

Desarrollo de poli(3-hexiltiofeno) regio-regular por arilación directa utilizando las condiciones de Fagnou

Itzel Argemi Cacique Espinoza¹, Marisol Güizado Rodríguez¹, Miriam Rangel Ayala¹, Victor Barba², José Maldonado Rivera³.

¹Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp-IICBA), Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM). Av. Universidad No. 1001, Col. Chamilpa, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

²Centro de Investigaciones Químicas (CIQ-IICBA), Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM). Av. Universidad No. 1001, Col. Chamilpa, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

³Centro de Investigaciones en Óptica, A.C. (CIO). Loma del Bosque # 115, Col. Lomas del Campestre, C.P. 37150, León Guanajuato, México.

email: itzel.caciqueesp@uaem.edu.mx, marisolguizado@uaem.mx

Palabras clave: P3HT regio-regular, polimerización por arilación directa, celdas solares orgánicas.

Introducción.

Los polímeros semiconductores se estudian ampliamente debido a sus aplicaciones en dispositivos fotovoltaicos, el polímero conjugado predominante utilizado en celdas solares orgánicas (OSCs) es el poli(3-hexiltiofeno) P3HT semicristalino, que se puede producir mediante métodos fáciles, de bajo costo y respetuosos con el medio ambiente como la polimerización por arilación directa (DArP) (N.S. Gobalasingham *et al.* 2018). Debido a su procesamiento en solución, deposición sobre diferentes tipos de sustratos, incluso flexibles, con tecnologías como *spin coating* y *roll to roll*, es una opción factible para la producción a gran escala. En este trabajo se presenta la síntesis, caracterización fisicoquímica de un P3HT regio-regular por el método de arilación directa usando las condiciones de Fagnou y su evaluación en la capa activa de OSCs con arquitectura de heterounión de volumen.

Metodología. El P3HT regio-regular se sintetizó por DArP (M. Rangel *et al.* 2020), utilizando como catalizador el Pd(OAc)₂, una base como el K₂CO₃, con un ácido carboxílico (ácido neodecanoico), un disolvente polar (DMA), en la Figura 1 se describen estas condiciones de reacción.

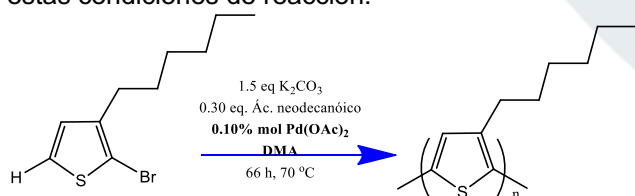


FIGURA 1. DArP, condiciones de Fagnou para P3HT.

Resultados. El polímero obtenido de la fracción cloroformo se analizó mediante RMN de ¹H, GPC, TGA, FT-IR, UV-vis, difracción de rayos X y voltamperometría cíclica. El método de síntesis DArP, evitó subproductos metalados y generó un P3HT de calidad (diadas HT 94%), obteniendo una temperatura de descomposición (T_d) de 481.8 °C, una longitud de absorbancia máxima (λ_{max}) de 453 nm.

Se fabricaron dispositivos fotovoltaicos con la arquitectura ITO / PEDOT: PSS / capa activa (P3HT: PC₇₁BM) / PFN / Field's metal. Se realizó un análisis morfológico a través de AFM de la película del poli(3-hexiltiofeno), la cual presentó una rugosidad de 1.4 nm y un espesor de 100 nm. Los dispositivos fueron evaluados a través de las curvas J-V con un simulador solar bajo una intensidad de luz de 100 mW / cm² (AM 1.5 G). La eficiencia de conversión de energía (PCE) alcanzada para la fracción cloroformo fue alrededor de 3 %.

Conclusiones. Las OSCs fabricadas con este P3HT presentaron una eficiencia similar a las reportadas por M. Rangel *et al.* Polymer 2020 y otros métodos de síntesis (N.S. Gobalasingham *et al.* 2018); lo anterior, abre la posibilidad de elaborar celdas a bajo costo con un polímero sintetizado con un método amigable con el ambiente.

Agradecimientos. Los autores agradecemos a CONACyT por la beca de maestría.

Bibliografía.

N.S. Gobalasingham, B.C. Thompson, Progress in Polymer Science 83 (2018) 135.
M. Rangel, M. Güizado-Rodríguez, J.L. Maldonado, R. Olayo-Valles, V. Barba, J.U. Reveles, Polymer 193 (2020) 1223.