


## Síntesis, simulación y propiedades ópticas de un resorcinareno portador de quinolinas Synthesis, simulation and optical properties of a resorcinarene bearing quinolines

D. Castro Monter <sup>a</sup>, V. Rodríguez Lugo <sup>a</sup>, M. I. Reyes-Valderrama <sup>a</sup>, I. Moggio <sup>b</sup>, E. Arias <sup>b</sup>,

R. A. Vázquez-García <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

<sup>b</sup> Centro de Investigación en Química Aplicada, Boulevard Enrique Reyna 140, Saltillo, Coah. México.

### Resumen

El diseño y síntesis de macromoléculas orgánicas conjugadas es de interés en el área de la optoelectrónica para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos, tales como celdas solares orgánicas, celdas solares tipo Perovskita, diodos electroluminiscentes orgánicos (OLEDs), transistores delgados de efecto de campo orgánicos, sensores, etc. En este trabajo se reporta la simulación molecular mediante la teoría de densidad de funcional (DFT) de un dendrímero de tipo resorcinareno con segmentos de quinolina y tiofeno en la periferia, designado como **D**. El dendrímero se sintetizó siguiendo el método convergente de acoplamiento del dendrón quinolínico al centro y fue caracterizado mediante espectroscopia de <sup>1</sup>H-RMN y FT-IR. El estudio de las propiedades ópticas se realizó mediante espectroscopia de UV vis y fluorescencia estática y dinámica, los resultados indican que el dendrímero presenta una emisión máxima a 574 nm que se ubica en la región amarilla del espectro electromagnético. El valor del band gap óptico experimental obtenido de los espectros UV-Vis, y teórico fue de 2.8 y 3.3 eV respectivamente lo que ubica a este material, dentro de los semiconductores orgánicos. Los valores teóricos de los niveles de energía de los orbitales frontera HOMO y LUMO de 5.52 y 2.18 eV son muy similares a los del poli(etilendioxitiofeno):poli(estirensulfonato) PEDOT:PSS; el material más comúnmente utilizado como capa transportadora de huecos (hole transport layer, HTL) lo cual sugiere la posible aplicación de **D** como HTL en la fabricación de una celda solar orgánica.

### Palabras Clave:

Dendrímero, celda solar, capa transportadora de huecos, simulación, caracterización.

### Abstract

The design and synthesis of conjugated organic macromolecules is interesting in the area of optoelectronics, for the fabrication of optoelectronic devices, such as organic solar cells, Perovskite-type solar cells, organic light emitting diodes (OLEDs), thin organic field-effect transistors, sensors, etc. In this work we report the molecular simulation by density functional theory (DFT) of a quinoline and thiophene bearing resorcinarene, designated as **D**. The dendrimer was synthesized following the convergent method of coupling of the quinoline dendrón to the centre and was characterized by <sup>1</sup>H-NMR and FT-IR spectroscopy. The study of the optical properties was performed by UV vis and static and dynamic fluorescence spectroscopy. Results indicate that the dendrimer presents a maximum emission at 574 nm, which is located in the yellow region of the electromagnetic spectrum. The value of the optical and theoretical band gap was 2.78 and 3.3 eV respectively, which places this material within the organic semiconductors. The theoretical values of the energy levels of the HOMO and LUMO frontier orbitals of 5.52 and 2.18 eV are very similar to those of poly(ethylendioxythiophene):poly(styrene sulfonate) PEDOT:PSS; the material most commonly used in the hole transport layer (HTL), which suggests the possible application of **D** as HTL in the fabrication of an organic solar cell.

### Keywords:

Dendrimer, solar cell, hole transport layer, simulation, characterization.

## 1. Introducción

La demanda energética mundial ha aumentado drásticamente en los últimos años especialmente en los países en desarrollo. La mayoría de los actuales tipos de producción de energía causan

problemas ambientales que reducen la calidad de vida y ponen en riesgo la salud humana. Aproximadamente el 80% del dióxido de carbono y dos tercios de las emisiones totales de gases de efecto invernadero (GEI) provienen de la generación y consumo de energía (Akbari, 2018); adicionalmente, los recursos fósiles

\*Autor para la correspondencia: rosavg@uaeh.edu.mx

Correo electrónico: montercd@gmail.com (Damaris Castro Monter), venturar@uaeh.edu.mx (Ventura Rodríguez Lugo), profe\_5490@uaeh.edu.mx (María Isabel Reyes Valderrama), ivana.moggio@cqa.edu.mx (Ivana Moggio), eduardo.arias@cqa.edu.mx (Eduardo Arias), rosavg@uaeh.edu.mx (Rosa Angeles Vázquez García).

