



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Estudio fotofísico de derivados de
BODIPYs con aplicación en celdas solares
orgánicas. Una alternativa de energía
renovable en instalaciones petroleras**

TESIS

Que para obtener el título de
Ingeniero Petrolero

P R E S E N T A

Fortino Rojas Torreblanca

DIRECTORA DE TESIS

Dra. María del Pilar Carreón Castro



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2019



“Los sueños de los grandes soñadores no solo llegan a cumplirse, siempre son superados”

- A. P. J. Abdul Kalam

Dedicado con todo cariño:

A mi padre Valeriano Rojas,
a mi madre Rosario Torreblanca y
a mis hermanas Ma. del Rosario y Elisa.



AGRADECIMIENTOS


*“El éxito es 1% de inspiración
y 99% de transpiración”*

- Thomas A. Edison

Agradezco de una manera muy especial a la **Dra. María del Pilar Carreón** por aceptarme para realizar mi trabajo de tesis de licenciatura bajo su dirección e incorporarme a su excelente grupo de trabajo en el **Instituto de Ciencias Nucleares**; su apoyo, disponibilidad, conocimientos y sobre todo paciencia han sido un aporte invaluable. Asimismo, agradezco grandemente al **Dr. Rafael Arcos**, por su importante aporte, disponibilidad, apoyo, explicaciones e instrucciones en laboratorio para el desarrollo de la tesis, su participación ha enriquecido el trabajo realizado y también mi formación profesional. A la **M. en C. Montserrat Miranda** por haber participado con sus consejos y ayuda en la realización de la tesis. En general a todo el grupo de investigación del laboratorio de Nanopelículas, gracias por su apoyo. Y finalmente al proyecto DGAPA-UNAM (PAPIIT IN-206018).

A mi alma máter, la **Universidad Nacional Autónoma de México** y la **Facultad de Ingeniería**, por brindarme conocimientos y valores para mi crecimiento personal y profesional durante estos años.

También me gustaría agradecer a mi **familia** de todo corazón, pero para ellos mi corazón no tiene fondo. A mis padres, por su apoyo incondicional, enseñanzas, consejos, motivación y esfuerzos para permitirme cumplir mis sueños; yo sé que disfrutaban mucho de este logro al igual que yo. Mis hermanas, les agradezco todo su apoyo y estar en los momentos más importantes de mi vida, soy muy afortunado de tener hermanas como ustedes. Este logro también es de ustedes.



A **Isaac Melo** y **Víctor Vargas**, aunque estén lejos, nunca olvidare que somos amigos y que estamos unidos por muchas aventuras, ratos de felicidad y desafíos que supimos vencer juntos. Les agradezco por siempre tener una palabra de aliento, por siempre tender una mano y por tener una sonrisa para mí cuando más lo necesitaba. Gracias por su amistad.

Y finalmente, agradezco a mis amigos **Enrique, Itaty, Rafael, Rosalinda** y demás por todo el apoyo, consejos y amistad que me brindaron durante mi estadía en la facultad. Gracias por volver esta una experiencia increíble.

RESUMEN

En la actualidad, la mayor parte de la energía eléctrica se obtiene a través del consumo de combustibles fósiles, lo cual tiene el inconveniente de ser una fuente de energía no renovable, además de que su producción conlleva un alto impacto ambiental. Por lo anterior, el desarrollo y aprovechamiento de fuentes renovables para la producción de energía ha surgido como una alternativa prometedora para sustituir el uso de combustibles fósiles. Particularmente, el uso de energía solar a través de celdas solares ha resultado eficiente y amigable con el medio ambiente; por lo que el desarrollo de dispositivos capaces de llevar a cabo dicha transformación ha aumentado de manera exponencial durante las últimas cuatro décadas.


En años recientes, diversos colorantes orgánicos han sido utilizados como sensibilizadores de celdas solares; debido a sus buenos porcentajes de conversión y eficiencia, aunado al hecho de su bajo costo, las celdas solares sensibilizadas por colorantes (CSSC) han surgido como alternativas promisorias de las celdas solares convencionales hechas a base de silicio.

En el presente trabajo, se realizó un estudio foto-físico de dos derivados de BODIPYs con el objetivo de evaluar sus propiedades ópticas; con los resultados anteriores se realizó además un estudio comparativo con compuestos comerciales utilizados en celdas solares comerciales. Finalmente, se evaluó la viabilidad de estos derivados de BODIPYs para ser utilizados como colorantes en celdas CSSC.



CONTENIDO

RESUMEN.....	v
ÍNDICE DE FIGURAS	ix
ÍNDICE DE TABLAS.....	x
GLOSARIO	xi
INTRODUCCIÓN.....	1
CAPÍTULO 1. OBJETIVOS	3
1.1 Objetivo General	3
1.2 Objetivos Específicos	3
CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES	5
2.1. Energías renovables.....	5
2.1.1 Energía solar	5
2.1.2 Energía eólica	8
2.1.3 Energía geotérmica	9
2.1.4 Energía hidráulica.....	10
2.1.5 Energía marina.....	11
2.1.6 Biomasa	12
2.2 Estado del arte de energía solar.....	14
2.2.1 Efecto fotovoltaico	14
2.3 Dispositivos fotovoltaicos.....	19
2.3.1 Celdas solares inorgánicas	20
2.3.2 Celdas solares orgánicas	22
2.3.3 Celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC: <i>dye-sensitized solar cell</i>)	23
2.4 Dipirrometenos de Boro (BODIPYs).....	29
CAPÍTULO 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL	33
3.1 Equipo, materiales y reactivos	33
3.2 Generalidades	33
3.3 Estudio Solvatocrómico.....	34
3.4 Calculo de la energía (E)	35
3.5 Coeficiente de extinción molar (ϵ)	36
3.6 Preparación de disoluciones.	38
3.6 Espectroscopia UV-Visible	39



CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	41
4.1 Estudio Solvatocrómico.....	41
4.2 Energía de la banda prohibida y coeficiente de extinción molar	45
4.3 Discusión.....	47
CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS.....	51
REFERENCIAS	53
ANEXO	55

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura	Pie de figura	Página
2.1	Esquema de la conversión fototérmica.....	6
2.2	Esquema del efecto fotovoltaico.....	7
2.3	Mapa de los países que se encuentran en el cinturón solar.....	7
2.4	Aeromotor (molino de viento).....	8
2.5	Aerogenerador.....	8
2.6	Esquema de una central hidroeléctrica.....	10
2.7	Esquema de los fenómenos ópticos: reflexión, transmisión y absorción de la luz en un objeto sólido.....	15
2.8	Diagrama de energía de un semiconductor: (a) en la oscuridad e (b) iluminado.....	17
2.9	Representación esquemática de la unión p-n.....	18
2.10	Esquema en sección de las partes de una celda solar.....	19
2.11	Estructura de un semiconductor.....	20
2.12	Representación esquemática del dopaje de un semiconductor: (a) Silicio puro (intrínseco), (b) Silicio tipo n y (c) Silicio tipo p.....	21
2.13	Esquema del funcionamiento de una celda solar.....	23
2.14	Esquema de una celda solar sensibilizada con colorante.....	25
3.1	Formulas estructurales de los compuestos BODIPYs.....	34
3.2	Reflejos del solvatocromismo, cambio de color por disolvente (parte superior) y diferencias en forma, posición de bandas en el espectro de absorción (parte inferior).....	35
3.3	Curva de regresión lineal y determinación de la recta.....	38
3.4	Diluciones BODIPY 1/Cloroformo, BODIPY 2/Cloroformo, BODIPY 1/Diclorometano y BODIPY 2/Diclorometano; 1.5×10^{-05} M.....	39
4.1	Espectros de absorción UV-Vis del BODIPY 1 (9.94×10^{-06} M).....	41
4.2	Espectros de absorción UV-Vis del BODIPY 2 (1×10^{-5} M).....	43
4.3	Datos de band gap por disolvente para ambos BODIPYs.....	46
4.4	Datos de coeficiente de extinción molar por disolvente para ambos BODIPYs.....	47

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla	Pie de tabla	Página
3.1	Concentraciones de las diluciones por compuesto.....	39
4.1	Parámetros de absorción del BODIPY 1.....	42
4.2	Parámetros de absorción del BODIPY 2	44
4.3	Resultados obtenidos de la caracterización fotofísica de los BODIPYs.....	45
4.4	Datos de otros BODIPYs utilizados en CSSC	48
4.5	Comparativo de propiedades fotofísicas de derivados de cumarinas en literatura con los BODIPYs estudiados.....	49

GLOSARIO

ΔE	Energía de la banda prohibida
μl	Microlitro
BEC	Sistema de Bombeo Electrocentrífugo
Biocarburantes	Es una mezcla de sustancias orgánicas que se utilizan como combustible en los motores de combustión interna
Biogas	Gas combustible que se genera en medios naturales por las reacciones de biodegradación de la materia orgánica
BODIPYs	(<i>Boron-dipyrromethene</i>) Acrónimo para Dipirrometenos de Boro,
BM	Sistema de Bombeo Mecánico
CSO	Acrónimo para Celdas Solares Orgánicas
CSSC	Acrónimo para Celdas Solares Sensibilizadas por Colorantes
DMF	Acrónimo de dimetilformamida
DMSO	Acrónimo de dimetilsulfóxido
DSSC	Acrónimo para <i>Dye-Sensitized Solar Cell</i>
eV	Electronvoltio
Fotoconductividad	Fenómeno óptico y eléctrico en el que un material se vuelve un mejor conductor debido a la absorción de radiación electromagnética
HOMO	(<i>Highest occupied molecular orbital</i>) Orbital molecular ocupado de más energía
LUMO	(<i>Lowest unoccupied molecular orbital</i>) Orbital molecular no ocupado de más baja energía
M	Molaridad
mg	Miligramo
ml	Mililitro
nm	Nanometro
ns	Nanosegundo
OLEDs	(<i>Organic light-emitting diode</i>) Diodo orgánico de emisión de luz
TCO	(<i>Transparent conductive oxide</i>) Vidrio de Óxido Conductor Transparente



THF

Tetrahidrofurano

u. a.

Unidades adimensionales

UV-Vis

Ultravioleta-Visible

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, muchos de los procesos requeridos dentro de la industria petrolera demandan grandes cantidades de energía eléctrica; particularmente, durante las diferentes etapas de extracción de hidrocarburos, el consumo de energía se da desde la perforación de los pozos hasta el monitoreo de estos a lo largo de su vida productiva.

En general, los equipos de perforación son los que presentan una mayor demanda de energía eléctrica; ya sea por la potencia necesaria para los motores durante la producción del pozo (bombeo electrocentrífugo (BEC), o por bombeo mecánico (BM)), o bien, por los largos tiempos de perforación (semanas o incluso meses). En este sentido, el principal problema no se centra en la gran demanda de energía eléctrica requerida por la industria petrolera, más bien recae en la forma en que esta se genera. Durante el siglo XX, la generación de electricidad se ha dado a partir de la explotación de combustibles fósiles, proceso que igualmente será dominante durante la mayor parte del siglo XXI [1].

Para la generación de energía eléctrica se requieren centrales que utilizan diversos tipos de combustibles fósiles, siendo los más representativos el carbón, gas natural, combustóleo y uranio (U). De igual manera ha sido posible generar electricidad a partir de combustibles renovables como: agua, viento, geotermia y biomasa. En el 2016, la generación de energía eléctrica en México fue de 55564 MW, de los cuales: el 21.76 % fue generado por agua en hidroeléctricas, 62.82 % por la quema de gas, combustóleo y diesel en termoeléctricas, 9.68 % por quema de carbón en carboeléctricas, 1.57 % por aprovechamiento del calor de la tierra en geotermoeléctricas, 2.89 % utilizando uranio en centrales nucleoeeléctricas, 1.26% en eoloeléctricas, mientras que únicamente el 0.01 % se obtuvo a partir de luz solar en fotoeléctricas [2].

Aun cuando el uso de combustibles fósiles como materia prima para la generación de energía eléctrica presenta diversos inconvenientes, como la producción de dióxido de carbono (CO_2), el cual se emite a la atmósfera y contribuye en gran medida a la acumulación de gases invernadero, sigue siendo una de las pocas tecnologías capaces de satisfacer la demanda de energía eléctrica a nivel mundial. Los efectos ambientales que se relacionan a la producción de energía eléctrica tienen su origen, principalmente, en los productos de desecho de las diferentes actividades que se realizan para generarla y estos pueden ser del tipo sólido, líquido o gaseoso, e incluso ruido y calor.

Cada una de las actividades del sector eléctrico lleva a algún tipo de impacto sobre el medio ambiente. Los efectos más notorios que se pueden encontrar en los procesos de generación de electricidad son: liberación de gases invernadero, contaminación de cuerpos de agua y cambio de uso de suelo. Debido a esto es necesario utilizar energía eléctrica proveniente del aprovechamiento de las fuentes renovables, como lo es la energía solar. Es por ello, que el presente proyecto se realizó un estudio fotofísico de semiconductores orgánicos basados en BODIPYs con el objetivo de evaluar su comportamiento como materiales semiconductores para su uso en celdas solares sensibilizadas por colorantes.

CAPÍTULO 1. OBJETIVOS

1.1 Objetivo General

Evaluar las propiedades fotofísicas de dos derivados de BODIPYs con el objetivo de explorar su comportamiento semiconductor en celdas solares sensibilizadas por colorantes. Además, se evaluará si es factible que el aprovechamiento de la energía solar a través de celdas solares sea viable para la generación de energía eléctrica útil para diversos procesos en la industria petrolera.

1.2 Objetivos Específicos

- a) Establecer las propiedades fotofísicas de dos derivados de BODIPYs mediante espectroscopía UV-Visible a través de un estudio solvatocrómico.
- b) Evaluación de la viabilidad de estos derivados de BODIPYs como materiales semiconductores de celdas solares sensibilizadas por colorantes.



CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES

La obtención de energía se clasifica, de acuerdo a la disponibilidad de las materias primas que la producen, en renovables y no renovables.

- **Energías renovables:** son aquellas cuyo potencial es inagotable, ya que provienen de la energía que llega a nuestro planeta de forma continua, como consecuencia de la radiación solar o de la atracción gravitatoria de la luna. Entre estas podemos encontrar a la energía hidráulica, solar, eólica, biomasa, geotérmica y las marinas [3].
- **Energías no renovables:** son aquellas que existen en la naturaleza en una cantidad limitada. No se renuevan a corto plazo, y por eso se agotan cuando se utilizan. La demanda mundial de energía en la actualidad se satisface fundamentalmente con este tipo de fuentes energéticas: carbón, el petróleo, el gas natural y el uranio.

2.1. Energías renovables

2.1.1 Energía solar

Es aquella energía que se obtiene directamente de la luz solar. La energía del sol se desplaza a través del espacio en forma de radiación electromagnética, llegando una parte de esta energía a la atmósfera terrestre. Su aprovechamiento puede darse a través de la conversión de la radiación electromagnética proveniente del sol en calor (conversión fototérmica) o directamente en electricidad utilizando el efecto fotovoltaico [4].

- **Conversión fototérmica:** El principio básico de funcionamiento de estos sistemas solares es sencillo, la radiación solar se capta y el calor se transfiere a un fluido (generalmente agua o aire) [3]. Para aprovechar la energía solar térmica se usa el captador o colector solar. El fluido calentado se puede usar directamente o indirectamente mediante un intercambiador de calor, como se observa en la Figura 2.1, donde la conversión de energía solar a térmica se realiza al calentar el agua que se encuentra en las tuberías de los colectores.

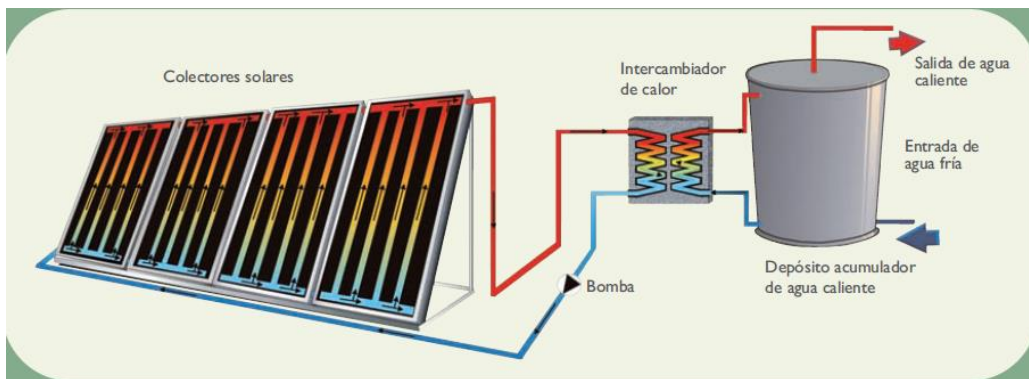


Figura 2.1 Esquema de la conversión fototérmica.

- **Efecto fotovoltaico:** La energía solar se transforma directamente en electricidad mediante celdas fotovoltaicas [3]. Este proceso se basa en la aplicación del efecto fotovoltaico, que se produce al incidir luz sobre materiales denominados semiconductores (Figura 2.2), de esta manera se genera un flujo de electrones en el interior del material que puede ser aprovechado para obtener energía eléctrica.

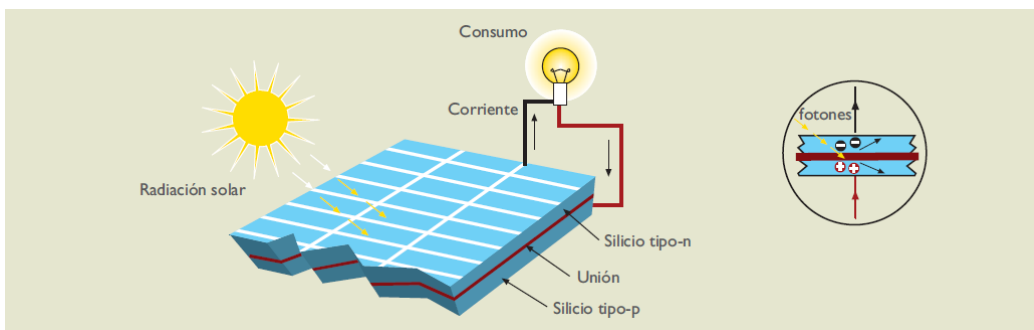


Figura 2.2 Esquema del efecto fotovoltaico.

Entre las ventajas que tiene la energía solar respecto a las demás energías renovables, sobresale que las celdas solares son de fácil instalación, tienen una larga duración (más de 30 años), su mantenimiento es mínimo, no producen ningún tipo de contaminación y su funcionamiento es totalmente silencioso. En cuanto a sus desventajas, la principal es su elevado costo inicial y el cambio de uso de suelo.

En el mundo, diversos países se encuentran en la región conocida como cinturón solar, debido a que en ella se registran los niveles más altos de radiación solar. Estos países se pueden identificar en la Figura 2.3. De acuerdo con la European Photovoltaic Industry Association (EPIA), son 66 los países que pertenecen al cinturón solar, y entre ellos, cinco son los que tienen el mayor potencial de energía solar en el mundo: Australia, China, India, México y Singapur.

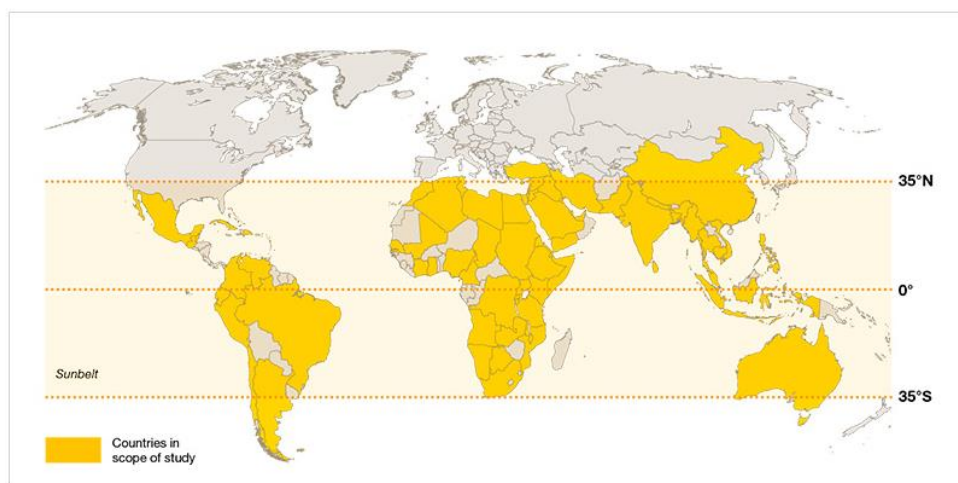


Figura 2.3 Mapa de los países que se encuentran en el cinturón solar.

2.1.2 Energía eólica

La energía eólica es la que contiene el viento en forma de energía cinética. Esta energía se puede convertir en energía mecánica, eléctrica, hidráulica, etc. En la actualidad, una de las formas más utilizadas para el aprovechamiento a gran escala de la energía eólica es a través de las aeroturbinas [3].

Las aeroturbinas pueden transformar la energía eólica en:

- Energía mecánica: aeromotores.
- Energía eléctrica: aerogeneradores.

Los aeromotores se han utilizado desde hace siglos para la molienda de grano, el bombeo de agua, etc. Los clásicos ejemplos de este tipo aeroturbinas son los molinos de viento como los que se observan en la Figura 2.4, que se utilizan para molienda de cereales. Actualmente siguen utilizándose en menor proporción para estos usos, además de incorporarse también en sistemas de desalación de agua.

Los aerogeneradores son los sistemas de aprovechamiento eólico más utilizados hoy en día, observándose un crecimiento muy pronunciado en su utilización a partir del año 1990. Estos dispositivos son los que se observan en los campos eólicos (Figura 2.5) y mediante los cuales se genera energía eléctrica. Su funcionamiento se basa en que al incidir el viento sobre sus palas se produce un trabajo mecánico de rotación que mueve un generador que produce electricidad.



Figura 2.4 Aeromotor (molino de viento)



Figura 2.5 Aerogenerado

El utilizar este tipo de dispositivos para generar energía eléctrica a diferencia de otro tipo de energías renovables como la geotérmica, presenta mayor simplicidad y rapidez su instalación; además de que se puede realizar de forma modular, es decir, desde la instalación de los primeros aerogeneradores se genera energía mientras se instalan los restantes [5]. La vida útil de los dispositivos es de aproximadamente 25 años, tienen un impacto en uso de suelo bajo y no producen tanta contaminación a excepción del ruido que se genera por el movimiento de las palas.

Una desventaja de estos tipos de energías renovables es la alta inversión para adquirir todo el equipamiento. Otras desventajas que se pueden presentar son relacionadas a la flora y fauna, ya que estos dispositivos pueden perturbar las rutas de aves migratorias, paisaje (si estas están en zonas urbanas) y generar competencia por uso de suelo al evitar aprovecharlo para otros fines.

2.1.3 Energía geotérmica

La energía geotérmica se debe a la diferencia entre la temperatura de la superficie terrestre y la del interior del planeta (entre 15 °C en la superficie a los 6000 °C del núcleo interno). Esta diferencia de temperaturas provoca un flujo continuo de calor desde el interior de la Tierra hacia la superficie. Para producir electricidad se aprovecha la salida del vapor de las fuentes geotérmicas, que accionan turbinas que ponen en marcha generadores eléctricos. Para ello es necesario que la temperatura del agua subterránea sea superior a 150 °C. Estos yacimientos, que se utilizan para la producción de electricidad, son los denominados de alta temperatura [3].

La generación de energía eléctrica mediante este proceso no es intermitente a comparación de la eólica o marina. Se puede tener una producción muy elevada siempre y cuando se cuente con yacimientos de gran tamaño y de fácil acceso; además, como se aprovecha el calor del interior de la Tierra la producción de CO₂

es bajo en comparación con las carboeléctricas y el costo de producción también es menor [5].

Las principales desventajas de este tipo de generación de energía recaen principalmente es que puede tener un gran impacto con la flora y fauna, ya que se pueden degradar bosques u otros ecosistemas, se contamina aire y agua por las emisiones de sulfuro de hidrógeno, amoniaco, mercurio y arsénico.

2.1.4 Energía hidráulica

La energía hidráulica aprovecha la energía potencial asociada a las caídas del agua y a la diferencia de alturas entre dos puntos del curso de un río, así como su energía cinética, alimentando el fluido a una turbina para generar la electricidad [3].

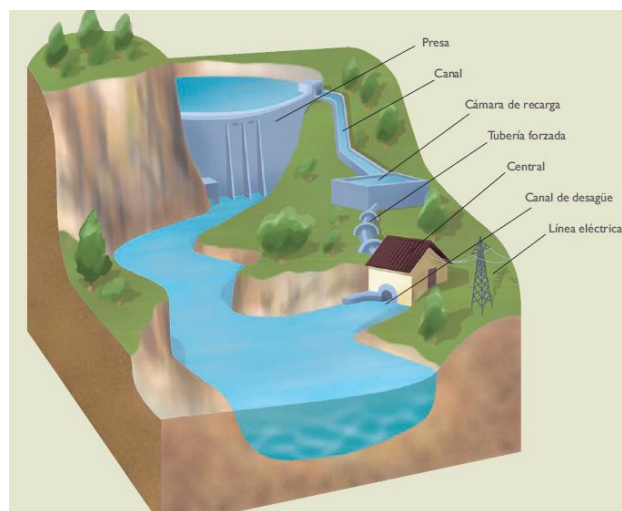


Figura 2.6 Esquema de una central hidroeléctrica

El proceso consiste en que el agua retenida en un embalse o presa, como se observa en la Figura 2.6, se deja caer por una tubería, a cuya salida se coloca una

turbina, haciendo girar un eje al caer el agua; este giro pone en marcha el generador eléctrico obteniéndose así la electricidad.

Las centrales hidroeléctricas son las instalaciones donde se genera la mayor producción de energía eléctrica a comparación con las otras energías renovables, esto se debe a que es una forma de generación constante y previsible, es decir, al conocer el volumen del embalse se puede controlar de mejor manera la producción de la energía. Otra ventaja es que no produce ningún tipo de contaminación.

Por lo contrario, la principal desventaja de este tipo de instalaciones es su elevado costo inicial, esto debido a que son proyectos de grandes dimensiones y diseños específicos, además de numerosos estudios que se realizan para su perfecta ubicación. Esto último puede provocar perturbaciones a poblaciones y ecosistemas por la construcción de las instalaciones o las dimensiones que pueden alcanzar los embalses.

2.1.5 Energía marina

En la actualidad esta energía se puede utilizar aprovechando las mareas, las corrientes oceánicas, las olas, el gradiente térmico de los océanos o la biomasa marina (con la obtención de gases combustibles a partir de ciertas algas marinas) [3]. En general, estas diferentes técnicas de aprovechamiento de la energía del mar se encuentran en fase precomercial o de investigación y desarrollo.

- **Las mareas.** La energía mareomotriz utiliza la diferencia entre las mareas para generar electricidad. El principio de funcionamiento consiste en construir diques capaces de contener un gran volumen de agua, donde se instalan unas compuertas que retengan el agua durante la subida de la marea. Una vez que la marea baja, las compuertas se abren dando paso a

un salto de agua que hace girar una turbina que, a su vez, pone en marcha un generador eléctrico.

