Carrera Téllez
Alumna de Ingeniería Ambiental.
raquecarrera@hotmail.com



María Elena Sánchez Vergara
Coordinadora del Centro de
Innovación Tecnológica.
elena.sanchez@anahuac.mx

Introducción

El uso de materiales emergentes para el desarrollo de tecnologías optoelectrónicas tiene como objetivo diseñar dispositivos fotovoltaicos de bajos costos e impacto ambiental. Los complejos metálicos con ligandos derivados del o-aminobenzaldehído tetra-anhidrotetrámero $M(II)(TAAB)^{2+}$ ($M=Ni, Cu$), son algunos de los macrociclos con propiedades semiconductoras empleados para esta propósitos. Adicionalmente, cuando se les incorpora grupos sustituyentes a sus ligandos macrocíclicos, estos compuestos presentan cambios interesantes en sus propiedades ópticas y eléctricas. En este trabajo se presenta la preparación, por síntesis química, de semiconductores moleculares que contienen nitrato y perclorato de tetrabenzos (b,f,j,n) {1,5,9,13} tetraazaciclohexadecina de cobre y níquel (II), respectivamente (1a), y moléculas de base orgánica (1b) con las estructuras mostradas en la figura 1.

Compuestos	Espesor (Å)	Rugosidad promedio (Å)	Rugosidad cuadrada (Å)	Gap directo (eV)	Gap indirecto (eV)
(Ni TAAB)(L) ₂	3733.64	915.28	1162.37	3.54, 3.46, 3.14	3.25, 2.06, 1.33
(Cu TAAB)(L) ₂	3422.12	927.67	927.67	3.45, 2.76	2.56, 1.89

Tabla 1. Parámetros característicos de las películas.

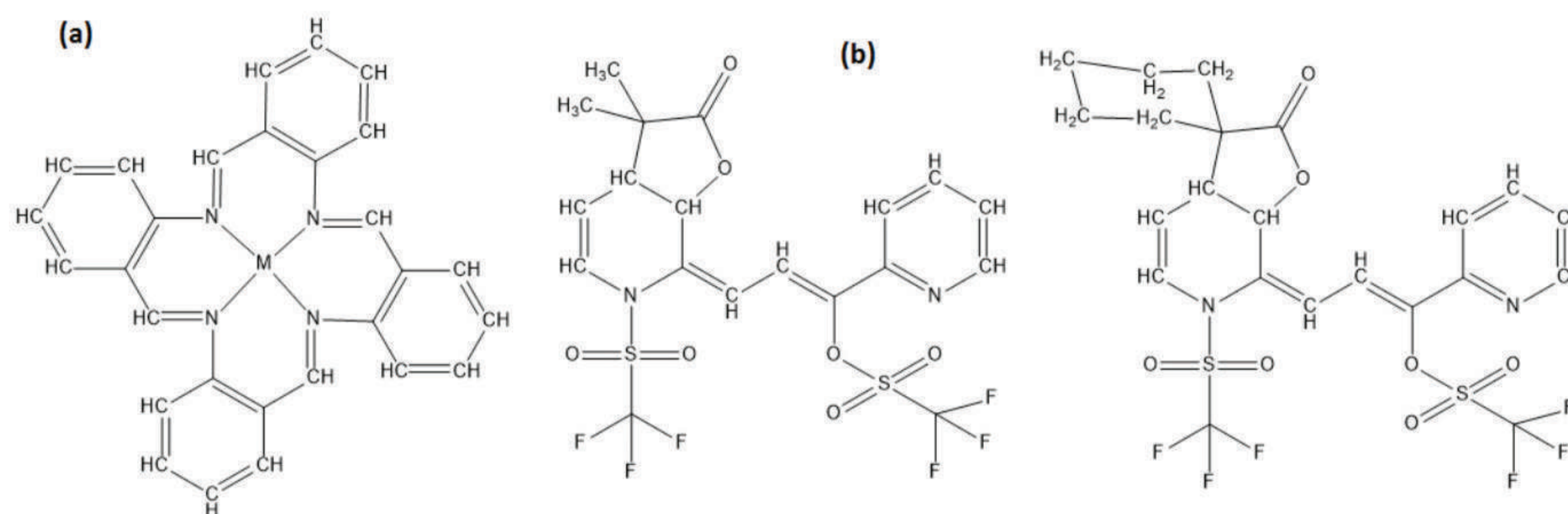


Figura 1. Precursores de los materiales moleculares.