disponibles en el mundo se están agotando. Asegurar el suministro de energía y reducir su huella climática, son los dos desafíos principales del sector energético en su camino hacia un futuro sustentable. En este sentido la energía solar representa un sector importante para su empleo como un recurso limpio. La tecnología de energía solar se puede agrupar en dos categorías: 1) la tecnología fotovoltaica (FV) y 2) la tecnología de energía solar térmica. En los últimos años, la tecnología fotovoltaica se ha convertido en una opción viable, el mercado fotovoltaico crece rápidamente, la tasa de crecimiento anual de instalación de celdas solares fue de 41% de 2000 a 2015 (F.I.F.S., 2016).

Las celdas solares orgánicas (OPV) se dividen en tres tipos: tipo molecular, tipo polímero orgánico y tipo híbrido (Deng, 2014). Una de las ventajas de estas tecnologías basadas en compuestos orgánicos es el uso de sustratos plásticos, ya sea naftalato de polietileno (PEN) o tereftalato de polietileno (PET), que brindan flexibilidad a los dispositivos y reducen los costos de producción.

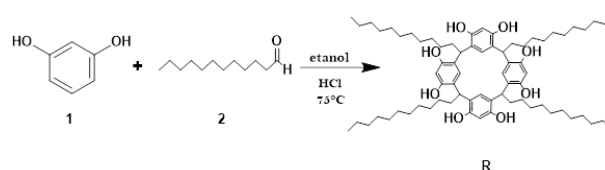
La configuración más utilizada en las celdas fotovoltaicas es la de heterounión en masa (BHJ), en las cuales la capa activa está conformada por una mezcla física de un material electrón donador, típicamente un polímero semiconductor y un material electrón aceptor, comúnmente un derivado del fullereno. Esta capa puede ser depositada directamente entre dos electrodos o bien, entre cada electrodo y a la capa activa se le pueden depositar capas transportadoras de huecos (hole transport layer, HTL) del lado del ánodo y capas transportadoras de electrones (electron transport layer, ETL) del lado del cátodo con la finalidad de mejorar el transporte de las diferentes cargas a los electrodos. El funcionamiento de una celda solar se basa en la propiedad fotoeléctrica de los materiales de la capa activa, es decir que cuando recibe radiación solar, en el material electrón donador se produce un estado excitado llamado excitón, que está formado por pares de huecos y electrones. Éste se separa en electrones y huecos en presencia del material electrón aceptor y las cargas se transportan a través de las capas HTL y ETL hacia los respectivos electrodos, generando una corriente (Agrawal, 2014).

La utilidad de las celdas solares se ve afectada en gran medida debido a su tiempo de vida y su eficiencia, en la actualidad hay prototipos tales como mochilas que incorporan esta clase de celdas y que solo sirven para proveer de energía a cargas pequeñas como celulares, pequeñas lámparas etcétera. El campo de investigación sobre celdas solares, ya sea orgánicas o híbridas va en aumento, es por ello que el objetivo del presente trabajo se centra en el diseño y síntesis de un semiconductor orgánico de tipo dendrímero que pueda ser empleado para la fabricación de celdas solares de bajo costo y con baja contaminación ambiental (M. E. Köse, 2010).

## 2. Metodología

Los resorcinarenos son productos obtenidos de la reacción de condensación entre aldehídos alifáticos y el resorcinol, en una relación 4:4; estudiados por Niederl y Vogel (P. Timmerman, 1996. ).

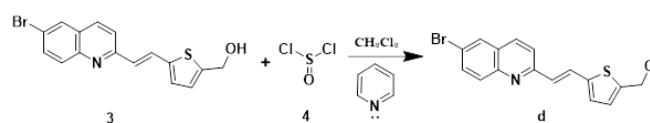
### 2.1. Síntesis de 2,8,14,20-tetradodecil[14]metaciclofan-4,6,10,12,16,18,22,24-octol (R).