- **Energía de las olas.** El oleaje es otra fuente de energía renovable que alberga un gran potencial generador de energía. La energía cinética contenida en el movimiento de las olas puede transformarse en electricidad de distintas formas.
- **Gradiente térmico.** El gradiente térmico se produce por la diferencia de temperaturas entre la superficie marina (20 °C o más) y la del fondo (puede oscilar entre 0-7 °C), aunque estas diferencias son mayores en algunas zonas del planeta como el ecuador. Para que la generación de electricidad sea rentable se necesita que la diferencia de temperaturas sea de, al menos, 20 °C entre la superficie y la capa situada a 100 metros de profundidad, lo que sucede en los mares tropicales y subtropicales.
- **Corrientes marinas.-** Las corrientes marinas se producen principalmente por la acción del viento. Estas corrientes se pueden aprovechar utilizando turbinas de baja presión.

El gran interés por aprovechar este tipo de energía se debe al gran potencial de producción que se podría tener y a que no se produciría ningún tipo de contaminación. Sin embargo, entre las principales desventajas que presenta es su alto impacto que generaría al perturbar el medio marino y costero para la flora y fauna, además de que se requieren características muy específicas para la ubicación de las instalaciones, lo que se refleja en la rentabilidad de los proyectos en cuanto costo-producción.

2.1.6 Biomasa

El término biomasa abarca un conjunto muy heterogéneo y variado de materia orgánica, el cual se emplea para denominar a una fuente de energía basada en la transformación de la materia orgánica utilizando normalmente, procesos de

combustión [3]. Las fuentes de biomasa que se utilizan para la obtención de energía son:

- **Biomasa natural**

Fundamentalmente la leña procedente de los árboles que crecen de forma espontánea, la cual ha sido utilizada por el hombre para calentarse y cocinar. Sin embargo, no se debe hacer un aprovechamiento sin control de este tipo de biomasa ya que se podrían destruir ecosistemas.

- **Biomasa residual**

Se produce en explotaciones agrícolas, forestales o ganaderas; también se generan residuos orgánicos en la industria y núcleos urbanos. Además de producir electricidad, que puede hacer que las instalaciones sean autosuficientes aprovechando sus propios recursos.

- **Cultivos energéticos**

En estos casos los terrenos y los agricultores no se dedican a producir alimentos sino a obtener cultivos que se aprovechan energéticamente. Para la obtención de biocarburantes. De la biomasa se obtienen energéticos como: *biocombustibles*, como la leña, carbón vegetal y desechos agrícolas como la paja y bagazo; *biocarburantes*, aceites vegetales, aceites vegetales esterificados (biodiesel) y alcohol, producto de cultivos como caña de azúcar, maíz, betabel, soja y palma de aceite; y *biogas*, que es metano producto de la fermentación de residuos orgánicos de desechos animales y núcleos urbanos.

2.2 Estado del arte de energía solar

La energía solar fotovoltaica consiste en la transformación directa de la radiación solar en electricidad mediante un dispositivo semiconductor (en el cual ocurre el efecto fotovoltaico) conocido como celda fotovoltaica. En la actualidad existen varios tipos de celdas fotovoltaicas. Las celdas fotovoltaicas elaboradas a partir de silicio monocristalino o policristalino son llamadas celdas de primera generación; estas son las de mayor eficiencia (de hasta 24 %) cuando se fabrican de silicio cristalino. El proceso de fabricación de este tipo de celdas solares es complejo y costoso.

Debido a este tipo de desventajas, se han desarrollado nuevas alternativas para la generación de energía solar sin utilizar silicio, como las fabricadas con telururo de cadmio (CdTe), cobre-indio-galio-selenio (CIGS), arsenuro de galio (GaAs) y silicio amorfo (α -Si). Este tipo de películas comprenden las celdas fotovoltaicas de segunda generación alcanzando eficiencias de hasta del 20 %.

Posteriormente, surgieron las celdas fotovoltaicas de tercera generación en las que se utilizan materiales orgánicos, plásticos, colorantes sensibilizantes con eficiencias de conversión de energía de hasta el 12 %; además de nuevas celdas solares híbridas que han mostrado eficiencias de conversión de incluso 43 % [6].

2.2.1 Efecto fotovoltaico

La conversión de la luz en electricidad se realiza a través del efecto fotovoltaico; este se produce al incidir luz sobre materiales semiconductores, generándose así un flujo de electrones en el interior del material. Para que se produzca esta conversión de energía, entran en juego tres fenómenos físicos, íntimamente ligados y simultáneos [7]:

- La absorción de la luz en los materiales.
- La transferencia de energía de los fotones a las cargas eléctricas.
- La unión de las cargas.

Para poder realizar esta conversión fotovoltaica, los materiales deben de tener propiedades ópticas y eléctricas específicas que permitan realizar este efecto.

2.2.1.1 Absorción de la luz

La luz está compuesta por fotones con una energía asociada que depende de su longitud de onda. Generalmente, un haz de luz que incide sobre un sólido, puede sufrir tres fenómenos ópticos:

- 1) Reflexión: la luz es reenviada en otra dirección por la superficie del objeto.
- 2) Transmisión: la luz atraviesa el objeto.
- 3) Absorción: la luz penetra en el objeto y no sale.

Dichos fenómenos son esquematizados en la Figura 2.7, el rayo incidente (I) se divide en otros 3 rayos más: el reflejado (R), absorbido (A) y el transmitido (T) [8].

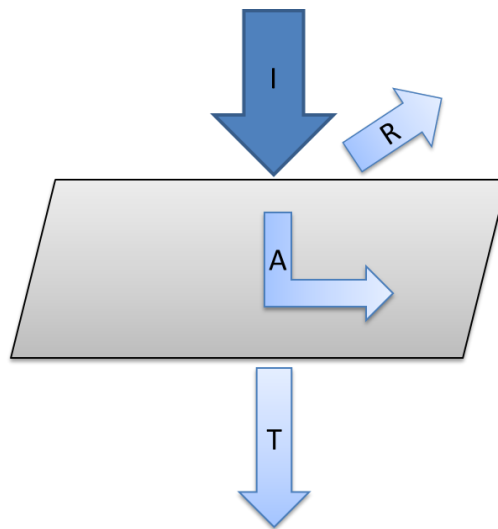


Figura 2.7 Esquema de los fenómenos ópticos: reflexión, transmisión y absorción de la luz en un objeto sólido.

2.2.1.2 Transferencia de energía

La energía que absorbe un material se puede convertir en energía eléctrica; las especies elementales capaces de llevar a cabo dicha conversión son los electrones, los cuales en un material conductor en estado sólido se ordenan en niveles energéticos denominados bandas.

Dichas bandas se conocen como banda de valencia (que es el más alto intervalo de energía electrónica) ocupada por electrones que forman los enlaces entre los átomos de las moléculas. Por su parte, la banda de conducción (es el intervalo de energía electrónica por encima de la banda de valencia) hacia la cual se pueden promover los electrones de valencia, lo que da lugar a la movilidad de cargas y por ende, al comportamiento semiconductor.

Los fotones absorbidos transfieren su energía a los electrones de valencia, lo cual permite que estos se liberen de la atracción de su núcleo atómico. Estos electrones liberados son capaces de producir una corriente eléctrica si se transfieren a un electrodo.

De manera general, todo electrón liberado se encuentra asociado a un hueco (carga positiva). Si el electrón se libera de una molécula del material, será un electrón de una molécula vecina el que rellene el hueco recién formado, dejando a su vez un hueco en la molécula que se rellenará con otro electrón de otra molécula adyacente. De esta manera, se genera un flujo de cargas (electrones y huecos) en direcciones opuestas, lo que da como resultado una corriente eléctrica.

Este fenómeno físico, conocido como *fotoconductividad*, es específico de materiales conductores y semiconductores. Dependiendo del material, existe una diferencia de energía entre las bandas de valencia y conducción del mismo, a esta diferencia se le conoce como *brecha energética prohibida (band gap)*; por lo que si un fotón absorbido tiene una energía inferior a esta brecha energética, no podrá generar el par electrón-hueco, y por lo tanto, no será capaz de producir un flujo de

cargas dentro de su estructura. Si un fotón tiene una energía igual o superior a la brecha energética, es porque tiene una longitud de onda inferior a un cierto valor, ya que estas dos magnitudes son inversamente proporcionales:

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

Lo que se traduce por: $E [eV] = \frac{1.24 \times 10^3 [eV \cdot nm]}{\lambda [nm]}$

Todos los fotones de energía superior a estos umbrales, y por lo tanto de longitudes de onda inferiores, sirven para la conversión fotovoltaica. En el dominio de la energía situada debajo del “gap óptico”, se encuentran los electrones de *valencia* del material, es decir, los que están ligados a los átomos. En la banda de *conducción* se encuentran los que han sido extraídos y que por lo tanto son libres de circular por el material. Logicamente, esta banda está vacía cuando el semiconductor no está iluminado (Figura 2.8a). Cuando un fotón tiene la energía suficiente, es absorbido, haciendo pasar un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción; lo cual se esquematiza en la Figura 2.8b [7].

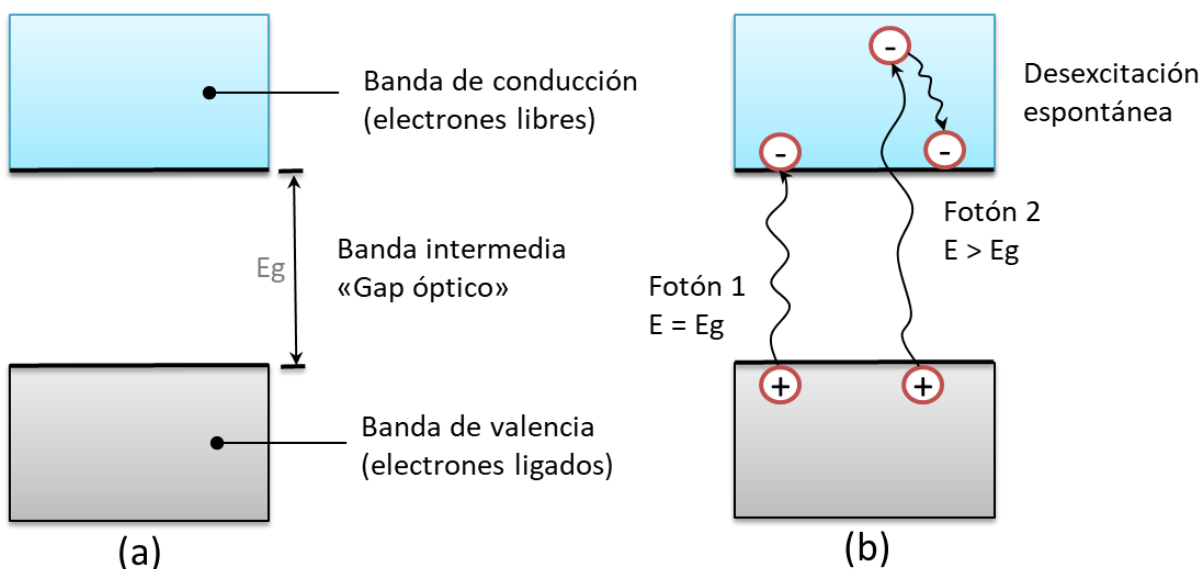


Figura 2.8 Diagrama de energía de un semiconductor: (a) en la oscuridad e (b) iluminado.

2.2.1.3 Unión de cargas

Para que se pueda llevar a cabo la conversión de luz en energía eléctrica es necesario que exista un transporte de cargas dentro del material hacia los correspondientes electrodos, ya que si esto no sucede se produce un proceso de recombinación, el electrón se asocia nuevamente con el hueco. Es por ello, que en materiales semiconductores se busca la generación de un campo eléctrico en el interior del mismo, que permita el transporte de las cargas negativas por un lado, y las cargas positivas por otro; como se puede apreciar en la Figura 2.9 [7].

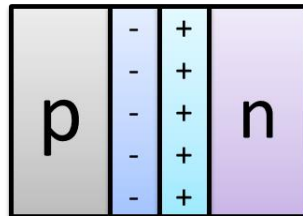


Figura 2.9 Representación esquemática de la unión p-n.

2.3 Dispositivos fotovoltaicos

Una celda solar es un dispositivo electrónico que permite transformar la energía lumínica (fotones) en energía eléctrica (flujo de electrones libres) mediante el efecto fotovoltaico. Para ello se requiere primero de un material en el que la absorción de la luz haga que un electrón se promocioe a un nivel superior de energía, y segundo del movimiento de este electrón cargado de energía hasta un circuito externo. El electrón disipará esta energía en un circuito externo y volverá a la celda solar.

En la Figura 2.10 se muestra un esquema en sección de los componentes principales de un dispositivo fotovoltaico de manera general, ya que estos varían de acuerdo al tipo de celda. Los elementos que se muestran en la figura son: contacto trasero, capa activa, emisor, contacto frontal y el revestimiento antirefectante; cada una de estas partes cumplen con una función para que se pueda llevar la generación de la energía [9].

