

NANO-FABRICACION DE SENSORES UTILIZANDO POLIMEROS ESTRUCTURADOS

Erika I. López-Martínez, Daniel Glossman-Mitnik, Alfredo Márquez-Lucero

Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S. C. Miguel de Cervantes 120.
Complejo Industrial Chihuahua. Chihuahua, Chih. 31109. México.

1.- Introducción.

Los sistemas poliméricos siempre han jugado un papel crucial en muchos procesos de nanofabricación. Con materiales auto-organizables como los cristales líquidos, copolímeros en bloques y biopolímeros se pueden formar estructuras jerárquicas. La razón principal para usar sistemas poliméricos es que pueden formar estructuras ordenadas en masa o en solución a escala nanométrica. Estas nanoestructuras pueden ser obtenidas en una variedad de morfologías que se extienden desde micelas discretas hasta estructuras de redes continuas altamente simétricas [1].

Actualmente los materiales semiconductores orgánicos están siendo investigados intensivamente en celdas fotovoltaicas con el propósito de generar fotodetectores y celdas solares. Recientemente, ha sido propuesto un nuevo concepto para los dispositivos fotovoltaicos, basados en mezclas interpenetradas de donadores y aceptores entre dos contactos asimétricos. Bajo la influencia de un campo eléctrico, la separación de las cargas opuestas se lleva a cabo, con los huecos siendo transportados en la fase donadora y los electrones en la fase aceptora, de esta manera, la mezcla puede ser considerada como una red de donador-aceptor.

El C_{60} aparenta ser un interesante aceptor de electrones debido a su forma simétrica, su gran tamaño y propiedades de su sistema de electrones π . Armaroli y colaboradores han sintetizado derivados de Fullereno, en los cuales un grupo oligofenilvinilideno (OPV) es unido al C_{60} a través de un anillo de Pirrolidona.

Los derivados del C_{60} -OPV han sido incorporados en dispositivos fotovoltaicos contruidos por la depositación de estos compuestos sobre un sustrato de vidrio cubierto con Oxido de Indio-Estaño y una película de Aluminio sobre estas. En esta configuración, el compuesto no solo es capaz de generar electrones y huecos bajo irradiación de luz sino que también son colectados en los electrodos opuestos y una fotocorriente es obtenida. Sin embargo, la eficiencia de estos dispositivos es limitada por el hecho de que la transferencia de electrones fotoinducidos desde la molécula de OPV hacia el C_{60} parece competir con la transferencia de energía [2].

2.- Análisis.

Teniendo como base las síntesis realizadas por Armaroli y sus colaboradores se procedió a simular las moléculas sintetizadas por medio del programa Gaussian® [3] para corroborar y/o justificar sus resultados. Gaussian® es capaz de predecir muchas propiedades de las moléculas y reacciones, incluyendo las siguientes:

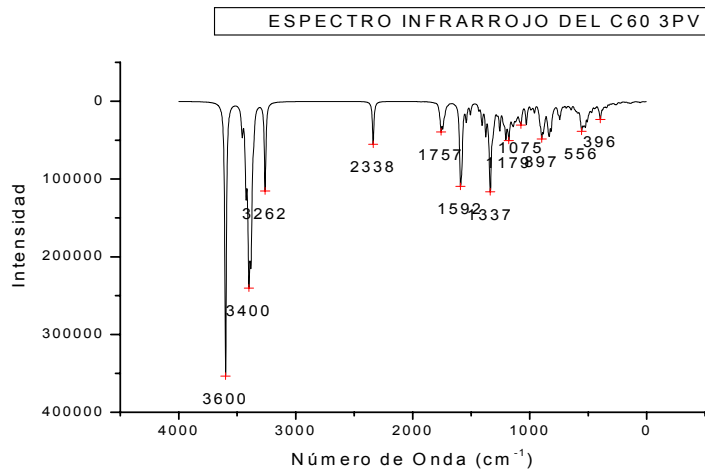
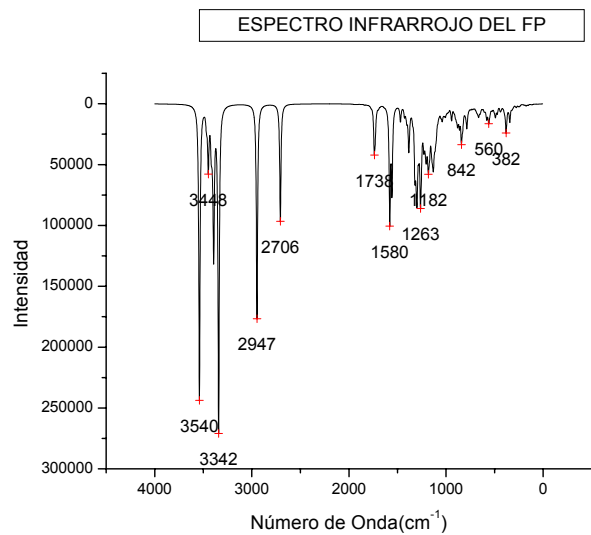
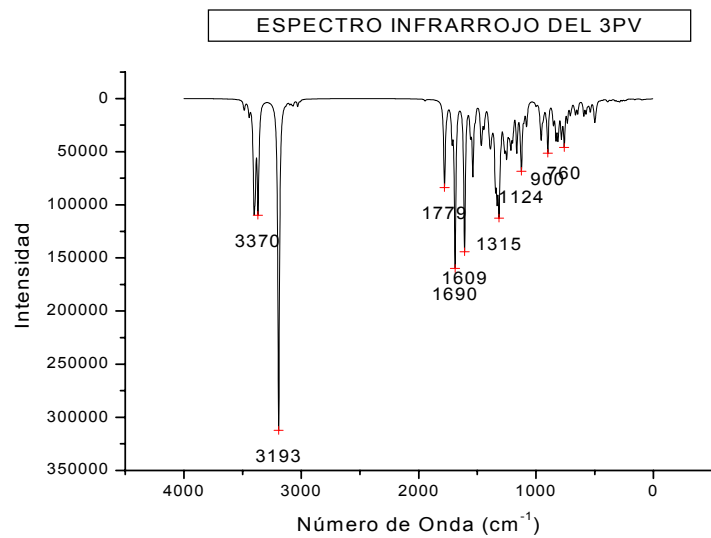
- ❖ Energías y estructuras moleculares
- ❖ Orbitales moleculares
- ❖ Momentos multipolos
- ❖ Cargas atómicas y potenciales electroestáticos
- ❖ Frecuencias vibracionales
- ❖ Espectro IR y Raman
- ❖ Propiedades de NMR
- ❖ Propiedades termoquímicas, etc.