**Figura 1. Ruta de síntesis de la molécula centro R.**

Se disolvieron 200 mg (1.816 mmol) de resorcinol (1) en 2.5 ml de etanol ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ) grado reactivo, en un matraz bola de dos bocas con agitación constante y atmósfera inerte durante 15 minutos. A continuación, se agregaron 0.40 ml (1.816 mmol) de dodecanal (2) y 1 ml de ácido clorhídrico (HCl) concentrado gota a gota (se observa un cambio de coloración). La mezcla de reacción se sometió a temperatura de reflujo ( $75^\circ\text{C}$ ) y agitación vigorosa durante 24 horas. Finalmente, se agregaron 5 ml de agua destilada para detener la reacción observando un precipitado, se filtró el precipitado realizando lavados con agua destilada. El producto se secó a vacío, se obtuvo un sólido color crema con un punto de fusión de  $290^\circ\text{C}$ . RMN  $^1\text{H}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm): 9.51 (m, 8H, OH), 7.22 (s, 4H, Ar), 6.12 (s, 4H, Ar), 4.31 (s, 4H, CH), 3.30 (s, 8H,  $\text{CH}_2$ ), 2.20 (s, 8H,  $\text{CH}_2$ ), 1.28 (s, 56H,  $\text{CH}_2$ ), 0.89 (s, 12H,  $\text{CH}_3$ ). FT-IR ( $\text{cm}^{-1}$ ): 3225, 2919, 2850, 1622, 1500, 1455, 1294, 1174, 1093, 839. UV-Vis (nm): 286.

### 2.2. Síntesis de dendrón (E)-6-bromo-2-(2-(5 (clorometil)tiofen-2-il)vinil)quinolina (d).



**Figura 2. Ruta de síntesis del dendrón (d).**

En un matraz bola de dos bocas, se agregaron 100 mg (0.288 mmol) de (E)-5-(2-(6-bromoquinolin-2-il)vinil) tiofen-2-il metanol (3) sometándolo a vacío durante 20 minutos. Con atmósfera inerte y agitación, se inyectaron 20 ml de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  previamente secado con pentóxido de fósforo. Se inyectaron 0.025 ml de piridina a la mezcla de reacción e inmediatamente se colocó en baño de hielo durante 30 minutos. Posteriormente, se inyectaron 0.03 ml de cloruro de tionilo ( $\text{SOCl}_2$ ) (4) esperando 20 minutos más antes de retirar el baño con hielo. La reacción se dejó en agitación constante y a temperatura ambiente durante 20 horas. Transcurrido este tiempo, se añadieron 2 ml de agua destilada fría. El producto de reacción se filtró y se lavó con agua destilada fría y se secó a vacío. Se obtuvo un sólido rojizo con un punto de fusión de  $130^\circ\text{C}$ . RMN  $^1\text{H}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm): 8.41 (d, 1H, Th), 8.20 (d, 1H, Qn), 8.11 (d, 1H, Qn), 7.97 (d, 1H,  $J=16\text{Hz}$ ), 7.70 (d, 1H, Qn), 7.39 (d, 1H, Qn), 7.12 (d, 1H, Th), 7.04 (d, 1H,  $J=16$ ), 6.95 (s, 1H, Qn), 4.79 (s, 2H,  $\text{CH}_2$ ). FT-IR ( $\text{cm}^{-1}$ ): 3301, 3054, 2799, 1656, 1441, 1214, 1053, 953, 805, 662, 483. UV-Vis (nm): 418.

### 2.3. Síntesis del Dendrímero (D).

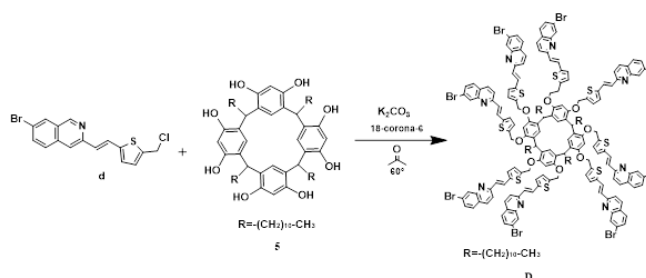


Figura 3. Ruta de síntesis del dendrímero (D).

Se colocaron 70 mg (0.20 mmol) de compuesto **d** y 20 mg (0.018 mmol) de compuesto **R** en un matraz bola con 10 ml de acetona grado reactivo, se puso en agitación constante hasta que los compuestos se disolvieran completamente. A continuación, se agregaron 133 mg (0.96 mmol) de  $K_2CO_3$  y una cantidad catalítica de éter corona, la mezcla de reacción se sometió a reflujo ( $60^\circ C$ ) y agitación constante durante 5 días. Finalmente, se enfrió y se evaporó el disolvente. El producto obtenido fue disuelto en dicloro metano y filtrado. La fase orgánica se precipitó en metanol, se centrifugó y secó a vacío. Se obtuvo un sólido naranja cobrizo con un punto de fusión de  $172^\circ C$ . RMN  $^1H$  (400 MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$  ppm): 8.02-6.85 (80H, protones aromáticos), 4.19 (20H, protones puentes), 1.87-0.80 (92H, protones alifáticos). FT-IR ( $cm^{-1}$ ): 3365-3165, 2920, 2860, 2616, 1608, 1378, 128, 1191, 1131, 968, 819, 698, 698, 488. UV-Vis (nm): 376.