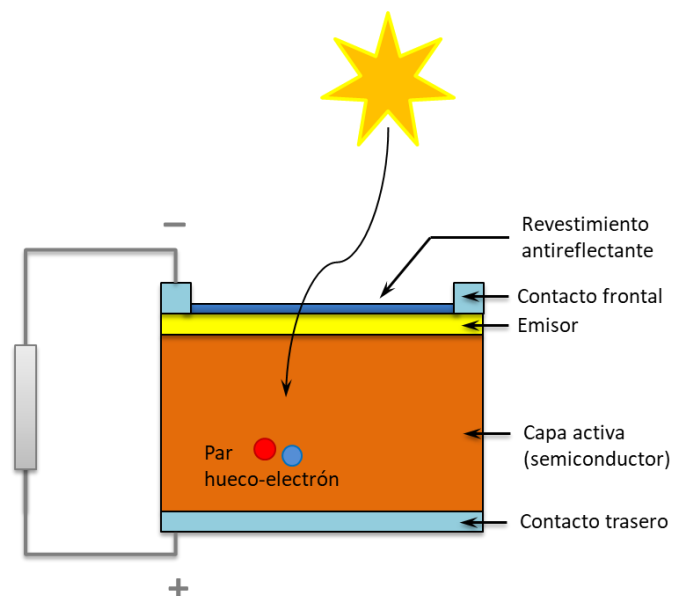


Figura 2.10 Esquema en sección de las partes de una celda solar.

Tanto el contacto trasero como frontal tienen la finalidad de servir como electrodos y de esta forma cerrar el circuito al estar en contacto con el semiconductor. En cuanto a la capa activa, que está conformada por un semiconductor de tipo p que se encarga de aceptar los electrones y el emisor de un semiconductor tipo n, para de esta forma generar el flujo de electrones entre los electrodos. Por último, se encuentra el recubrimiento antireflectante que tiene la finalidad de evitar que los rayos incidentes se reflejen y se obtenga el mayor aprovechamiento [10].

2.3.1 Celdas solares inorgánicas

2.3.1.1 Semiconductores inorgánicos

Los semiconductores están formados por átomos individuales enlazados unos con otros, dando lugar a una estructura regular y periódica en la que cada átomo está rodeado por ocho electrones. La Figura 2.11 representa la estructura de los semiconductores, donde se puede observar los átomos enlazados los unos a los otros [9].

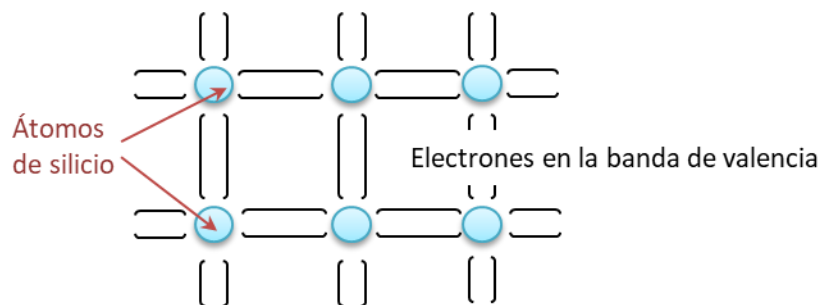


Figura 2.11 Estructura de un semiconductor

Los elementos que pueden comportarse como semiconductores son: Aluminio (Al), Silicio (Si), Fósforo (P), Azufre (S), Cobre (Cu), Zinc (Zn), Galio (Ga), Arsénico (As), Selenio (Se), Cadmio (Cd), Indio (In), Antimonio (Sb) y Telurio (Te). El silicio es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno. Por sus propiedades semiconductoras tiene un interés especial como

material básico para la fabricación de celdas usadas en transistores y celdas solares.

2.3.1.2 Dopaje de semiconductores inorgánicos

El dopaje de un semiconductor inorgánico favorece el transporte de cargas excedente, lo cual a su vez se ve reflejado en una mejor conductividad del material. En la figura 2.12a se representa una vista esquemática de un semiconductor basado únicamente en átomos de silicio, el cual no es un buen fotoconductor. Si se dopa con átomos de fósforo (figura 2.12b), un electrón por átomo de fósforo no se podrá unir con su correspondiente del átomo de silicio, produciéndose entonces un excedente de cargas negativas en el material. El material será por lo tanto, potencialmente “donador” de electrones, disponibles para la conducción eléctrica, y el silicio así dopado, es conocido como *silicio tipo n*.

De la misma manera, también es posible dopar el silicio con boro (figura 2.12c) que sólo tiene tres electrones en su banda de valencia [7]. El resultado es la aparición de un excedente de “huecos”, por lo tanto de cargas positivas, ya que falta un electrón en cada átomo de boro para completar los 4 electrones del silicio. Este material, a la inversa que el anterior, “acepta” electrones. Este material dopado se le conoce como *silicio tipo p*.

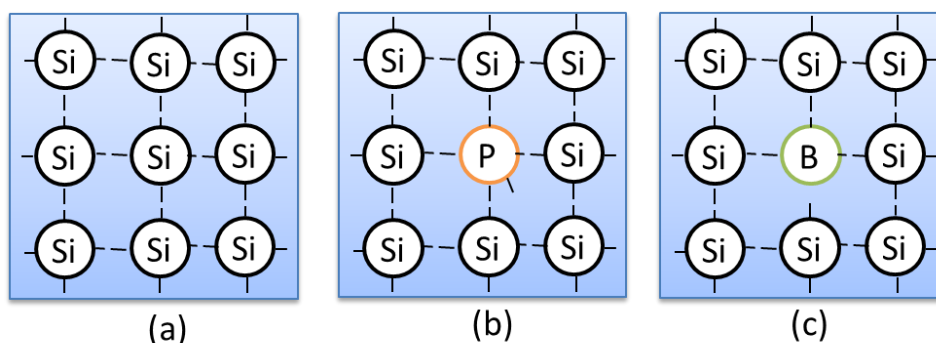


Figura 2.12 Representación esquemática del dopaje de un semiconductor: (a) Silicio puro (intrínseco), (b) Silicio tipo n y (c) Silicio tipo p.

2.3.2 Celdas solares orgánicas

Las celdas solares orgánicas son aquellas que en su capa activa contienen moléculas orgánicas; dichas moléculas se encuentran conformadas por átomos de carbono unidos por enlaces covalentes simples y múltiples alternados (σ y π).

La principal desventaja de las celdas orgánicas respecto a las inorgánicas es su menor eficiencia, además de la rápida degradación y estabilidad que presentan las orgánicas. Por otro lado, las celdas orgánicas son más amigables con el medio ambiente ya que son biodegradables, son de fácil mantenimiento, flexibles, adaptables a distintas superficies y son más sensibles a la luz, por lo que se obtiene mayor número de horas de aprovechamiento.

2.3.2.1 Semiconductores orgánicos

A diferencia de los semiconductores inorgánicos, los semiconductores orgánicos se basan en compuestos poliméricos (formados por unidades de repetición llamadas monómeros), así como en oligómeros y/o moléculas de bajo peso molecular. Ambos tipos de familia presentan propiedades de conductividad que dependen en gran medida de la estructura del material orgánico así como de su organización en estado sólido. De manera general, este tipo de semiconductores están basados en sistemas π -conjugados (enlaces σ y π alternados).

2.3.2.2 Principio de operación

En la figura 2.13 se encuentra esquematizado el funcionamiento de una celda solar orgánica. Como primer paso, se da la absorción de luz por parte del material donador (1), posteriormente se puede dar un decaimiento al estado basal (4), o bien, se produce la disociación del excitón transfiriendo el electrón al material

aceptor (2) para formar polarones, los cuales pueden producir una corriente si son capaces de transferirse a sus correspondientes electrodos (3) antes de recombinarse nuevamente (5) [11].

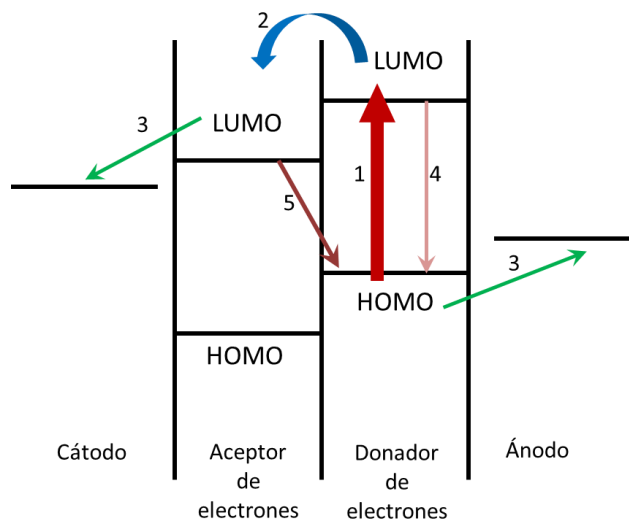


Figura 2.13 Esquema del funcionamiento de una celda solar.

2.3.3 Celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC: *dye-sensitized solar cell*)

Las celdas solares sensibilizadas con colorantes son un tipo de celdas fotovoltaicas, donde se absorbe la radiación electromagnética utilizando un colorante orgánico absorbido en otro material, por el cual se propagarán los electrones generados. En este tipo de dispositivos tiene lugar un fenómeno semejante al de la fotosíntesis, puesto que en ambos procesos intervienen colorantes orgánicos y, tanto en uno como en otro, la absorción de fotones y el transporte eléctrico tiene lugar en materiales diferentes y ocurren por separado [12].

2.3.3.1 Principio de funcionamiento

Este tipo de celdas solares usa moléculas de colorantes absorbidas sobre óxidos semiconductores nanocristalinos como TiO_2 o ZnO para coleccionar la luz del sol (partículas de color rojo y azul respectivamente en la Figura 2.14), la absorción de la luz (por los colorantes) y el proceso de colección de la carga (por el semiconductor que actúa como electrodo) son separados, imitando de esta manera a la natural absorción de la luz en la fotosíntesis [11]. La carga producida es transportada y aprovechada hacia un resistor extremo hasta llegar a un contraelectrodo, donde se completa el circuito mediante el uso de un electrolito, siendo el más utilizado un par redox yodo/triyodo.

La separación de la carga está basada en el proceso de transferencia del electrón desde la molécula colorante hacia el TiO_2 . El mayor mecanismo para la separación de cargas es el posicionamiento de los niveles de energía entre la molécula colorante y la nanopartícula semiconductor. El estado excitado del colorante (nivel LUMO) está por encima del borde de la banda de conducción del TiO_2 y el nivel HOMO del colorante se encuentra por debajo del potencial químico del par redox yodo/triyodo del electrolito favoreciendo la transferencia de carga unidireccional.

1. Transporte de la carga

El semiconductor actúa no solo como un electrodo de gran área superficial para las moléculas del colorante, sino también como un medio de transporte para los electrones inyectados desde el colorante [13]; la generación de electrones hacia la banda de conducción del TiO_2 bajo iluminación resulta en un gradiente de concentración de electrones en el electrodo, y de esta manera los electrones son llevados hasta el otro extremo del semiconductor hasta la película conductora TCO por difusión [14].

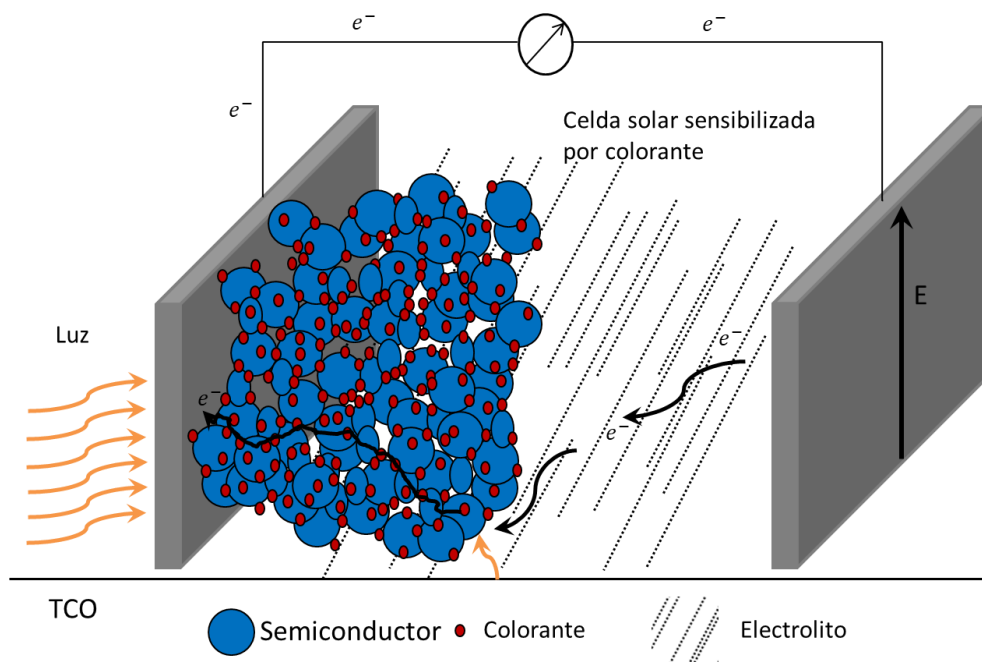


Figura 2.14 Esquema de una celda solar sensibilizada con colorante, se observan sus principales componentes como el colorante, el semiconductor, vidrios conductores y electrolito, que juntos transforman los fotones en corriente eléctrica.

2. Regeneración

A diferencia de los metales y semiconductores, en el electrolito la corriente es transportada por iones; el electrolito tiene que estar directamente ligado a los niveles energéticos del material semiconductor y del colorante, por tal motivo es necesario saber la relación que existe entre los potenciales redox del electrolito y la energía relativa del semiconductor, la posición de los niveles de energía asociados con el sistema redox determina la posibilidad de aceptar o donar electrones cuando las moléculas del par redox se aproximan al semiconductor. Se requiere también que el potencial redox del electrolito se encuentre por encima de la energía de estado no excitado del colorante para que la regeneración sea de manera espontánea [14].

El electrolito en la celda solar usualmente es un solvente orgánico contenido en el par redox I^-/I_3^- , el I^- restituye los electrones al colorante oxidado y el I_3^- en

contacto con el platino forma el I^- , cerrando de esta manera el circuito y dejando al colorante listo para un nuevo proceso al mismo tiempo [13].