Material y Método

Los semiconductores moleculares fueron sintetizados por el método de reflujo y depositados por el método de evaporación al alto vacío sobre sustratos de vidrio Corning puro y con película conductora de ITO, cuarzo y silicio monocristalino. Estos materiales fueron caracterizados química y estructuralmente por técnicas como la perfilometría para conocer la rugosidad y espesor de las películas, espectroscopia IR con el fin de monitorear los grupos funcionales, Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) y Espectroscopía de Energía Dispersa (EED) para obtener la composición química y estructural. La caracterización óptica se realizó con espectroscopia UV-vis.

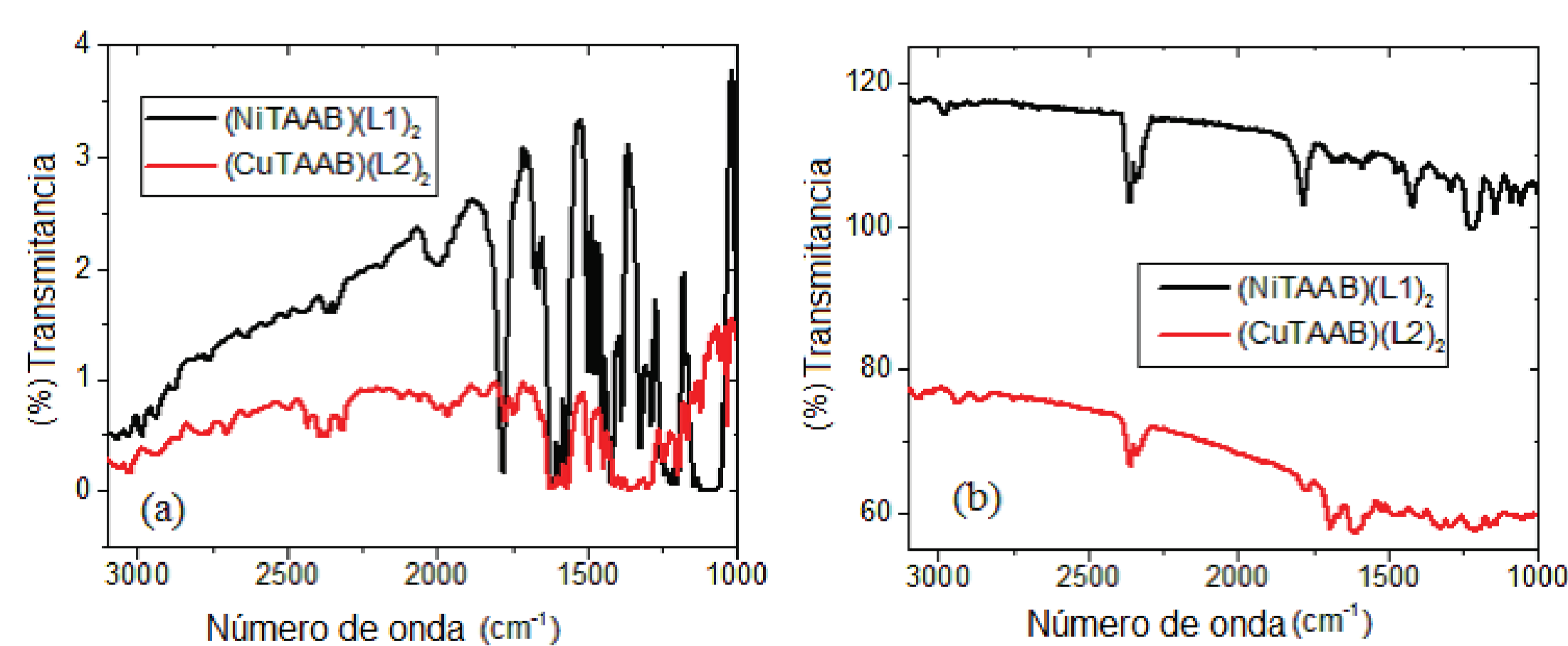


Figura 2. Espectro IR para los compuestos en KBR (a) y películas (b).

Resultados y Discusión

La espectroscopia IR confirmó la síntesis de nuevos compuestos y no solo de la mezcla, ya que se encontraron nuevos enlaces (figura 2). Adicionalmente, se demostró que durante la evaporación no hubo degradación de los compuestos, ya que se confirmó la presencia de los principales grupos funcionales en las películas y pastillas (KBr), indicando la estabilidad térmica de los