

# Multifunctional Fischer Aminocarbene Complexes as Hole or Electron Transporting Layers in Organic Solar Cells.

Vidal-García, Pablo; Sánchez-Vergara, María Elena; Corona-Sánchez, Ricardo; Jiménez-Sandoval, Omar; Gutiérrez-Rivas Mercado, Efraín; Toscano, Rubén A.; Álvarez-Toledano, Cecilio.

## Resumen.

Una nueva serie de carbenos de Fischer ha sido sintetizada y examinada como capas transportadoras de huecos o de electrones (HTL o ETL) en la fabricación de celdas fotovoltaicas orgánicas (OSC). Se reporta la síntesis de tres complejos de aminocarbenos de Fischer con la fórmula general  $[\text{Cr}(\text{CO})_5\{\text{C}(\text{NHCH}_2)\text{Ar}\}]$  (Ar = 2-pyridyl (**3a**), 3-pyridyl (**3b**) y 4-pyridyl (**3c**)). La estructura molecular del complejo **3b** ha sido confirmada por análisis de rayos X. Para estudiar las posibles aplicaciones de los tres aminocarbenos de Fischer en las OSC, se prepararon capas delgadas de estos complejos usando un proceso de deposición al vacío. Estas películas organometálicas fueron caracterizadas química y morfológicamente por espectroscopía IR, MEB, microscopía de fuerza atómica y cristalografía de rayos X. De acuerdo con la IR y el análisis de Tauc, el proceso de deposición al

vacío genera capas delgadas libres de impurezas con una energía de activación de 4.0, 2.7 y 2.1 eV para **3a**, **3b** y **3c**, respectivamente. Los espectros UV-vis de las películas amorfas de aminocarbenos muestran que son prácticamente transparentes ante la radiación visible del espectro electromagnético. Esto se debe al hecho de que su absorción se localiza principalmente en el rango ultravioleta. Se manufacturaron dos OSC con configuración de heterounión de bloque para probar el uso de aminocarbenos como HTL o ETL. El aminocarbeno  $[\text{Cr}(\text{CO})_5\{\text{C}(\text{NHCH}_2) \text{4-pyridyl}\}]$  (**3c**) demostró ser adecuado como CTE con un factor de llenado (FF) de 0.23 y una densidad de corriente de cortocircuito (JSC) de 1.037 mA/cm<sup>2</sup>.

### **Abstract.**

A new series of Fischer carbenes have been synthesized and examined as hole-transporting or electron-transporting layers (HTLs or ETLs) in the fabrication of organic solar cells (OSCs). The synthesis of three Fischer aminocarbene complexes with the general formula  $[\text{Cr}(\text{CO})_5\{\text{C}(\text{NHCH}_2)\text{Ar}\}]$  (Ar = 2-pyridyl (**3a**), 3-pyridyl (**3b**) and 4-pyridyl (**3c**)) is reported. The molecular structure of complex **3b** has been confirmed by X-ray analysis. In order to study the possible applications of the three Fischer aminocarbenes in OSCs, thin films of these complexes were prepared using a vacuum deposition process. These organometallic films were chemically and morphologically characterized by IR spectroscopy, SEM, AFM and XRD. According to the IR and Tauc analysis, the vacuum deposition

process generates thin films free of impurities with an activation energy of 4.0, 2.7 and 2.1 eV for **3a**, **3b** y **3c**, respectively. The UV-vis spectra of the amorphous aminocarbene films show that they are practically transparent to the visible radiation of the electromagnetic spectrum. This is due to the fact that their absorption is located mainly in the ultraviolet range. Two OSCs with bulk-heterojunction configuration were manufactured in order to prove the use of the aminocarbenes as ETL o HTL. The aminocarbene [Cr(CO)<sub>5</sub>{C(NHCH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-pyridyl}] (**3c**) proved to be suitable as ETL with a fill factor (FF) of 0.23 and a short circuit current density (JSC) of 1.037 mA/cm<sup>2</sup>.

### **Bibliografía.**

Vidal, P., Sánchez, M., Corona, R., Jiménez, O., Gutiérrez, E., Toscano, R., & Álvarez, C. (2018). Multifunctional Fischer Aminocarbene Complexes as Hole or Electron Transporting Layers in Organic Solar Cells. *Molecules*, 23(4), 751. Disponible en <https://doi.org/10.3390/molecules23040751>.