2.3.3.2 Componentes de una celda solar sensibilizada por colorante (CSSC)

La arquitectura típica de una CSSC consiste en un arreglo multicapas que se compone principalmente por cuatro partes:

I. Fotoánodo o Electrodo

El fotoánodo, además de ser el soporte para el colorante, tiene como principal función la de transferir los electrones al sustrato conductor para que estos posteriormente lleguen al contraelectrodo; esto para que el circuito se cierre y la celda pueda funcionar. Los materiales que se han evaluado para este fin incluyen TiO_2 , ZnO , SnO_2 , Nb_2O_5 , $SrTiO_3$, $ZnSnO_4$. En el fotoánodo, la microestructura, tamaño de partícula, la porosidad y distribución del tamaño de poro juegan un papel crucial en la modulación de las propiedades fotovoltaicas [15].

Entre las características necesarias para el correcto funcionamiento de un fotoánodo se encuentran:

- a) Tener un área superficial grande para facilitar la adsorción de una buena cantidad de moléculas de colorante.
- b) Ser transparente en la región visible del espectro para minimizar la pérdida de los fotones incidentes.
- c) Tener una banda de conducción por debajo del nivel LUMO del colorante para permitir una inyección adecuada de los electrones fotogenerados.
- d) Tener una alta movilidad electrónica para el transporte eficiente de electrones.
- e) No ser activo al electrolito redox para minimizar los procesos de recombinación de carga.

- f) Tener ciertos defectos o grupos hidroxilo para aumentar la afinidad con el colorante.

II. Colorante

El colorante en la celda se encarga de absorber los fotones de la radiación solar, además, transfiere el electrón excitado a la banda de conducción del fotoelectrodo, para esto, es necesario que el LUMO del colorante se encuentre cerca de los ácidos carboxílicos por medio de los cuales el colorante se coordina al material del fotoelectrodo, y el valor del LUMO debe de estar por encima del valor de la banda de conducción del electrodo semiconductor. Por último, para cerrar el ciclo del funcionamiento de la celda, el electrolito regenera el colorante para ser utilizado de nuevo; para esto es necesario que el valor del HOMO del colorante se encuentre por debajo del potencial redox del electrolito. Entre los colorantes sensibilizadores que han sido explorados para su empleo en CSSC se encuentran complejos metálicos de rutenio, osmio, cobre y otros metales, también se han encontrado moléculas altamente conjugadas como las porfirinas y ftalocianinas. Adicionalmente, se han estudiado un sinnúmero de colorantes orgánicos como índoles, cumarinas, tiofenos, carbazoles, triarilaminas, etc [15].

Algunas de las características importantes que deben de tener los colorantes sensibilizadores de la luz en CSSC son:

- a) Absorción de la luz en la región visible del espectro electromagnético.
- b) Coeficiente de extinción molar alto.
- c) Estabilidad química.
- d) Afinidad por el semiconductor inorgánico.

III. Electrolito (Parejas de óxido-reducción)

El electrolito es uno de los componentes clave para las CSSC y sus propiedades tienen un gran efecto sobre la eficiencia de conversión y estabilidad de las celdas

solares. El potencial redox del electrolito define junto con la energía de la banda de conducción del fotoánodo el valor del voltaje de la celda.

La característica principal que debe tener el electrolito es que su potencial redox debe ser mayor en energía al nivel HOMO del colorante sensibilizador para que la reducción del colorante sea termodinámicamente favorecida. Existe una diversidad de electrolitos que son utilizados, sin embargo, el más conocido es el par I^-/I_3^- ; pero presenta una gran desventaja, dada la naturaleza de sus elementos es muy corrosivo y puede degradar al colorante sensibilizador. Existen muchas parejas redox alternativas que son menos corrosivas y con potenciales redox adecuados para generar un buen voltaje de celda, pero tienen una eficiencia de celda muy pobre. Sin embargo, han cobrado relevancia algunas alternativas como los pares redox de Co^{2+}/Co^{3+} , ferroceno, Cu^+/Cu^{2+} y otros electrolitos orgánicos en estado sólido que han generado eficiencias de celda aceptables [15].

IV. Contraelectrodo

La función principal del contraelectrodo es transferir los electrones aportados desde el fotoánodo al electrolito para que este regenere el colorante y entonces el circuito se cierre y la celda funcione.

Si del contraelectrodo se trata, el platino, es el material por excelencia debido a que hace una mancuerna excelente con el par yoduro/ triyoduro [15]. Una alternativa económica al platino son los electrodos de carbono grafito.

2.4 Dipirrometenos de Boro (BODIPYs)

Los BODIPYs son una familia de compuestos químicos de interés como colorantes fluorescentes. Estos colorantes presentan características químicas y físicas para desarrollar capas activas en celdas fotovoltaicas, colectores solares, absorbentes de fotones y OLEDs. Los BODIPYs están compuestos de un dipirrometeno complejado con un centro de boro disustituido, típicamente BF_2 ; la estructura del núcleo BODIPY se muestra en la Figura 2.15. El nombre IUPAC para el núcleo BODIPY es 4,4-difluoro-4-boro-3a,4a-diaza-s-indaceno.

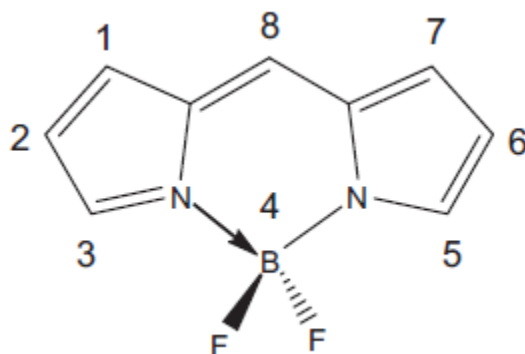


Figura 2.15 Núcleo BODIPY no sustituido.

Los BODIPYs presentan deslocalización electrónica a lo largo de su estructura debido a que se trata de sistemas π -conjugados. Esta conjugación se puede aumentar mediante la incorporación de sustituyentes insaturados o aromáticos. Además tienen la capacidad de desplazar su longitud de onda de absorción dependiendo del tipo de sustituyentes que contengan, ya sea un efecto batocrómico (absorción a longitudes de onda mayor) o un efecto hipsocrómico (absorción a longitudes menores).

Las propiedades fotofísicas más relevantes que presentan estas moléculas se enlistan a continuación [16]:

- Fuertes bandas en el espectro de absorción (entre 25 y 35 [nm])
- Absorción en el rango ultravioleta-visible (entre 470 y 530 [nm])
- Grandes coeficientes de absorción (entre 4×10^4 y 11×10^4 [$M^{-1}cm^{-1}$])
- Gran rendimiento cuántico de fluorescencia (entre el 60 y 90%)
- Estabilidad química y fotoquímica en solución y en sólido
- Vida fluorescencia entre 1 a 10 [ns]

En la Figura 2.16 se presenta un espectro de absorción característico de los BODIPYs, en dicha imagen se observa que en sus perfiles de absorción se encuentra una banda principal intensa y una segunda banda, a menor longitud de onda y más débil. Asimismo, en la figura, se indica la banda de absorción de interés para su uso como captador de fotones y el intervalo de absorción.

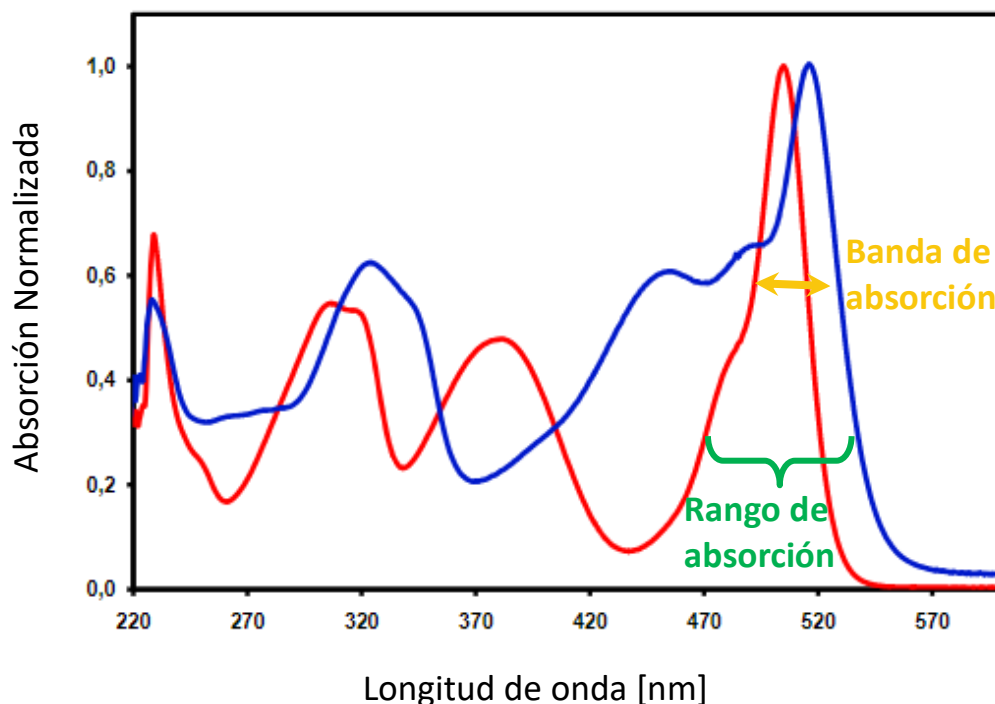


Figura 2.16 Espectro de absorción característico de BODIPYs

Los BODIPYs son de gran utilidad como colorantes en CSSC, debido a su fácil incorporación sobre dióxido de titanio (semiconductor más utilizado). A pesar de que los BODIPYs presentan bandas de absorción estrechas, se pueden incluir

diferentes sustituyentes sobre su estructura para modificar que la absorción se realice más hacia el rojo (menor energía). Uno de los ejemplos de BODIPYs utilizados como colorantes es el mostrado en la figura 2.17. Los grupos estirilo causan que el BODIPY pueda absorber en la región del rojo, mientras que con la trifenilamina este tiende a absorber en la región del azul/verde.

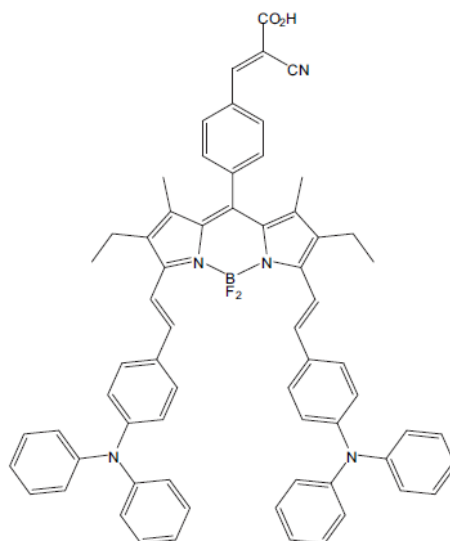


Figura 2.17 Estructura del BODIPY-Trifenilamina.

La voltamperometría cíclica demostró que el BODIPY posee un LUMO de 3.517 eV, que permite la transferencia favorable de electrones a la banda de conducción del dióxido de titanio, mostrando una eficiencia de conversión del 22 %. Por esta razón, los BODIPYs son potenciales colorantes para CSSC, ya que al sintetizar compuestos con distintos sustituyentes para mejorar sus propiedades los hacen viables opciones para obtener mejores eficiencias en este tipo de dispositivos solares.

CAPÍTULO 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.1 Equipo, materiales y reactivos

Equipo	Materiales	Disolventes
<ul style="list-style-type: none"> Espectrofotómetro UV-Vis (Perkin Elmer Lamda 35) 	<ul style="list-style-type: none"> Balanza analítica con precisión de 0.1 mg Celdas de cuarzo de 1 cm de paso de luz Matraces de 2 ml, 5 ml y 10ml Micropipetas de 100 μl y 500 μl Vasos de precipitados de 10 ml y 50 ml 	<ul style="list-style-type: none"> Acetato de etilo Acetona Cloroformo Diclorometano Dimetilformamida Dimetilsulfóxido Éter Tetrahidrofurano Tolueno Xileno
BODIPYs <ul style="list-style-type: none"> $C_{22}H_{13}BF_2N_2OS$ (BODIPY 1) $C_{24}H_{15}BF_2N_2O$ (BODIPY 2) 		

3.2 Generalidades

El estudio experimental consiste en establecer las propiedades fotofísicas de dos compuestos derivados de BODIPYs, con el objetivo determinar si son capaces de funcionar como captadores de fotones en celdas solares sensibilizadas por colorantes.

Para esto, se utilizarán los siguientes compuestos:

- $C_{22}H_{13}BF_2N_2OS$ (Figura 3.1a): BODIPY de color rojo con una masa molecular de 402.08 g/mol; que a partir de ahora será denotado como BODIPY 1.

- $C_{24}H_{15}BF_2N_2O$ (Figura 3.1b): BODIPY de color naranja con una masa molecular de 396.2 g/mol; que se denotara como BODIPY 2.

