



EL EFECTO DE AZOMETINA EN EL PUENTE π SOBRE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS Y ELECTRÓNICAS DE SENSIBILIZADORES EN CELDAS SOLARES

Tomás Delgado¹, Rody Soto¹, Daniel Glossman^{2,3}, José Castorena¹, Jesús Baldenebro¹
¹Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa; México ²Departamento de Química, Universitat de les Illes Balears; España ³Centro de Investigación en Materiales Avanzados; México
e-mail: tomas.delgado@uas.edu.mx

Los sensibilizadores orgánicos libres de metal para celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC) han alcanzado eficiencias superiores a los derivados de Ru, de hasta 12.8% utilizando colorantes tipo donador-puente π -aceptor (D- π -A) basados en trifenilamina [1] y hasta 14% en co-sensibilización [2], utilizando en ambos casos grupos derivados de tiofeno en el puente π . Por otro lado, se ha reportado la inclusión de grupos aceptores CN entre el donador y el puente π teniendo colorantes del tipo D-A- π -A [3], obteniendo resultados interesantes, en un caso decayendo la eficiencia y en otro incrementándola. Con motivación en lo anterior, se ha llevado a cabo el estudio del efecto en el puente π sobre las propiedades ópticas y electrónicas. En este sentido, surge la propuesta de seis nuevas moléculas basadas en trifenilamina como donador y ácido acrílico como aceptor, y el puente π conformado por la conjugación de grupos tiofeno y fenilo incluyendo el grupo aceptor izometina ubicado en diversas posiciones. Estos colorantes fueron etiquetados como TAZOM e identificados del 1 al 6. Haciendo uso de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) y el software Gaussian 09, se realizó la optimización de la geometría, los niveles de energía y la densidad del orbital molecular más alto ocupado (HOMO) y el orbital molecular más bajo desocupado (LUMO), con los funcionales, M06, PBE0 y el conjunto base 6-31G(d) y la longitud de onda de máxima absorción con los funcionales M06-2X, CAM-B3LYP y el conjunto base 6-31G(d). Además algunos parámetros de reactividad química vía la DFT conceptual fueron evaluados. Todos estos cálculos fueron analizados tomando en cuenta la potencial aplicación de los sistemas propuestos como fotosensibilizadores en DSSC, los cuales sugieren moléculas colorantes de alta eficiencia.

Referencias:

- (1) Zhang, M.; Wang, Y.; Xu, M.; Ma, W.; Li, R.; Wang, P. *Energy Environ. Sci.* **2013**, 6 (10), 2944-2949.
- (2) Kakiage, K.; Aoyama, Y.; Yano, T.; Oya, K.; Fujisawa, J.-I.; Hanaya, M. *Chem. Commun.* **2015**, 51(88), 15894–15897.
- (3) Wang, Z.-S.; Cui, Y.; Dan-oh, Y.; Kasada, C.; Shinpo, A.; Hara, K. *J. Phys. Chem. C* **2008**, 112, 17011–17017.