La química Computacional simula estructuras químicas y reacciones numéricamente basadas por completo o parcialmente en las leyes fundamentales de la física. Esto permite estudiar el fenómeno químico por cálculos computacionales. Los cálculos pueden ser llevados a cabo en estado basal o excitado. La Química Computacional cuenta con dos grandes áreas las cuales se clasifican debido a la estructura de la molécula y su reactividad: Mecánica Molecular y Teoría de Estructura Electrónica, ambas realizan básicamente los mismos tipos de cálculos:

- ❖ Calculan la energía de una estructura molecular particular (arreglo espacial de átomos o núcleos y electrones).
- ❖ Llevan a cabo una optimización geométrica, la cual localiza la estructura molecular de más baja energía. Depende principalmente de un gradiente de energía, la primera derivada de la energía con respecto a la posición atómica.
- ❖ Calculan las frecuencias vibracionales de las moléculas que resultan del movimiento interatómico dentro de la molécula. Las frecuencias dependen de la segunda derivada de la energía con respecto a la estructura atómica y los cálculos de frecuencia pueden también predecir otras propiedades, las cuales dependan de segundas derivadas [4].

3.- Resultados

A continuación se muestran las moléculas simuladas así como sus espectros infrarrojos, que fueron obtenidos mediante el cálculo de las frecuencias vibracionales de las moléculas.



4.- Discusión.

Debido al tamaño de las moléculas, el cálculo de sus espectros de infrarrojo necesita de una optimización del método en base a la geometría de estas así como las frecuencias vibracionales de las mismas. El Método utilizado para obtener la geometría de optimización fue el de "Mecánica Molecular". Este realiza los cálculos basado en las interacciones entre el núcleo y los electrones, esto permite que el método sea utilizado para sistemas muy grandes los cuales contienen varios cientos de átomos. La limitante es que no se pueden tratar problemas químicos donde los efectos electrónicos predominen. El método utilizado para obtener las frecuencias vibracionales de las moléculas fue el AM1 el cual pertenece a la clase de Métodos Semiempíricos de Estructura Electrónica. Estos resuelven una forma aproximada de la ecuación de Schrödinger que depende de tener parámetros apropiados disponibles para el tipo de sistema químico bajo investigación.

Los anteriores cálculos muestran que las moléculas estudiadas absorben energía preferentemente en el área de frecuencias de 3193 a 3600 (número de onda). Lo que los hace muy interesantes para transformar la energía solar en corriente eléctrica. Asimismo, se observa que en la zona de irradiación humana la captación es menos importante pero significativa, por lo tanto se vislumbra importantes aplicaciones farmacéuticas de estos mismos compuestos.

5.- Conclusión.

Se simularon en Gaussian® las frecuencias vibracionales de híbridos de Fulereo y Oligofenilvinilideno mediante lo cual se pudo obtener los espectros infrarrojos de las moléculas simuladas. Esto nos permite demostrar que mediante la aplicación de la química computacional es posible caracterizar los híbridos de Fulereo-Oligofenilvinilideno lo cual nos será de gran utilidad para el estudio del comportamiento de estas moléculas en los dispositivos fotovoltaicos.

6.- Bibliografía

1. Liu T, Burger C. and Chu B., Nanofabrication in polymer matrices, *Prog. Polym. Sci.*, **28**, 5-26 (2003)
2. Armaroli N., Echegoyen L., Ouali L. and Nicoud J-F., Fullerene-Oligophenylenevinylene Hybrids: Synthesis, Electronic Properties, and Incorporation in Photovoltaic Devices, *J. Am. Chem. Soc.* **122**, 7467-7479(2000).
3. Copyright © 1997-2003, Gaussian, Inc.
4. Foresman J. and Frisch A.E., Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Gaussian Inc, Second Edition (1996)