

# SÍNTESIS DE NUEVOS COLORANTES ORGÁNICOS PARA SU APLICACIÓN EN CELDA SOLARES DE TERCERA GENERACIÓN

Laura Gracia Marcén

Trabajo de Fin de Grado - Anexos  
Departamento de Química Orgánica  
Facultad de Ciencias  
Universidad de Zaragoza  
Septiembre 2015



## **1. Anexo**



## 7. Anexo

### 7.1. Instrumentación

Los puntos de fusión se han medido en un Gallekamp y no están corregidos.

Los espectros de IR se han realizado en un espectrofotómetro Perkin Elmer 1600FT en pastilla de KBr, y las vibraciones se expresan en nº de onda ( $\text{cm}^{-1}$ ).

Los espectros de resonancia magnética nuclear se han registrado en un Bruker AV-300, a 300 MHz para  $^1\text{H}$ -RMN y a 100 MHz para  $^{13}\text{C}$ -RMN, o en un Bruker ARX-300, a 300 MHz para  $^1\text{H}$ -RMN y a 75 MHz para  $^{13}\text{C}$ -RMN, o en un Bruker AV-400, 400 MHz para  $^1\text{H}$ -RMN y a 100 MHz para  $^{13}\text{C}$ -RMN.

Los espectros MALDI se llevaron a cabo en un Bruker MicroFlex con un láser de nitrógeno, de 3,68 eV, usando ditranol (1,8,9-Antracenotriol) como matriz.

Los espectros de HRMS-ESI+ se han registrado en un Bruker MicroFlex, empleando formiato de sodio como referencia externa.

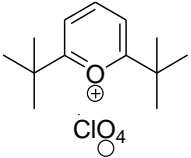
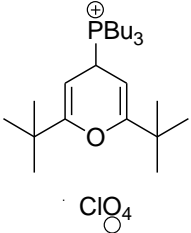
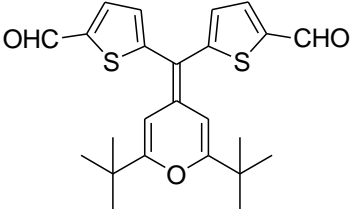
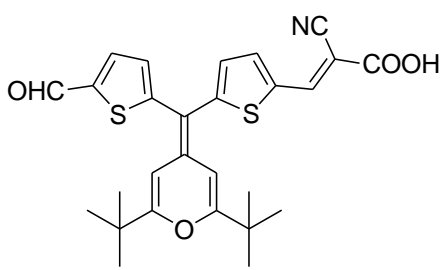
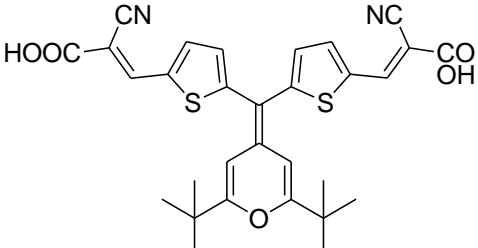
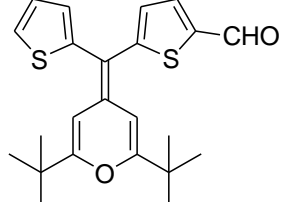
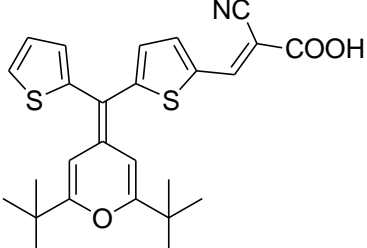
Los espectros ESI de baja resolución se han registrado en un esquire 3000+.

La purificación de los productos finales por cromatografía en columna se ha llevado a cabo empleando una bomba de media presión, modelo Buchi C-605 con controlador C-615 y columnas Buchi de diferentes diámetros.

Los espectros de Voltametría de Pulso Diferencial se han llevado a cabo en un potenciostato  $\mu$ -Autolab type III, utilizando como electrodo de trabajo uno de grafito, electrodo de referencia Ag/AgCl y como contraelectrodo uno de platino. Se utilizó como sal de fondo hexafluorofosfato de tetrabutilamonio con una concentración 0.1M en el disolvente de trabajo.