compuestos. Por otro lado, el grosor y la rugosidad (tabla 1) indican que ambas películas tienen resultados similares, lo que sugiere que el transporte de cargas eléctricas es parecido.

Para conocer la morfología de las películas se utilizó la MEB (figura 3). Se observa que las películas tienen una distribución homogénea de partículas, con un tamaño superior a 100 μm . Además, muestra estructuras irregulares de diferente morfología. En la película de níquel se observa una aglomeración; esto implica la fase de nucleación relativamente baja, lo que dio lugar a la formación de partículas grandes. Los resultados del EED (figura 4) muestran la presencia del metal en cada compuesto, indicio del macrociclo. La presencia de flúor, oxígeno y azufre señalan la existencia de compuestos orgánicos.

Finalmente, con la espectroscopia UV-vis y el método de Tauc se obtuvo el gap para transiciones directas e indirectas (figura 5 y tabla 1). En estas películas amorfas, el comportamiento dominante es el de transiciones indirectas con 1.33 eV para la película de Ni y 1.89 eV para la de Cu.

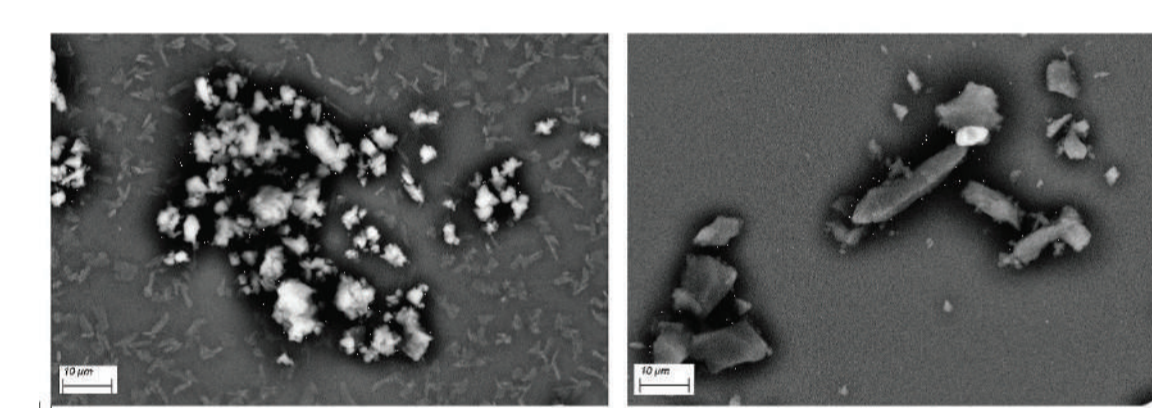


Figura 3. SEM de películas (A) (Ni TAAB) (L1) 2 y (B) (Cu TAAB) (L2) 2, a 1000x.