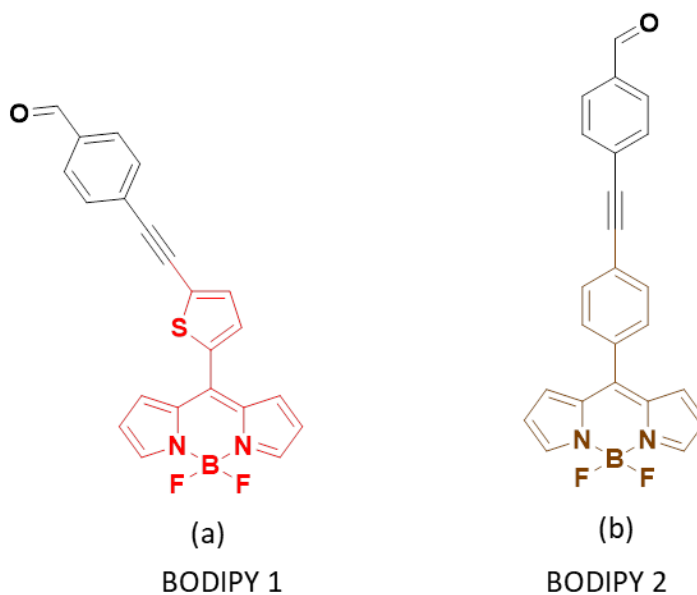


Figura 3.1 Estructuras químicas de los BODIPYs utilizados en el presente trabajo

3.3 Estudio Solvatocrómico

El efecto solvatocrómico se refiere a la forma en que el espectro de absorción o de emisión de una sustancia (soluto) varía dependiendo la polaridad del disolvente, como se observa en la figura 3.2. Esta capacidad que tienen las sustancias para cambiar de color dependiendo de la polaridad se debe a la presencia de grupos cromóforos [18] [19]. Con este fenómeno es posible determinar la diferencia entre el estado basal y el estado excitado, ya que el disolvente actúa como un campo eléctrico constante aplicado sobre el soluto.

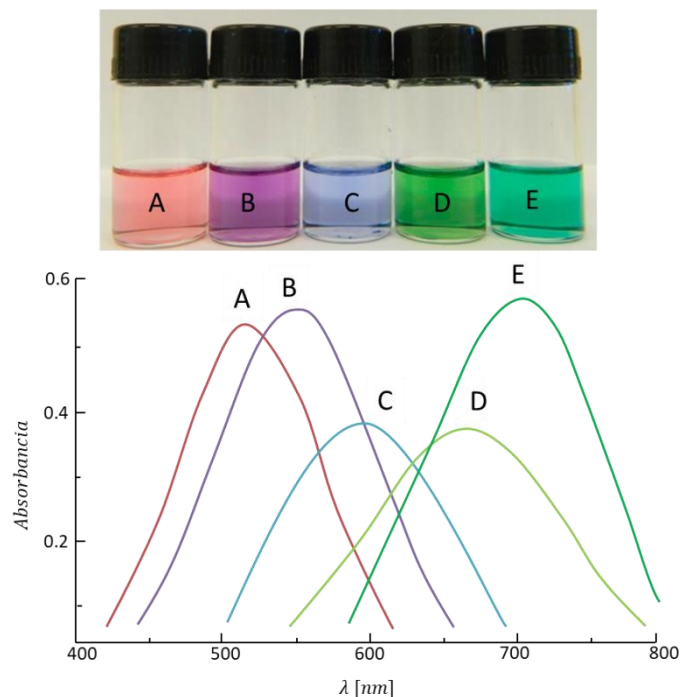


Figura 3.2 Cambio de color por disolvente (parte superior) y diferencias en forma, posición de bandas en el espectro de absorción (parte inferior).

Dicho fenómeno, se refleja en el espectro de absorción o emisión del soluto como diferencias en la posición, intensidad y forma de las bandas espectroscópicas. Al analizar estas diferencias, se pueden distinguir dos tipos de solvatochromismo [20]:

- Solvatochromismo negativo: cuando ocurre un desplazamiento *hipsocrómico* de la banda o desplazamiento hacia el azul (menor longitud de onda y mayor ΔE).
- Solvatochromismo positivo: cuando ocurre un desplazamiento *batocrómico* de la banda o desplazamiento hacia el rojo (mayor longitud de onda y menor ΔE).

3.4 Cálculo de la energía (E)

La energía del fotón es la energía transportada por un único fotón con una cierta longitud de onda y frecuencia electromagnética. A mayor frecuencia del fotón, mayor energía. A mayor longitud de onda del fotón, menor es su energía.

La energía de un fotón se obtiene mediante la “*relación de Planck-Einstein*”, esta relaciona la energía de un fotón E y la frecuencia f de su onda electromagnética asociada [21]:

$$E = hf \text{ Ecuación 1}$$

Dado que la frecuencia f , la longitud de onda λ , y la velocidad de la luz c cumplen $\lambda f = c$, la relación de Planck – Einstein (Ecuación 1) se puede expresar como:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \text{ Ecuación 2}$$

Dónde:

E es la energía de los fotones [eV]

h es la constante de Planck (4.136×10^{-15} [eVs])

c es la velocidad de la luz en el vacío (aprox. 3×10^8 [m/s])

λ es la longitud de onda del fotón [μm]

Como h y c son ambas constantes, la energía de los fotones cambia de forma inversamente proporcional a la longitud de onda.

Para cuantificar la energía de los fotones se utilizó la ecuación 2 y los valores de longitud de onda máxima de cada una de las diluciones con los diferentes disolventes y concentraciones.

3.5 Coeficiente de extinción molar (ϵ)

El coeficiente de extinción molar (ϵ) es un parámetro que define cuán fuertemente una sustancia absorbe la luz a una longitud de onda dada por concentración molar. Es una constante para una sustancia dada, siempre que la temperatura y la longitud de onda son constantes.

Los coeficientes de extinción molar (ε) de los compuestos estudiado fueron determinados en diluciones con los solventes enlistados anteriormente (3.1). Para cada par compuesto–solvente se estudió la linealidad de la ley de Beer–Lambert.

La ley de Beer-Lambert, establece que hay una **relación lineal** entre la absorción de luz a través de una sustancia y la concentración de la sustancia [21].

$$A = \varepsilon \cdot l \cdot C$$

Dónde:

A es la absorbancia [u.a.]

l es la longitud de la celda [cm]

ε es el coeficiente de extinción molar [$M^{-1} \text{ cm}^{-1}$]

C es la concentración de la sustancia [M]

Para obtener los coeficientes de extinción molar (ε) de cada par compuesto-solvente, se graficaron las curvas patrón con los datos de absorbancia y concentración a una longitud de onda dada, como la observada en la figura 3.3. Las rectas que se obtienen son del tipo $y = mx + b$, de forma que al compararlas con la ley de Beer-Lambert se deduce que:

$$m = \varepsilon \cdot l$$

De donde: $\varepsilon = \frac{m}{l}$

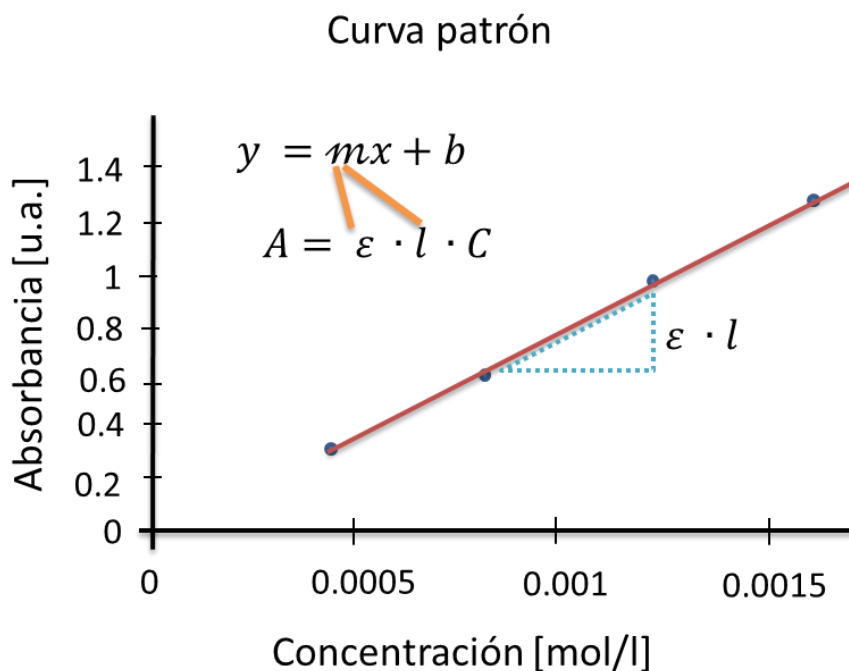


Figura 3.3 Curva patrón graficada para obtener la pendiente de la recta y por lo tanto, el coeficiente de extinción molar.

3.6 Preparación de disoluciones.

La preparación de las disoluciones madres se realizaron en matraces aforados de 10 mL, utilizando 1 mg de los BODIPY 1 y BODIPY 2 para cada uno de los disolventes seleccionados. De esta manera se obtuvieron disoluciones madre con concentraciones de 2.486×10^{-4} [mol/L] para el BODIPY 1 y 2.524×10^{-4} [mol/L] para el BODIPY 2. Algunas de estas se pueden ver en la figura 3.4.

Posteriormente, a partir de cada disolución madre se realizaron tres diluciones (tomando alícuotas de 0.1, 0.2 y 0.3 mL) a diferentes concentraciones (C_1 , C_2 , C_3), los datos completos se encuentran en la tabla 3.1.



Figura 3.4 Diluciones BODIPY 1/Cloroformo, BODIPY 2/Cloroformo, BODIPY 1/Diclorometano y BODIPY 2/Diclorometano.

Compuesto	C ₁ [M]	C ₂ [M]	C ₃ [M]
BODIPY 1	4.972×10^{-6}	9.944×10^{-6}	1.4916×10^{-5}
BODIPY 2	5.048×10^{-6}	1.0096×10^{-5}	1.5144×10^{-5}

Tabla 3.1 Concentraciones de las diluciones por compuesto.

3.6 Espectroscopia UV-Visible

Los espectros de absorción fueron adquiridos en un espectrofotómetro UV-Vis Perkin-Elmer Lambda 35 en un intervalo de 200 a 700 [nm]. Las diluciones se analizaron mediante esta técnica para obtener los gráficos Absorbancia (A) – Longitud de onda (λ).

Procedimiento:

1. Se enciende el espectrofotómetro para calentar la lámpara (aproximadamente 10 minutos).
2. Se revisan las celdas de cuarzo para confirmar que estuvieran limpias y en buen estado.

3. Mientras la lámpara se calienta, en la computadora se abre el programa *Scan Lambda 35* para indicar el número de muestras que se analizarán y nombrarlas adecuadamente.
4. Se ajusta el *Autozero* del equipo con una celda limpia y vacía.
5. Se introducen las muestras en las celdas de cuarzo, una a una; se inicia obteniendo el espectro de los disolventes y posteriormente el de cada una de las diluciones.
6. Finalmente, se obtienen los gráficos Absorbancia-Longitud de onda de cada una de las muestras que se analizaron en el espectrofotómetro.

Con estos espectros se puede conocer la longitud de onda con la absorbancia máxima para cada compuesto con los distintos disolventes y distintas concentraciones.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Estudio solvatocrómico

En la figura 4.1 se encuentran los perfiles de absorción del BODIPY 1 en los diferentes disolventes utilizados a una misma concentración (9.944×10^{-6} M).

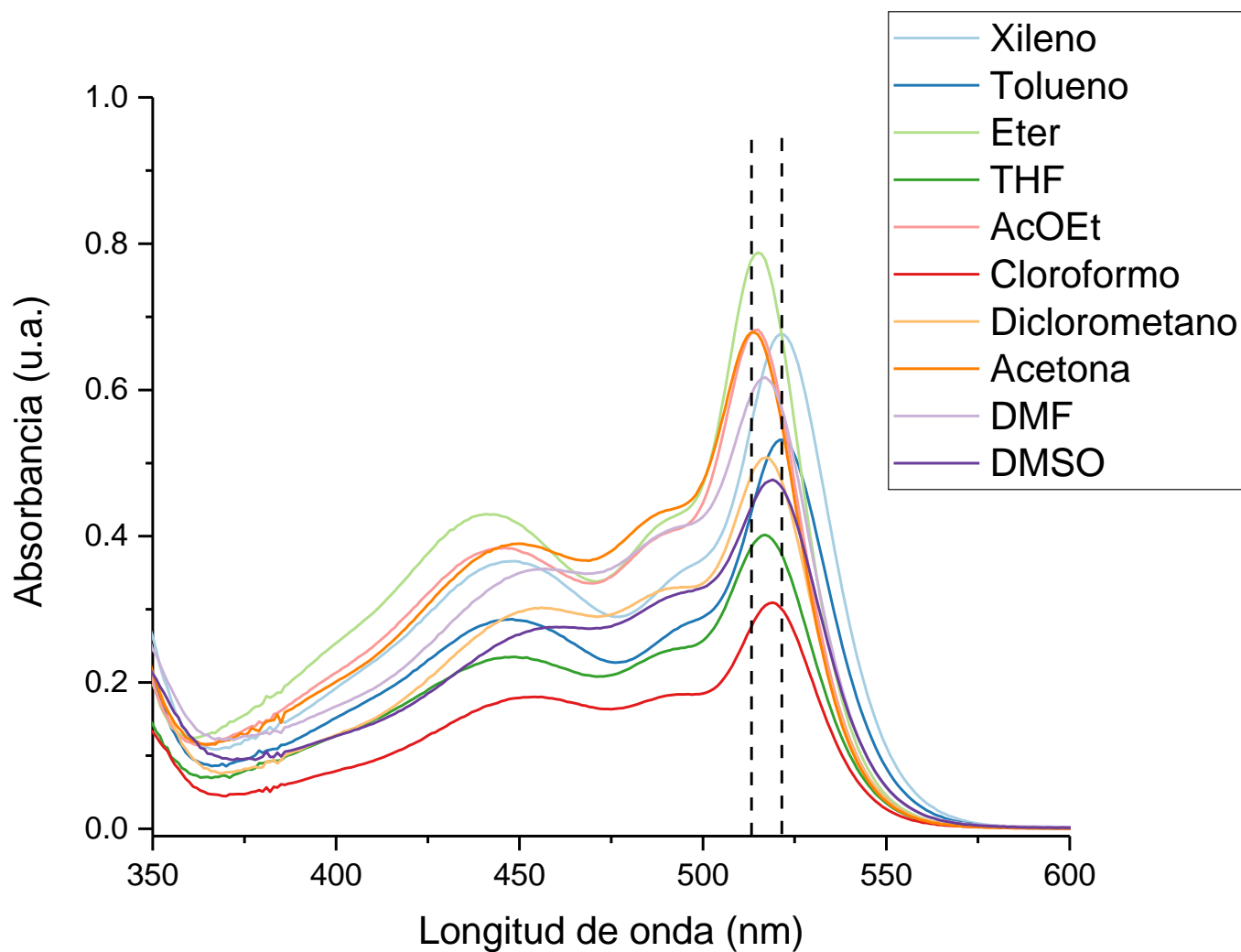


Figura 4.1 Perfiles de absorción del BODIPY 1 (9.94×10^{-6} M).