### 2.4. Caracterización química.

La caracterización estructural de los compuestos sintetizados se realizó utilizando los espectrómetros de Resonancia Magnética Nuclear Bruker Ascend, Oxford Varian y Bruker Biospin, de 400 Hz, analizando el núcleo  $^1H$ . Las muestras fueron preparadas a temperatura ambiente usando, principalmente, Cloroformo Deuterado ( $CDCl_3$ ) como solvente y bajo atmósfera de nitrógeno. Además, se utilizó un espectrofotómetro de Infrarrojo con transformada de Fourier (FT-IR) Perkin Elmer Spectrum.

Para la caracterización óptica se utilizaron los espectrofotómetros de Ultravioleta Visible Agilent 8453 con software Agilent ChemStation y Perkin Elmer Lambda XLS. El band gap óptico  $E_{g,opt}$  se determinó de la intercepta del eje X (energía en eV) con la tangente a la curva espectral de absorción normalizada, en el punto de absorbancia 0.1. El espectrofluorómetro Horiba PTI QuantaMaster QM-8450-22-c fue empleado para obtener los espectros de emisión. El rendimiento cuántico se obtuvo por método indirecto, utilizando sulfato de quinina en  $H_2SO_4$  0.1 M ( $\lambda_{exc} = 310$  nm,  $\phi = 0.54$ ), como estándar. Las coordenadas CIE1931 se calcularon a partir de los espectros de emisión con el programa libre GoCIE. El equipo de tiempo de vida Horiba Temprow TCSPC (Time Correlated Single Photon Counting) se utilizó para obtener los tiempos de vida a partir del fit de las curvas de decaimiento, usando Ludox (Aldrich) para la señal del láser. Se excitó con un nano LED cercano a la longitud de onda de excitación de la muestra (ver sección de resultados). Para llevar a cabo los estudios teóricos se utilizó el software Gaussian 09 aplicando el funcional híbrido B3LYP y el conjunto base 6-31 g(d).

## 3. Análisis y discusión de resultados

### 3.1. Síntesis de Dendrímero D.

El dendrímero **D** se obtuvo por una reacción de eterificación entre el resorcinareno **R** como parte central y el dendrón **d** cuyas estructuras son descritas en la sección experimental. El compuesto fue aislado como un polvo anaranjado en un 80% de rendimiento.

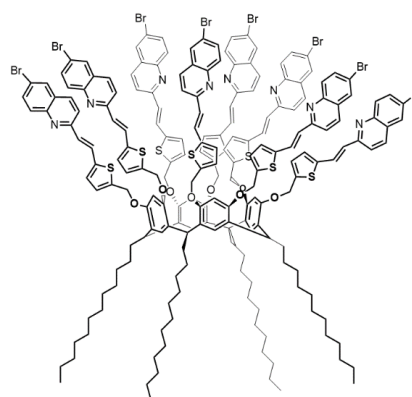


Figura 4. Estructura del dendrímero D.

### 3.2. Caracterización química.

En el espectro de RMM  $^1H$  del dendrímero **D** (Figura 5) se observan en el intervalo de 8.02 a 6.84 ppm las señales de los protones aromáticos provenientes de los grupos del resorcinol, tiofeno, quinolina y los protones vinílicos. La señal de los protones correspondientes a los metilenos puente entre el dendrón y el resorcinareno se muestra a 4.16 ppm, mientras que el protón metino puente se muestra a 3.55 ppm. Finalmente, las señales de los protones de las cadenas alifáticas se observan en el intervalo de 2.10 ppm a 0.92 ppm.