Los espectros de absorción UV-vis se han realizado en un espectrofotómetro UNICAM UV4. Los resultados se expresan en nanómetros (nm).

## 7.2. Espectros y gráficas

Estructura	Referencia	Espectro	Página
	(1)	<sup>1</sup> H-RMN	23
		<sup>13</sup> C-RMN	23
		IR	24
		MS (ESI <sup>+</sup> )	24
	(2)	<sup>1</sup> H-RMN	25
		<sup>31</sup> P-RMN	25
		IR	26
		MS (ESI <sup>+</sup> )	26
	(3)	<sup>1</sup> H-RMN	27
		<sup>13</sup> C-RMN	27
		<sup>1</sup> H - <sup>13</sup> C HSQC	28
		IR	28
		MS (MALDI)	29
	(4)	<sup>1</sup> H-RMN	29
		<sup>13</sup> C-RMN	30
		<sup>1</sup> H - <sup>1</sup> H COSY	30
		IR	31
		MS (ESI <sup>+</sup> )	31
		UV	32
		DPV	32
	(5)	<sup>1</sup> H-RMN	33
		<sup>13</sup> C-RMN	33
		IR	34
		MS (ESI <sup>+</sup> )	34
		UV	35
		DPV	35
	(6)	<sup>1</sup> H-RMN	36
		<sup>13</sup> C-RMN	36
		IR	37
		MS (ESI <sup>+</sup> )	37
	(7)	<sup>1</sup> H-RMN	38
		<sup>13</sup> C-RMN	38
		IR	39
		MS (ESI <sup>+</sup> )	39
		UV	40
		DPV	40