A partir del gráfico anterior, se puede establecer que la longitud máxima de absorción del BODIPY 1 se encontró en el intervalo comprendido entre 514-521 nm; la máxima intensidad de absorbancia se obtuvo en éter (0.7878 ua), mientras que la menor intensidad de absorbancia se obtuvo en cloroformo (0.3093 ua). Los datos completos de absorbancia y longitud máxima de absorción para cada disolvente se encuentran en la tabla 4.1.

Disolvente	λ máx. [nm]	Absorbancia [u.a.]
Xileno	521	0.6761
Tolueno	521	0.5318
Éter	515	0.7878
THF	517	0.4017
AcOEt	515	0.682
Cloroformo	519	0.3093
Diclorometano	517	0.5074
Acetona	514	0.6787
DMF	517	0.6173
DMSO	519	0.4772

Tabla 4.1 Parámetros de absorción del BODIPY 1.

Al analizar los datos de la tabla se puede observar que hay un desplazamiento hacia el rojo con los disolventes menos polares como el xileno y tolueno respecto a los disolventes de polaridades intermedias como el THF o diclorometano; del mismo modo, se puede percibir un desplazamiento hacia el azul, al disolver el compuesto en acetona, éter y AcOEt. Tomando como referencia la absorbancia del BODIPY 1 en diclorometano, se puede notar, una mayor absorbancia al compararlo con DMF y una baja absorbancia al hacerlo con el THF.

En la figura 4.2 se encuentran los perfiles de absorción del BODIPY 2 en los disolventes utilizados a una misma concentración (1.0096×10^{-5} M). A partir de este gráfico se encontró que la longitud máxima de absorción del BODIPY 2 está en el intervalo entre 502-508 nm; desplazado hacia el azul en comparación con el BODIPY 1. Similar a este último, la máxima absorbancia se obtuvo en éter (0.82227 ua), mientras que la menor absorbancia se dio en DMF (0.3725 ua). Los datos completos se encuentran en la tabla 4.2.

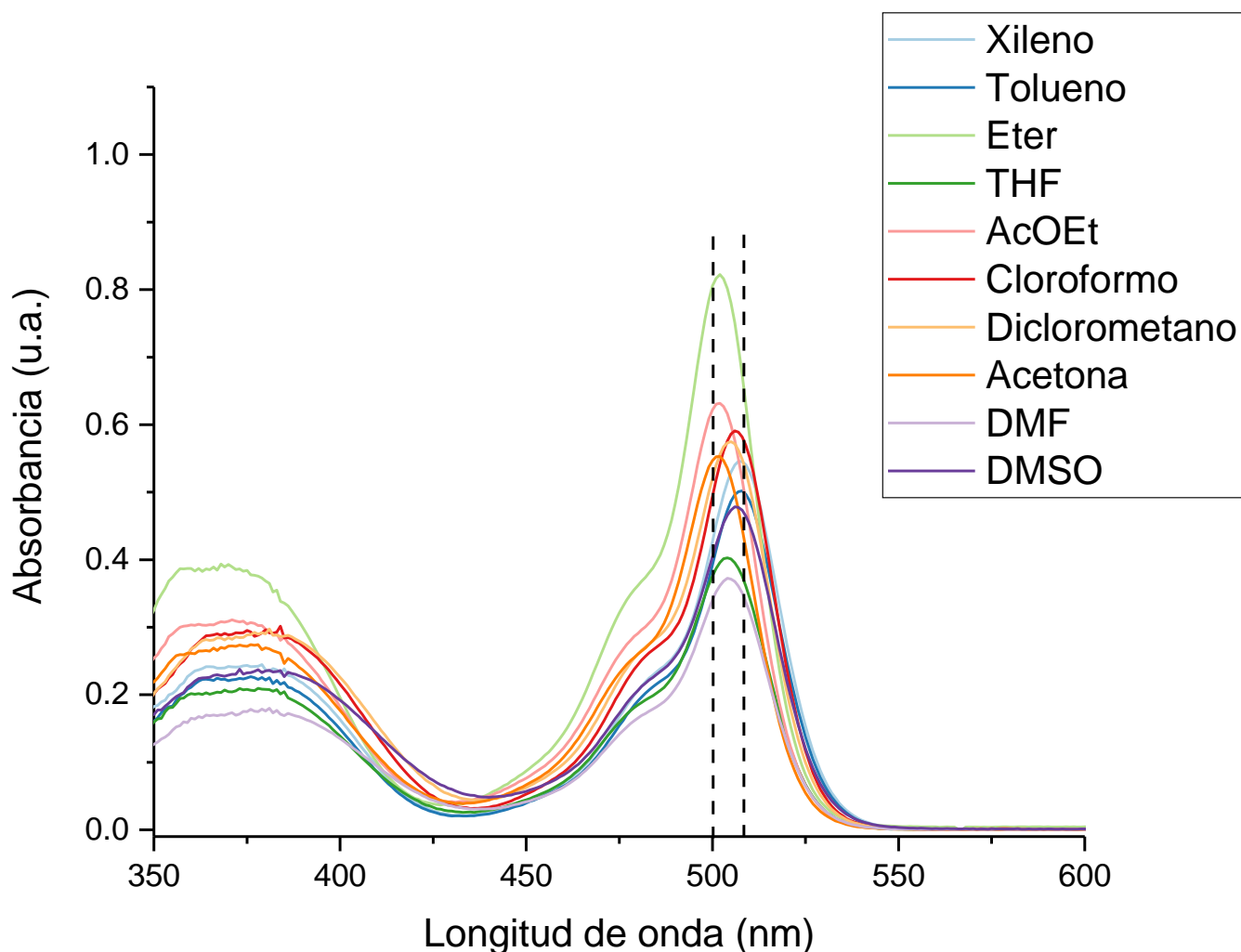


Figura 4.2 Perfiles de absorción del BODIPY 2 (1×10^{-5} M).

Disolvente	λ máx. [nm]	Absorbancia [u.a.]
Xileno	507	0.5455
Tolueno	508	0.5019
Éter	502	0.82227
THF	504	0.4028
AcOEt	502	0.6316
Cloroformo	506	0.5909
Diclorometano	505	0.5748
Acetona	502	0.5527
DMF	504	0.3725
DMSO	506	0.4783

Tabla 4.2 Parámetros de absorción del BODIPY 2.

De manera similar al BODIPY 1, se puede observar un desplazamiento hacia el rojo relacionado a los disolventes menos polares (xileno y tolueno) y un desplazamiento hacia el azul con éter, AcOEt y acetona. La diferencia respecto al BODIPY 1, el BODIPY 2 tiene aumentos y disminuciones de absorbancia menos intensos respecto al otro al cambiar de disolvente.

Por último, ambos BODIPYs tienen un rango de absorción similar, el BODIPY 1 absorbe a longitudes de onda mayores que el BODIPY 2 y las bandas de absorción del BODIPY 1 son ligeramente más anchas que las del BODIPY 2.

Además, ningún compuesto presenta un efecto solvatocrómico ya que no se observa una tendencia de desplazamiento hacia menores o mayores energías conforme aumenta la polaridad de los disolventes.

4.2 Energía de la banda prohibida y coeficiente de extinción molar

Con los datos anteriores se obtuvieron los valores de energía de la banda prohibida y coeficiente de extinción molar. En la tabla 4.3 se encuentran agrupados los resultados sobre coeficiente de extinción molar (ϵ) y energía de la banda prohibida (ΔE):

a) BODIPY 1

b) BODIPY 2

Disolvente	λ máx. [nm]	ΔE [eV]	ϵ [$M^{-1} cm^{-1}$]	Disolvente	λ máx. [nm]	ΔE [eV]	ϵ [$M^{-1} cm^{-1}$]
Xileno	521	2.3797	67156.07	Xileno	507	2.4455	53674.72
Tolueno	521	2.3797	51488.33	Tolueno	508	2.4406	47603.01
Éter	515	2.4075	76028.91	Éter	502	2.4698	73580.98
THF	517	2.3982	40054.30	THF	504	2.46	33330.03
AcOEt	515	2.4075	68493.56	AcOEt	502	2.4698	56834.39
Cloroformo	519	2.3889	27936.44	Cloroformo	506	2.4503	51069.73
Diclorometano	517	2.3982	40084.47	Diclorometano	505	2.4551	48147.78
Acetona	514	2.4121	66814.16	Acetona	502	2.4747	54642.43
DMF	517	2.3982	61846.34	DMF	504	2.46	37242.47
DMSO	519	2.3889	48491.55	DMSO	506	2.4503	47444.53

Tabla 4.3 Resultados obtenidos de la caracterización fotofísica de los BODIPYs.

Para el BODIPY 1 se puede notar que el valor de la energía del band gap tiene un rango entre 2.3797-2.4121 eV, obteniéndose los valores más bajos con los disolventes menos polares y el máximo valor con la acetona, seguido por éter y AcOEt. En cambio los valores para el coeficiente de extinción molar está entre $4.0054 \times 10^4 M^{-1} cm^{-1}$ y $7.6028 \times 10^4 M^{-1} cm^{-1}$, donde el máximo valor corresponde al éter, seguido por AcOEt, Xileno y acetona; y el valor mínimo al THF.

En cuanto a el BODIPY 2 se puede observar que el valor de la energía del band gap tiene un rango entre 2.4406-2.4747 eV, obteniéndose los valores más bajos con los disolventes menos polares y el máximo valor con la acetona, seguido por

éter y AcOEt; al igual que con el BODIPY 1. En cambio los valores para el coeficiente de extinción molar esta entre $3.33 \times 10^4 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ y $7.3 \times 10^4 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$, donde el máximo valor corresponde al éter, seguido por AcOEt, acetona y Xileno; y el valor mínimo al THF.

Al comparar los valores de band gap de ambos BODIPYs se puede observar que los del BODIPY 2 son mayores a los del BODIPY 1, en la figura 4.3; y que tiene un comportamiento similar respecto a los disolventes utilizados, observando el máximo valor con la acetona y los mínimos con el tolueno y xileno.

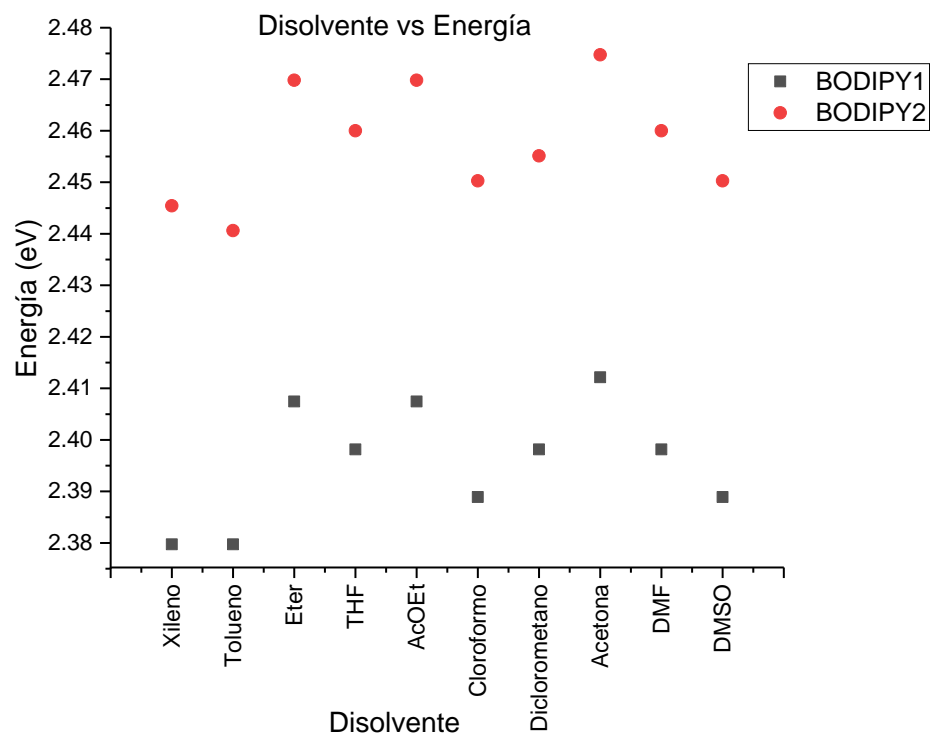


Figura 4.3 Datos de band gap por disolvente para ambos BODIPYs.

Por lo contrario se puede observar que los valores de coeficiente de extinción molar, del BODIPY 1 son mayores a los del BODIPY 2 (Fig. 4.4), a excepción de cuando se utiliza cloroformo o diclorometano que los valores del BODIPY 2 son mayores a los del BODIPY 1.