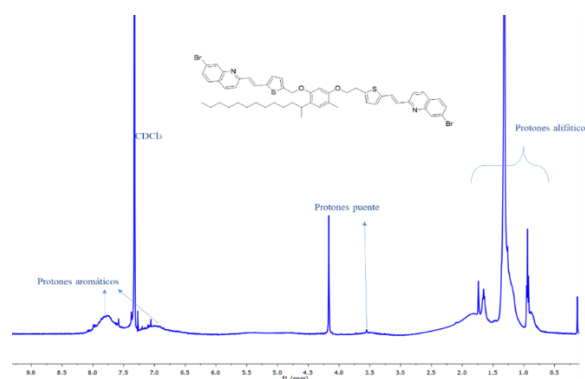
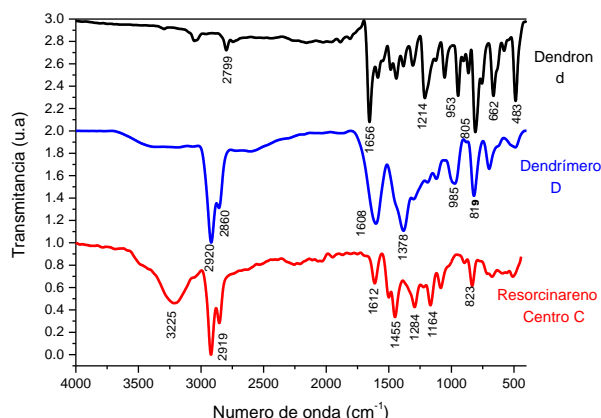


Figura 5. Espectro de RMN  $^1H$  del dendrímero D.

En la Figura 6 se muestra el espectro de infrarrojo de los compuestos iniciales resorcinareno (molécula centro) y dendrón, así como el espectro de infrarrojo del dendrímero **D**. La formación del dendrímero se corrobora por la desaparición de la banda correspondiente a los modos de vibración longitudinal del hidroxilo ( $3225$   $cm^{-1}$ ) presentes en el espectro del resorcinareno, y la aparición de una banda ancha correspondientes a las vibraciones longitudinales C-O-C ( $1378$   $cm^{-1}$ ) que nos indican que la eterificación se llevó a cabo. Finalmente, ya no se observan en

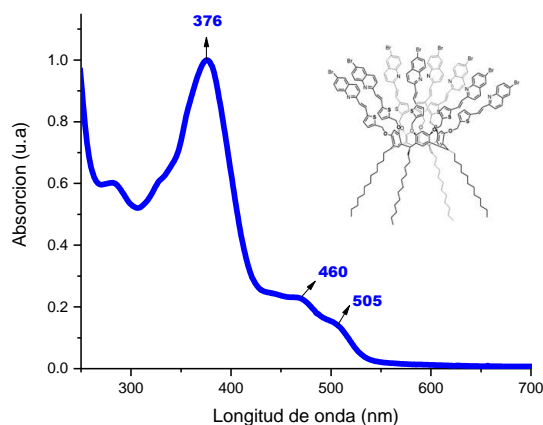
el espectro del dendrímoro los modos de vibración del enlace C-Cl ( $483\text{ cm}^{-1}$ ) presente en el espectro correspondiente al dendrón, lo cual confirma la unión de esta molécula al centro **R**.



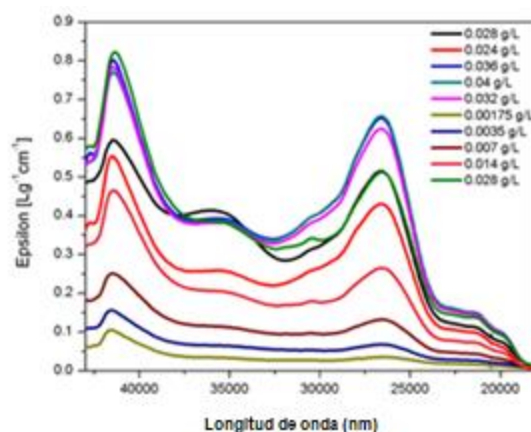
**Figura 6.** Espectros FT-IR correspondientes al dendrón **d** (arriba), dendrímoro **D** (centro) y resorcinareno **R** (abajo)

