

Efecto del método de síntesis del poli(3-hexiltiofeno) en sus propiedades fisicoquímicas

El interés en el área de materiales poliméricos semiconductores, tanto industrial como académica, se ha intensificado como una consecuencia del amplio rango de aplicaciones (diodos emisores de luz, celdas solares, transistores de efecto de campo orgánicos, dispositivos electrocrómicos, antiestáticos, etc.). Adicionalmente, en los pasados pocos años, el uso de irradiación de microondas en ciencia de polímeros ha llegado a ser una técnica bien establecida para conducir y promover las reacciones químicas. El calentamiento por microondas permite que la energía se transfiera directamente a los reactivos y solventes. Por otro lado el funcionamiento de las celdas solares requiere de materiales más conductivos para su mejor funcionamiento, una de las alternativas para mejorar la conducción de un polímero es incrementar la configuración cabeza-cola (HT).

El objetivo general del trabajo de investigación es sintetizar poli(3-hexiltiofeno) con propiedades adecuadas para diversas aplicaciones como dispositivos fotovoltaicos, dispositivos electrocrómicos y sensores ópticos. Se reporta la síntesis de poli(3-hexiltiofeno) por oxidación directa del monómero respectivo con cloruro férrico como oxidante; en la síntesis tradicional y síntesis asistida por microondas. Así mismo se reporta la síntesis del P3HT regioregular sintetizado por metátesis de Grignard. En la síntesis asistida por microondas se varió el tiempo de reacción a 0.5, 1 y 2 hrs., el tiempo óptimo fue de 1 hora, así mismo se emplearon 2 solventes en la síntesis (cloroformo y diclorometano). Una vez obtenidos los polímeros se formaron películas poliméricas por la técnica spin-coating. Las películas poliméricas se doparon con una solución de cloruro férrico 0.3M durante 30 segundos de inmersión. Se determinaron los rendimientos y la caracterización fisicoquímica de los polímeros obtenidos por HPLC (cromatografía líquida de alta resolución) para la determinación de los pesos moleculares y polidispersidad; NMR (Resonancia magnética nuclear) para la determinación del porcentaje de diadas y triadas; FTIR (Espectroscopía infrarroja) para la determinación de la estructura molecular; los cambios en la topografía superficial se determinaron por AFM (microscopía de fuerza atómica), las imágenes de AFM revelaron que la morfología superficial depende del método de síntesis, tiempo de reacción y solvente usado. Las muestras fueron caracterizadas por TGA (análisis termogravimétrico), caracterización electroquímica para la determinación de los potenciales de oxidación y reducción así como los cambios de color con el potencial aplicado y UV-Vis (espectroscopía ultravioleta visible). Los resultados obtenidos se comparan para los métodos de reacción empleados.

Se concluye que comparando con el método tradicional (sin microondas), la síntesis asistida por microondas provee considerable decremento en el tiempo de reacción, peso molecular y polidispersidad más bajas, se emplea menos volumen de solvente para la síntesis y se mejoró el rendimiento. Los resultados confirmaron la versatilidad del procedimiento por microondas, el cual produjo materiales poliméricos en una hora y no tiene efectos adversos sobre la calidad de los polímeros.

Se logró obtener el polímero regioregular con una configuración de diadas HT del 95 % aproximadamente. En comparación con el polímero no regioregular se observó que los potenciales de oxidación y reducción se incrementaron en el polímero regioregular, además de presentar coloración diferente en el estado reducido y su polidispersidad fue grandemente reducida. Se observó el efecto de la regioregularidad en los espectros FTIR y UV-Vis.