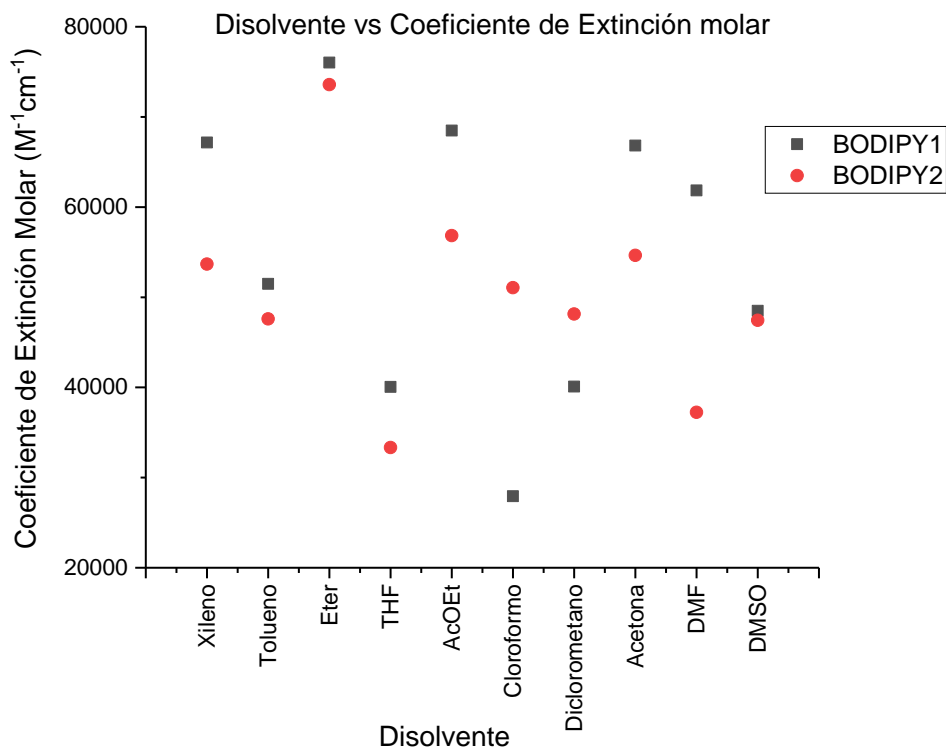


Figura 4.4 Datos de coeficiente de extinción molar por disolvente para ambos BODIPYs.

4.3 Discusión

Al comparar los valores de banda prohibida, HOMO y LUMO de los BODIPY 1 y 2 con otros BODIPYs ya estudiados como colorantes para celdas solares sensibilizadas por colorantes (Tabla 4.4); se puede notar que los valores son muy similares. Lo que garantiza que los BODIPYs estudiados en este trabajo pueden funcionar para ese tipo de celda solar.

BODIPIY	Estructura	HOMO [eV]	LUMO [eV]	E [eV]	BODIPIY	Estructura	HOMO [eV]	LUMO [eV]	E [eV]
1		5.088	3.517	1.571	9		5.88	3.79	2.09
2		4.52	0.46	4.06	10		5.67	3.62	2.05
3		5.45	0.47	4.98	11		5.61	3.69	1.92
4		5.05	3.62	1.43	12		5.22	3.59	1.63
5		5.21	3.55	1.66	13		5.2	3.64	1.56
6		5.33	3.2	2.13	14		5.22	3.58	1.64
7		5.09	3.32	1.77	BODIPIY 1		5.76	3.11	2.65
8		4.98	3.41	1.57	BODIPIY 2		5.38	3.23	2.15

Tabla 4.4 Datos de otros BODIPYs utilizados en CSSC

Si los comparamos con materiales estándares como P3HT [22], MEH-PPV y PTB7 [23], cuyos valores de banda prohibida son 1.95 [eV], 2.11 [eV] y 1.65 [eV] respectivamente, se observar que las bandas prohibidas en los BODIPYs son más grandes que los de los materiales de referencia. Es decir, la transferencia de electrones del nivel HOMO al LUMO sería más fácil para los compuestos estudiados.

Adicionalmente, los valores de coeficiente de extinción molar indican que gran parte de la energía absorbida por el fotón es aprovechada antes de que sea reemitido, es decir, gran parte de los fotones son absorbidos.

Compuesto	Estructura	λ máx. [nm]	ϵ [M ⁻¹ cm ⁻¹]	ΔE [eV]	Compuesto	Estructura	λ máx. [nm]	ϵ [M ⁻¹ cm ⁻¹]	ΔE [eV]
C343		442	15100.00	2.48	ATC-B		349	58000.00	2.91
NKX-2388		493	44200.00	2.18	ATC-C		423	38000.00	2.75
NKX-2311		504	51900.00	1.97	Antocianinas		520-560		2.2-2.41
NKX-2398		451	45800.00	2.25	BODIPY 1		514	27900.00	2.38
NKX-2586		506	59100.00	1.85			521	68500.00	2.41
Cou-Rh-1cyclic		371	38100.00	3.67	BODIPY 2		502	33300.00	2.44
Cou-Rh-1open		610	89100.00	2.37			508	56800.00	2.47
ATC-A		347	67000.00	2.88					

Tabla 4.5 Comparativo de propiedades fotofísicas de derivados de cumarinas en literatura con los BODIPYs estudiados.

En la tabla 4.5 se pueden comparar los valores de las propiedades fotofísicas de derivados de cumarinas [24], un colorante orgánico de origen natural y los BODIPYs estudiados en esta tesis. De acuerdo a los valores contenidos en la tabla, podemos observar que los compuestos estudiados en esta tesis (BODIPY 1 y 2) son equiparables con otros materiales desarrollados. Inclusive con el colorante de origen natural encontrados en plantas, flores y frutos.

La absorción de los BODIPYs es en el espectro visible, con bandas prohibidas estrechas y coeficientes de extinción molar variables dependen del solvente utilizado. Al compararlos se ve que sus características son muy cercanas a los compuestos de la serie NKX [24]. Al tener la absorción en el espectro visible los hace aptos para su aplicación en celdas solares orgánicas (CSO).

Ambos compuestos (BODIPY 1 y 2) tienen absorción en el espectro visible por lo que son viables para su uso en una Celda solar sensibilizada por Colorantes (CSSC). El BODIPY 1 tiene ligeramente menor energía en el band gap en comparación con el BODIPY 2, lo cual implica que funcione un poco mejor como semiconductor. Sus coeficientes de extinción molar altos de ambos compuestos, indican que atenúan considerablemente la intensidad lumínica que pasa por ellos; es decir, la permanencia del fotón en el material es prolongada y esto se refleja en una alta tasa de producción de excitones.

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Se realizó la caracterización fotofísica en disolución de dos derivados de BODIPY (BODIPY 1 y BODIPY 2) con el objetivo de determinar sus propiedades ópticas. A partir del análisis de sus perfiles de absorción, se encontró que el BODIPY 1 presenta bandas prohibidas en el intervalo de 2.38 a 2.41 eV, longitudes máxima de absorción de 514 a 521 nm y coeficientes de extinción molar entre 27936 y 76028 $M^{-1}cm^{-1}$; mientras que BODIPY 2 presentó bandas prohibidas en el intervalo de 2.44 a 2.47 eV y longitudes máxima de absorción de 502 a 508 nm, así como coeficientes de extinción molar entre 33330 y 73580 $M^{-1}cm^{-1}$.

Los espectros de absorción UV-Vis demostraron que no existe un efecto solvatocrómico al utilizar distintos disolventes, por lo que no se puede determinar un disolvente con el que se obtengan mejores propiedades ópticas de los compuestos.

Al comparar las propiedades fotofísicas de los BODIPYs estudiados con compuestos utilizados en celdas solares sensibilizadas por colorantes, se encontró que poseen diversas similitudes, con compuestos BODIPYs o derivados de cumarinas.

Por lo que, con un correcto diseño del dispositivo (electrodos, electrolito, contraelectrodo) se esperaría obtener un porcentaje de conversión alto con buenos rendimientos.

Las propiedades ópticas de estos compuestos revelan que pueden existir eficiencias altas de generación de energía eléctrica, esto por las buenas transferencias de electrones entre los componentes de las celdas, además de que se asegura una buena absorción lumínica en el rango visible. De esta manera, se puede garantizar que es factible la utilización de energía solar en instalaciones petroleras.

Perspectivas

El objetivo de este trabajo es dar a conocer alternativas viables para la generación de energía eléctrica en instalaciones petroleras; al saber que existen compuestos capaces de hacer funcionar una celda solar, y estas pueden ser utilizadas en oficinas y talleres.

Asimismo, se pueden diseñar arreglos de celdas para utilizar la energía generada en estaciones de monitoreo continuo y equipos de sistemas artificiales de producción; y de esta manera disminuir el uso de módulos de generadores de combustión interna.

Por otra parte, se podrían acondicionar plataformas petroleras con esta tecnología y promover instalaciones sustentables, evitando la generación de electricidad con generadores de combustión a gas.

La implementación de este tipo de celdas es una forma de profundizar más en el uso de las energías renovables y diseñar un arreglo que cumpla con los requerimientos con eficacia.

Por último, la utilización de estos compuestos químicos como sensibilizadores de celdas abre un gran panorama para otros usos que se les pueden dar. Debido a que estos se podrían estudiar para comprobar su funcionalidad como trazadores en ductos de petróleo, por sus propiedades fluorescentes. O la fabricación de películas delgadas como detectores de gases en áreas de trabajo.

REFERENCIAS

- [1] International Energy Outlook 2016, U.S. Energy Information Administration.
- [2] Informe Anual 2016, Comisión Federal de Electricidad (CFE), México 2017.
- [3] Schallenberg R., Julieta; Piernavieja I., Gonzalo; et. al., *Energías Renovables y eficiencia energética*, Primera edición, Instituto Tecnológico de Canarias, 2008.
- [4] Loborde, Miguel; Williams, Roberto, *Energía Solar*, Primera edición, Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Nucleares, Buenos Aires, 2016.
- [5] Estrada G., Claudio; Islas S., Jorge, *Energías Alternas: Propuesta de Investigación y Desarrollo Tecnológico para México*, Primera edición, Academia Mexicana de Ciencias, México. 2010.
- [6] *Estudio del Estado del Arte: Energía solar fotovoltaica*, INNCOM, Innovación y Competitividad, México, 2016.
- [7] Labouret, A y Villos, M; “*Energía Solar Fotovoltaica, Manual Práctico*”, Editorial AMV, Primera edición, Madrid 2008.
- [8] Bayod, A.A., “*Energías Renovables: Sistemas Fotovoltaicos*”, Pressas Universitarias de Zaragoza, Primera edición, Zaragoza 2009.
- [9] Ponce Alcántara, S., *Células solares de silicio: Fundamentos y aplicaciones*, Malaga, España, 2009.
- [10] Casado Bregón, A., *Contactos con células de heterounión de silicio*, Tesis doctoral, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España, 2017.
- [11] McEvoy, A., Markvart, T. y Castañer, L.; “*Solar Cells: Materials, Manufacture and Operation*”, Academic Press, Elsevier, Segunda edición, USA 2013.
- [12] Carbo Vela, P., y Rocha Rangel, E., *Proceso electroquímico en celdas solares sensibilizadas con un colorante natural.*, Investigación y ciencias, 2012.
- [13] Reyes-Lemus, J.A., *Colorantes orgánicos de origen natural utilizados como sensibilizadores de celdas solares*, Tesis de maestría, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia, 2014.

- [14] Naupa, A., Quintana, M., Gómez, M., *Celdas solares de óxido de Titanio comercial sensibilizado con colorante*, Dirección de Investigación y Desarrollo, Instituto Peruano de Energía Nuclear, Perú, 2011.
- [15] Sanchez-Bojorge, N., Rodriguez-Valdez, L., Zaragoza-Galán, G., *Celdas Solares sensibilizadas por colorants (CSSC)*, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Chihuahua, México, 2016.
- [16] Prakash-Sing, S. y Gayathri, T.; *Evolution of BODIPY Dyes as Potential Sensitizers for Dye-Sensitized Solar Cells*, European Journal of Organic Chemistry, 2014, 4689-4707.
- [17] Xochitiotzi-Flores, Elba; Islas-Mejia, Alisul; García-Ortega, Héctor; et. al.; *On the structure of meso-substituted F-BODIPYs and their assembly in molecular crystals: An experimental-theoretical approach*, Journal of Organometallic Chemistry 805 (2016).
- [18] Marini, A.; Muñoz-Losa, A.; Biancardi, A.; Mennicci, B.; *¿Qué es el solvatochromismo?*, J. Phys. Chem. B., 2010.
- [19] Reichardt, C., Welton, T.; *Disolventes y efectos de los solvents en la química orgánica*, 4ta Edición, Weinheim, Alemania, 2010.
- [20] Sanchez-Hernandez, J., *Sensor solvatoacrómico para lenguas electrónicas ópticas de un solo uso*, Universidad de Granada, España, 2009.
- [21] Conor, K.A. y Miñones, J.; *Espectrofotometría UV-Visible: Cumplimiento de la Ley de Lambert-Beer y análisis de mezclas*, 2008.
- [22] Cook, S., Furube, A., y Katoh, R.; *Analysis of the excited states of regioregular polythiophene P3HT*, Energy Environ. Sci., vol. 1, no. 2, 2008.
- [23] Dimitrov, S.; et. al.; *Singlet Exciton Lifetimes in Conjugated Polymer Films for Organic Solar Cells*, Polymers (Basel)., Vol. 8, no.1, 2016.
- [24] Angulo-Cervera, J.E.; *Estudio de la viabilidad de materiales derivados de 3-(4-aryl-1,2,3-triazol-1-yl)-cumarina para su utilización como parte de la capa activa en una celda solar orgánica*, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, 2017.

ANEXO

Espectros de absorción

A continuación se presentan los espectros de absorción en la región ultravioleta-visible de cada par compuesto-solvente a las distintas concentraciones. De los cuales se obtendrán datos como longitud de onda de la máxima absorbancia y su correspondiente absorbancia.