### 3.3. Caracterización óptica.

El espectro UV-Visible del dendrímoro **D** (Figura 7) muestra un amplio rango de absorción (250 nm a 550 nm) presentando su absorción máxima ( $\lambda_{\text{abs}}$ ) a 376 nm y hombros a 460 y 505 nm que son debidos a transiciones  $\pi-\pi^*$  de los dendrones conjugados y persisten a diferentes diluciones (Figura 8). Al observar las propiedades ópticas del dendrímoro **D** y comparadas con su dendrón **d** (Tabla 1) vemos que el **d** tiene mejores propiedades de absorción para la posible aplicación en celdas solares, ya que presenta un máximo de absorción más desplazado al rojo ( $\lambda_{\text{abs}} = 418\text{ nm}$ ), más cercano al máximo de emisión solar ( $\sim 490\text{ nm}$ ), mayor coeficiente de extinción molar  $\epsilon$  y menor band gap óptico ( $E_{\text{gopt}}$ ), es decir es más conductor. Esto se puede explicar por el hecho que el dendrón es una molécula pequeña, lineal y conjugada, lo que facilita la deslocalización electrónica, mientras que, en el dendrímoro, el centro resorcinarénico no es conjugado; la deslocalización corresponde nuevamente al dendrón pero la conformación del dendrón es posiblemente diferente, por la funcionalización con el resorcinareno, a la del dendrón de partida (rotámoro). El hecho que el valor de  $\epsilon$  en **D** sea menor al de **d**, a pesar de tener 4 unidades tipo **d**, en efecto sugiere que cada dendrón no es electrónicamente igual y que no hay comunicación electrónica entre ellos, lo cual es en cierta medida, corroborado por los cálculos (ver más adelante). Es posible que la conformación y por ende el momento dipolar de transición electrónica de cada dendrón sea diferente, por rotación alrededor del doble enlace vinílico y del protón metino del resorcinareno, dando bandas a diferente longitud de onda y con diferente  $\epsilon$ , aunque no se descartan interacciones intermoleculares. Para lo que se requeriría realizar estudios espectroscópicos a diferente temperatura y solvente para corroborar esta explicación.

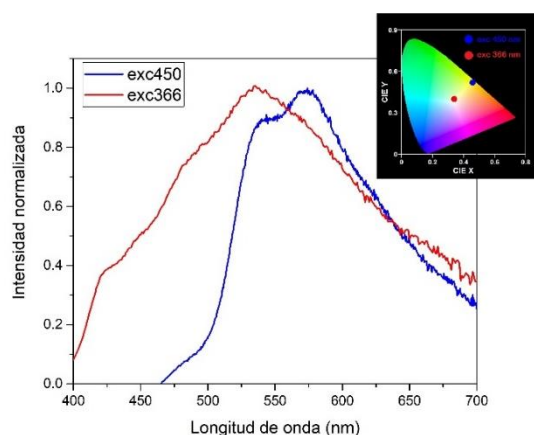


**Figura 7.** Espectro UVvis del dendrímoro **D** en cloroformo grado espectroscópico



**Figura 8.** Espectro UVvis del dendrímoro **D** en función de su absorptividad molar a diferentes concentraciones en cloroformo grado espectroscópico.

Los estudios de fluorescencia del dendrímoro **D** se realizaron a dos longitudes de onda de excitación, una a 366 y otra a 450 nm. Según la regla de Kasha, el espectro de emisión para un compuesto es independiente de la longitud de onda de excitación, debido a que éste refleja la distribución electrónica en el estado excitado (Albani, 2007). El dendrímoro **D**, muestra un espectro de emisión diferente en cada longitud de onda de excitación como se observa en la Figura 9, por ejemplo, hay una emisión máxima a 534 nm por excitación a 366 nm y una emisión máxima a 574 nm con un hombro a 543 nm cuando se excita a 450 nm. El hecho que se presenten emisiones a diferente longitud de onda y que corresponden a diferentes valores de rendimiento cuántico  $\phi$  podría ser congruente con el hecho que los dendrones no son electrónicamente equivalentes. De forma interesante, mientras que la luz emitida bajo excitación de 450 nm es en la región del amarillo con coordenadas CIE1931 (0.46; 0.52), las coordenadas de la emisión con excitación a 366 nm fueron (0.34; 0.40) (Figura 9, insertada), lo cual es muy cercano a las coordenadas (0.33; 0.33) correspondiente a la luz blanca.



**Figura 9.** Espectros de emisión de **D** a dos diferentes longitudes de onda de excitación (366 y 450 nm); unidades normalizadas. Insertado: curva de coordenadas de color CIE1931 con los valores correspondientes a las dos emisiones.

Tabla 1. Propiedades ópticas del dendrímoro **D** en cloroformo grado espectroscópico calculadas mediante espectroscopía UVvis y Fluorescencia.