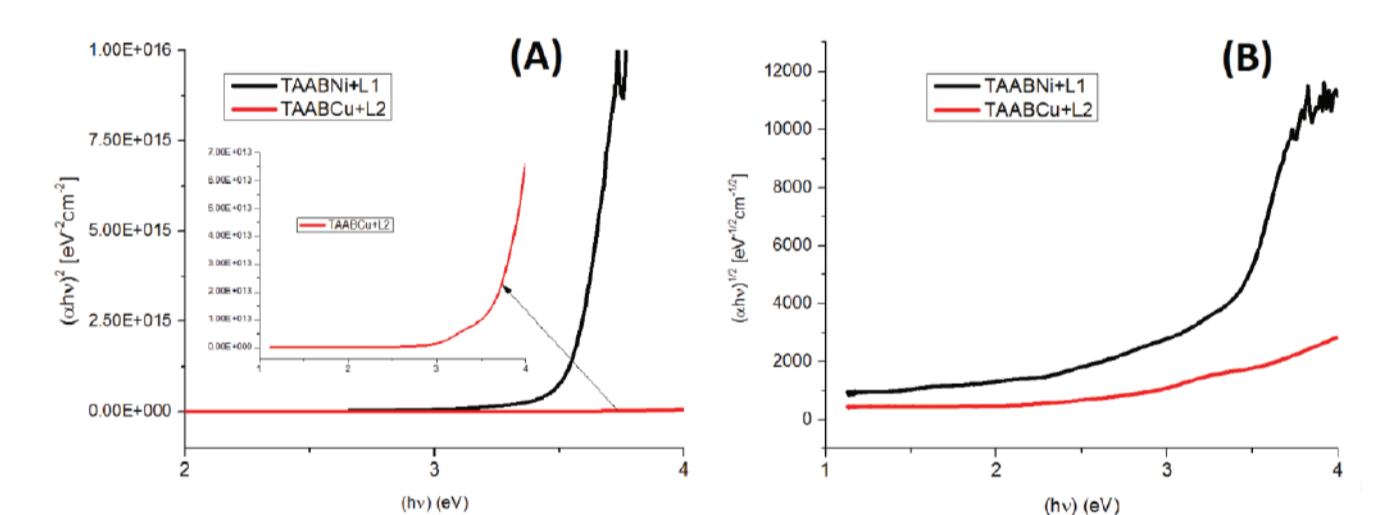


Figura 5. UV-Vis para películas (A) (Ni TAAB) (L1) 2 y (B) (Cu TAAB) (L2) 2.

Conclusiones

El gap de la película de cobre es más alto que la de níquel. Además, esta última tiene un mayor número de transiciones, lo que la hace más efectiva para el transporte de cargas eléctricas. La alta estabilidad química y capacidad para formar películas homogéneas hace del Ni[TAAB](ClO₄)₂ un candidato ideal como semiconductor.