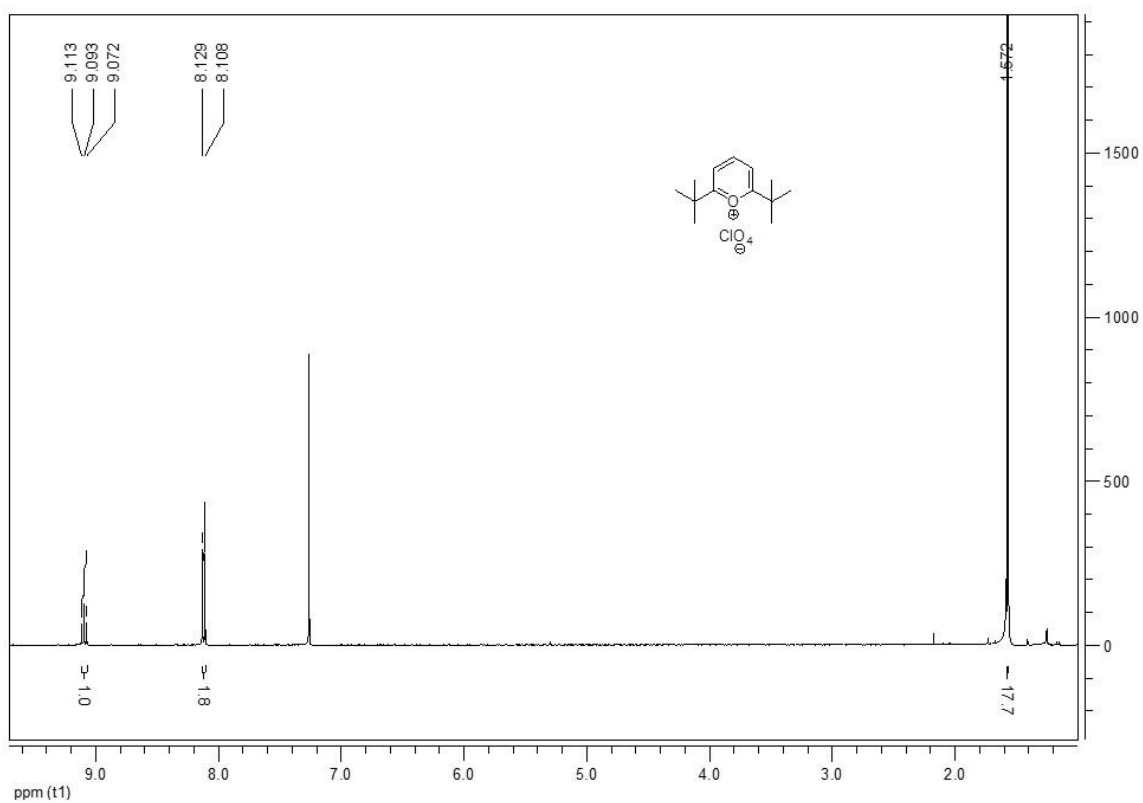


Figura 1: Espectro de <sup>1</sup>H-RMN del compuesto 1.

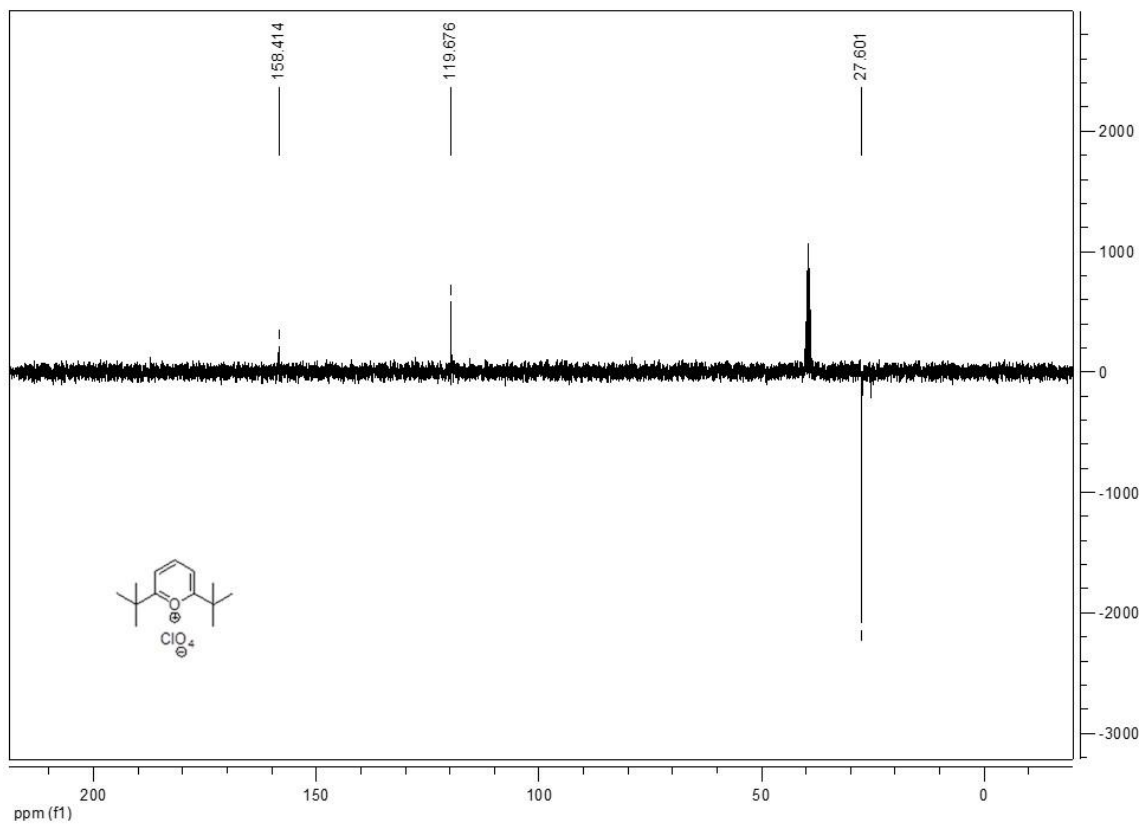


Figura 2: Espectro de <sup>13</sup>C-RMN del compuesto 1.

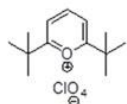


Figura 3: Espectro de IR del compuesto 1.