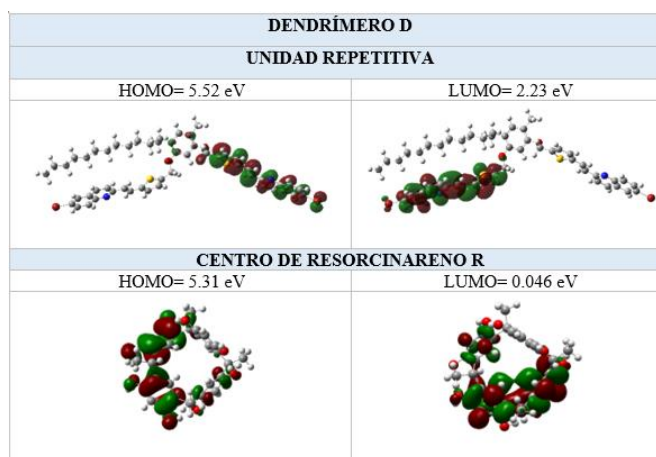
Compuesto	$\lambda_{\text{abs}}$ [nm]	$E_{\text{g óptico}}$ [eV]	$\lambda_{\text{em}}$ [nm]	$\Delta\nu$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	$\Phi$ [%]	$\tau$ [ns]
Resorcinareno <b>R</b>	286	4.05	-	-	-	-
Dendron <b>d</b>	418	2.52	505 <sub>(408)</sub>	4121	0.6	0.29
Dendrímoro <b>D</b>	376	2.78	534 <sub>(366)</sub> 574 <sub>(450)</sub>	7658 2860	3.1 8.3	1.67 1.18

El dendrón **d**, presenta un máximo de emisión de 505 nm con una  $\lambda_{\text{exc}} = 408$  nm, tiene un rendimiento cuántico muy bajo, igual a 0.6%; lo que indica que la mayoría de la energía absorbida se disipa en conversiones internas y otros procesos no radiativos que podrían incluir la transferencia de carga, ya que el dendrón presenta una estructura donador (tiofeno)-aceptor (quinolina-vinilideno) lo que sería bueno para su aplicación en celdas solares, sin embargo, se tendría que realizar más estudios, como son estudios espectroscópicos en solventes con diferente constante dieléctrica y estudios electroquímicos para calcular la energía libre de Gibbs, mientras que para el dendrímoro **D** debido a que es una macromolécula ramificada, existen interacciones electrónicas intermoleculares que se vuelven más probables con una excitación más energética y que resultan en mayores pérdidas de energía por procesos no radiativos (Valeur, 2002). Cuando se excita a 366 nm, la pérdida de energía por conversiones internas es grande, como se muestra en el desplazamiento de Stokes  $\Delta\nu$ , que tiene un valor de  $7658 \text{ cm}^{-1}$ ; se puede suponer que, con alta energía de excitación, los electrones saltan a niveles mayores al S1, probablemente a niveles dentro del S2, perdiendo energía por procesos internos de relajación, mientras que la pérdida de energía por procesos no radiativos es menor cuando se excita a 450 nm, el rendimiento cuántico se incrementa, sin embargo sigue siendo un rendimiento bajo en comparación a otros fluoróforos de tipo quinolina-vinilideno. El tiempo de vida de 1.18 ns se encuentra en el rango otros fluoróforos a base de quinolina (Reyes Flores-Noria, 2014).

### 3.4. Estudios teóricos mediante DFT.

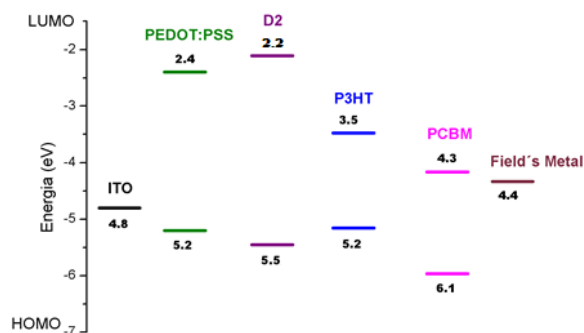
La simulación computacional de un dendrímoro requiere de recursos computacionales especiales debido a que se trata de una macromolécula con muchas interacciones electrónicas y rotamerismo. Sin embargo, es posible darse una idea de su comportamiento analizando únicamente el dendrón. Para una mejor comprensión del comportamiento del dendrímoro, también se realizó el estudio del centro de resorcinareno **R**. En ambas moléculas, se eliminaron las cadenas alifáticas ya que no tienen una influencia importante en los cálculos. En la Tabla 2 se muestran las imágenes de la distribución electrónica obtenidas. Las imágenes indican que dentro del dendrímoro la distribución electrónica cambia con el tiempo de dendrón a dendrón, es decir, en un momento el HOMO puede estar presente en un dendrón y al siguiente momento se presenta en donde antes estaba el LUMO. Lo mismo pasa con el centro debido a que son moléculas simétricas. Para el resorcinareno **R** se obtuvo un HOMO= 5.31 eV y un LUMO= 0.046 eV, dando un band gap teórico ( $E_{\text{gte}} = \text{HOMO-LUMO}$ ) igual a 5.26 eV. Este valor pone al resorcinareno dentro del grupo de los materiales aislantes. El band gap óptico ( $E_{\text{g opt}}$ ) calculado para el resorcinareno a partir de su espectro de absorción es menor al teórico, sin embargo, se sigue considerando como un aislante. Para el **D**, los valores obtenidos fueron: HOMO = 5.52 eV y LUMO = 2.23 eV, dando un  $E_{\text{gte}} = 3.29$  eV. El  $E_{\text{g opt}}$  es menor, 2.78 eV, se puede considerar como un material semiconductor.