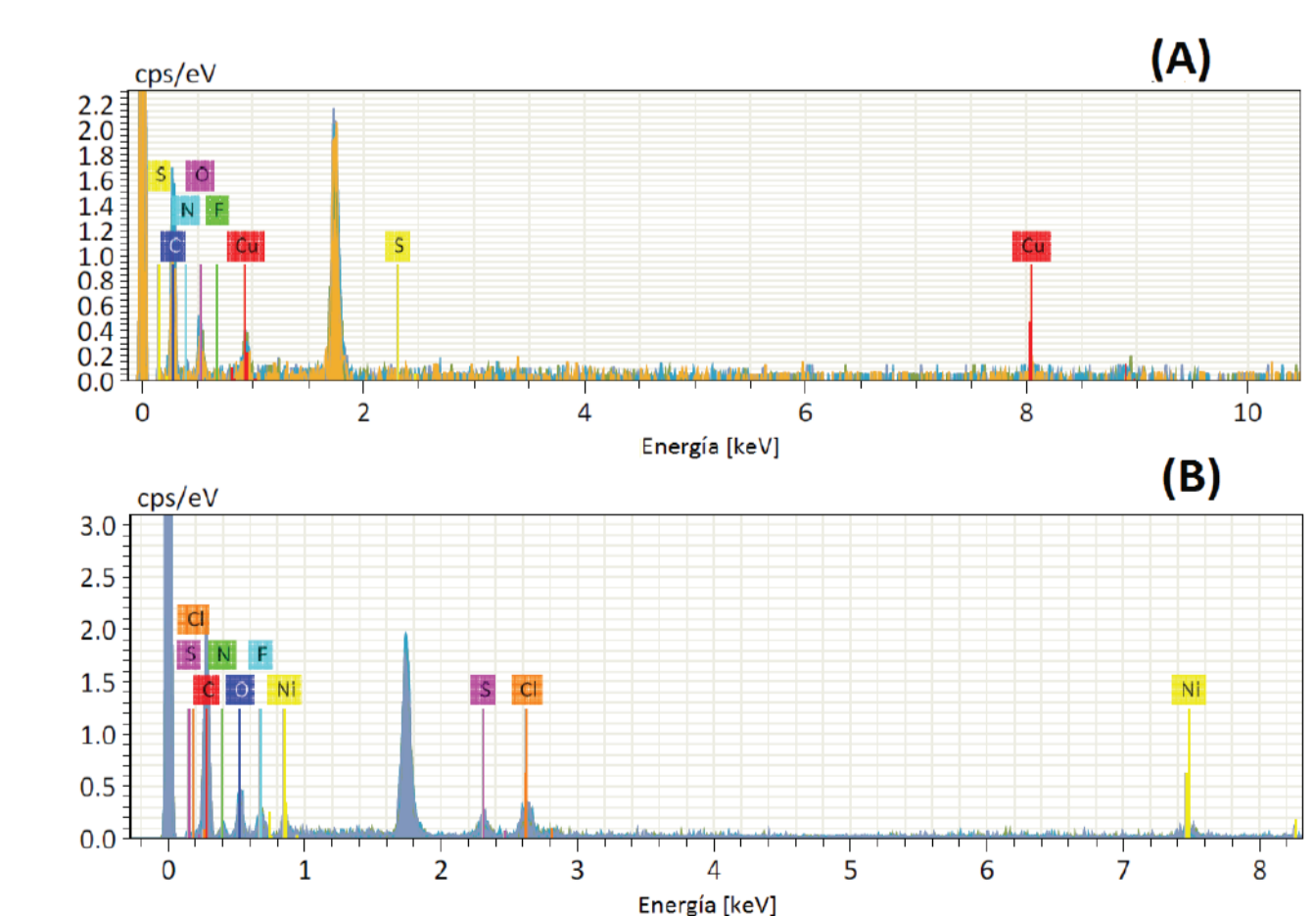


Figura 4. EDS de películas (A) (Ni TAAB) (L1) 2 y (B) (Cu TAAB) (L2) 2, a 1000x.

Referencias

- Diel BN, Inabe T, Jaggi NK, Lyding JW, Schneider O, Hanack M, Kannewurf CR, Marks TJ, Schwarz LH. Cofacial assembly of metallomacrocycles as an approach to controlling lattice architecture in low-dimensional molecular solids. Chemical, structural, oxidation-state, transport, and optical properties of the iron coordination polymer [Fe(phthalocyaninato)(μ -pyrazine)]_n and the consequences of halogen doping. *J. Am. Chem. Soc.* 1984;106:3207-3214.
- Sánchez-Vergara ME, Gómez-Lara J, Toscano RA, Hernández-Ortega S. Diaqua tetrabenzos (b,f,j,n) {1,5,9,13} tetraazaciclohexadecina copper(II) and nickel(II) bisanthraflavates: crystal and molecular structure. *J. Chem. Crystallogr.* 1998;28(11): 825-830.