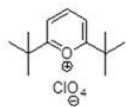
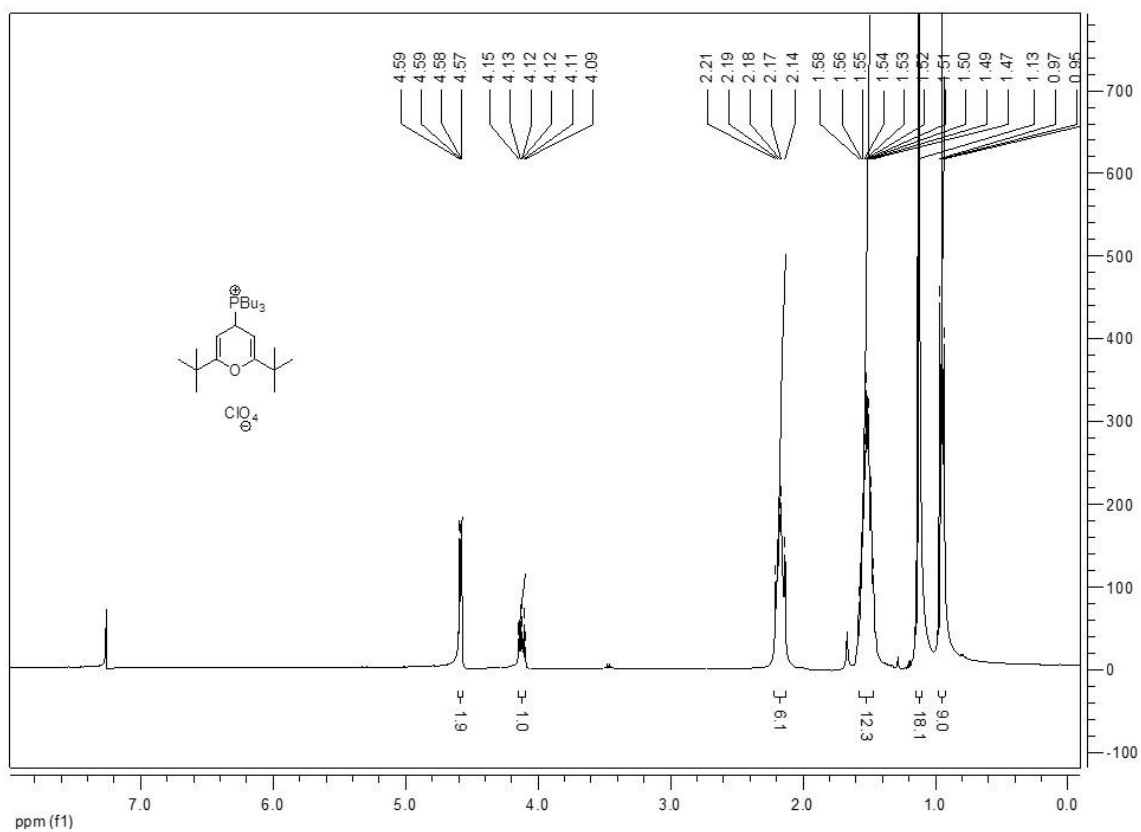
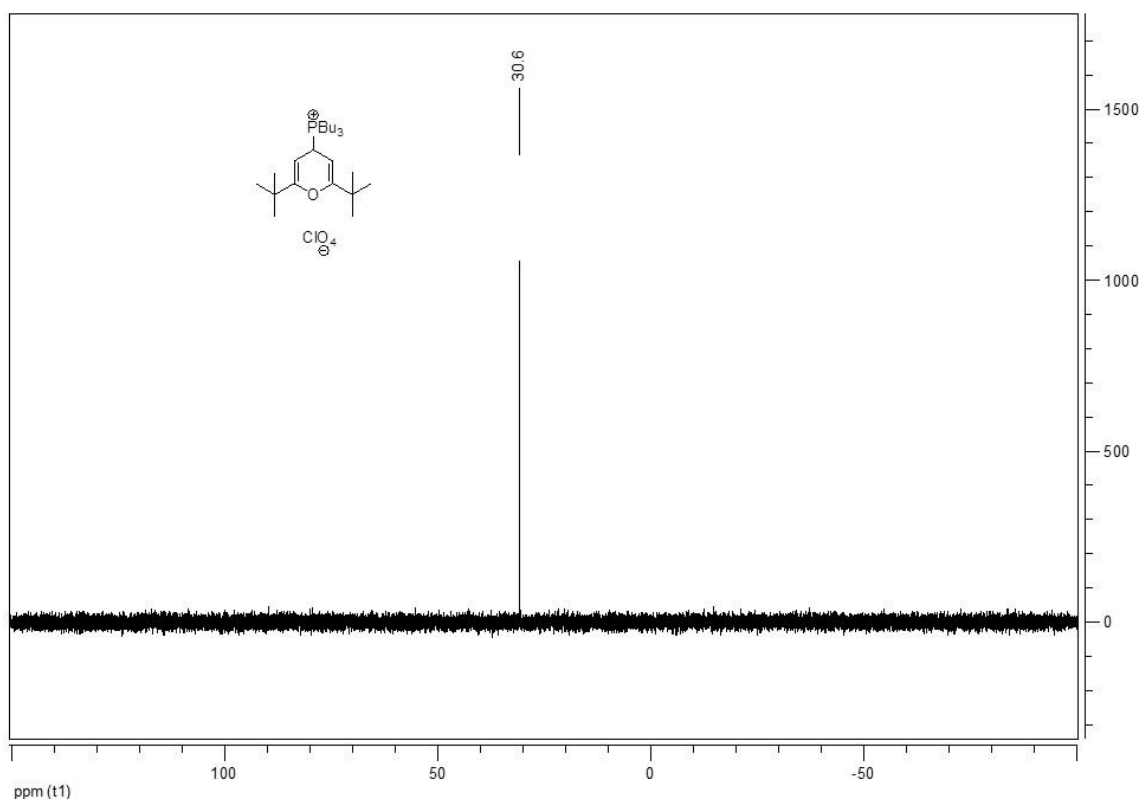