Tabla 2. Imágenes de la distribución electrónica en los orbitales moleculares HOMO y LUMO del dendrímoro **D** y su centro **R**.



### 3.5. Diagrama de Energía en una celda solar teórica con configuración ITO/ PEDOT:PSS/D/P3HT/PCBM/Field's metal.

Con los valores teóricos obtenidos de HOMO – LUMO para el dendrímero **D** se construyó el diagrama de energía de la Figura 10.



**Figura 10. Diagrama de energías de la celda ITO/ PEDOT:PSS/D/P3HT/PCBM/Field's metal.**

Considerando los niveles electrónicos del **D**, podría decirse que funciona más como una HTL (hole transport layer), pudiéndose utilizar en lugar del PEDOT:PSS en la celda (Zhou & Sijiong Mei, 2020). Sin embargo, la capacidad de transportar huecos o electrones, será estudiada en trabajos posteriores.

## 4. Conclusiones

Se sintetizó un dendrímero (**D**) fluorescente a partir de un resorcinareno y un dendrón conjugado de tipo quinolina-vinilideno. La funcionalización fue corroborada por espectroscopia RMN y FT-IR. El dendrímero presenta absorción máxima  $\lambda_{\text{abs}} = 376$  nm y hombros a 440, 460 y 505 nm, los cuales probablemente se deban a que cada dendrón presenta una diferente conformación y/o por interacciones intermoleculares entre los dendrones. El dendrímero **D** presenta emisión a 534 nm cuando se excita a 366 nm y una emisión máxima a 574 nm cuando se excita a 450 nm, obteniéndose un rendimiento cuántico mayor y un tiempo de vida mayor que el del dendrón respectivo. Los valores HOMO-LUMO teóricos indican que este material podría funcionar como capa transportadora de huecos HTL, pudiendo suplir al PEDOT:PSS empleado en celdas solares convencionales.

## Agradecimientos

Se agradece al CONACyT, por el apoyo económico a través de la beca No. 603772. Maestría en Ciencias de los Materiales del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.

## Referencias

- Agrawal, V. K. (2014). Organic solar cells: principles, mechanism and recent developments. *International Journal of Research in Engineering and Technology*, 338-341.
- Akbari, A. S. (2018). Potential of solar energy in developing countries for reducing energy-related emissions. *Renewable and sustainable energy reviews*, 275-291. DOI:10.1016/j.rser.2018.03.065
- Albani, J. R. (2007). *Principles and Applications of Fluorescence Spectroscopy*. France: Blackwell publishing.
- Deng, H. H. (2014). *Introduction to organic solar cells de Organic and hybrid solar cells*. Switzerland,: Springer.
- F.I.F.S. (2016). *Energy photovoltaics report*. Germany: PSE AG.
- M. E. Köse, H. L. (2010). Charge Transport Simulations in Conjugated Dendrimers. *J. Phys. Chem*, 4388-4393. DOI:10.1021/jp911051u
- P. Timmerman, W. V. (1996. ). Resorcinarenes. *Tetrahedron*, 2663-2704. DOI: 10.1016/0040-4020(95)00984-1
- Reyes Flores-Noria, R. V. (2014). Synthesis and optoelectronic properties of phenylenevinylenequinoline macromolecules. *New J. Chem*, 974-984. DOI: 10.1039/c3nj01193c
- Valeur, B. (2002). *Molecular Fluorescence Principles and Applications*. Germany: WILEY-VCH.
- Zhou, Y., & Sijiong Mei, J. F. (2020). Effects of PEDOT:PSS:GO composite hole transport layer on the luminescence of perovskite light-emitting diodes. *RSC Adv.*, 26381-26387. DOI: 10.1039/d0ra04425c