Figura 4: Espectro de MS (ESI<sup>+</sup>) del compuesto 1.



Figura 5: Espectro de <sup>1</sup>H-RMN del compuesto 2.Figura 6: Espectro de <sup>31</sup>P-RMN del compuesto 2.

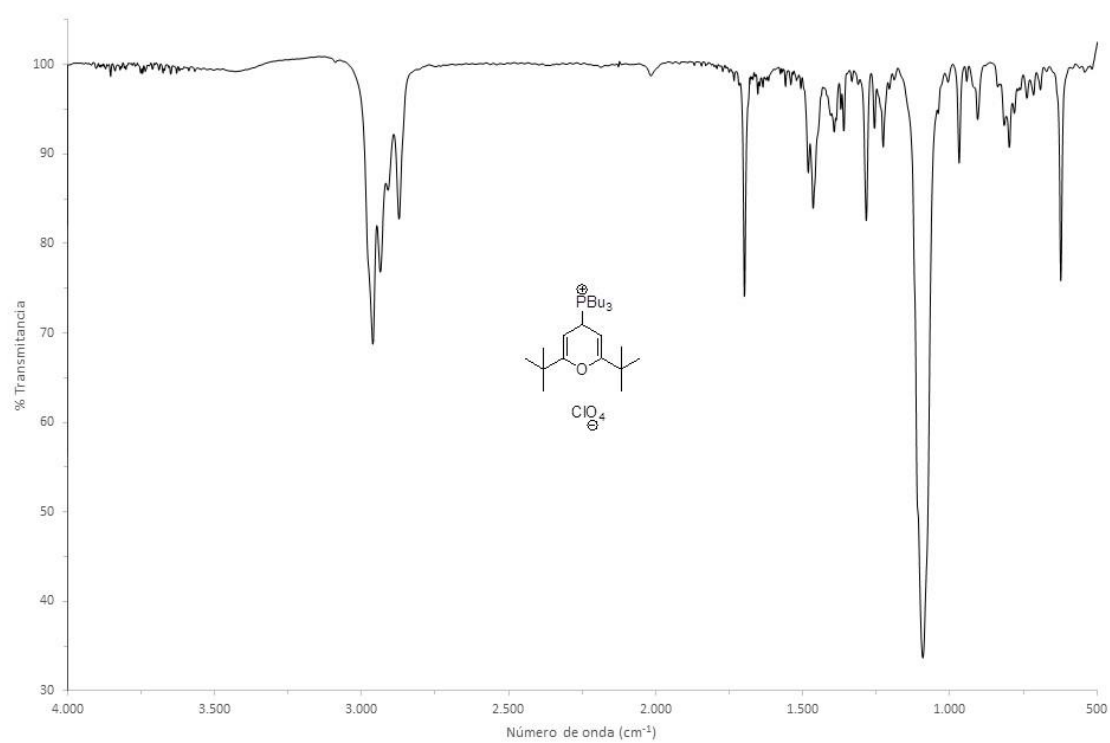


Figura 7: Espectro de IR del compuesto 2.

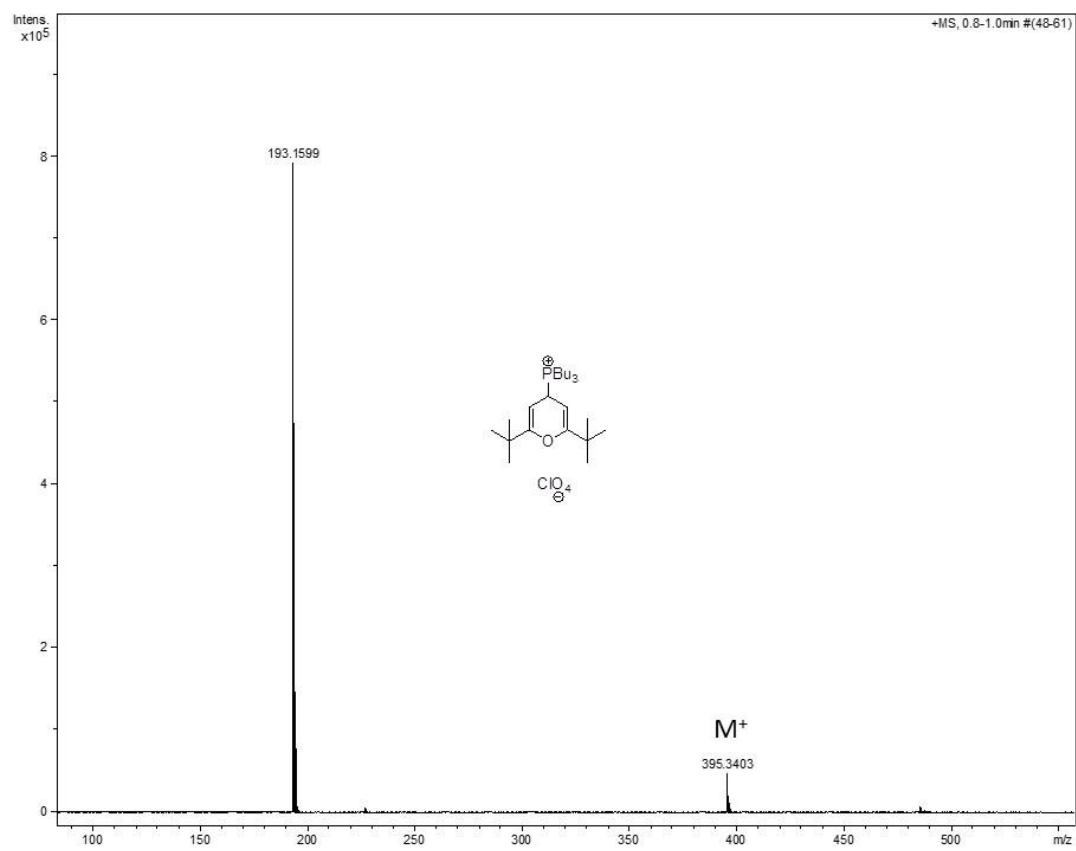


Figura 8: Espectro de MS (ESI<sup>+</sup>) del compuesto 2.

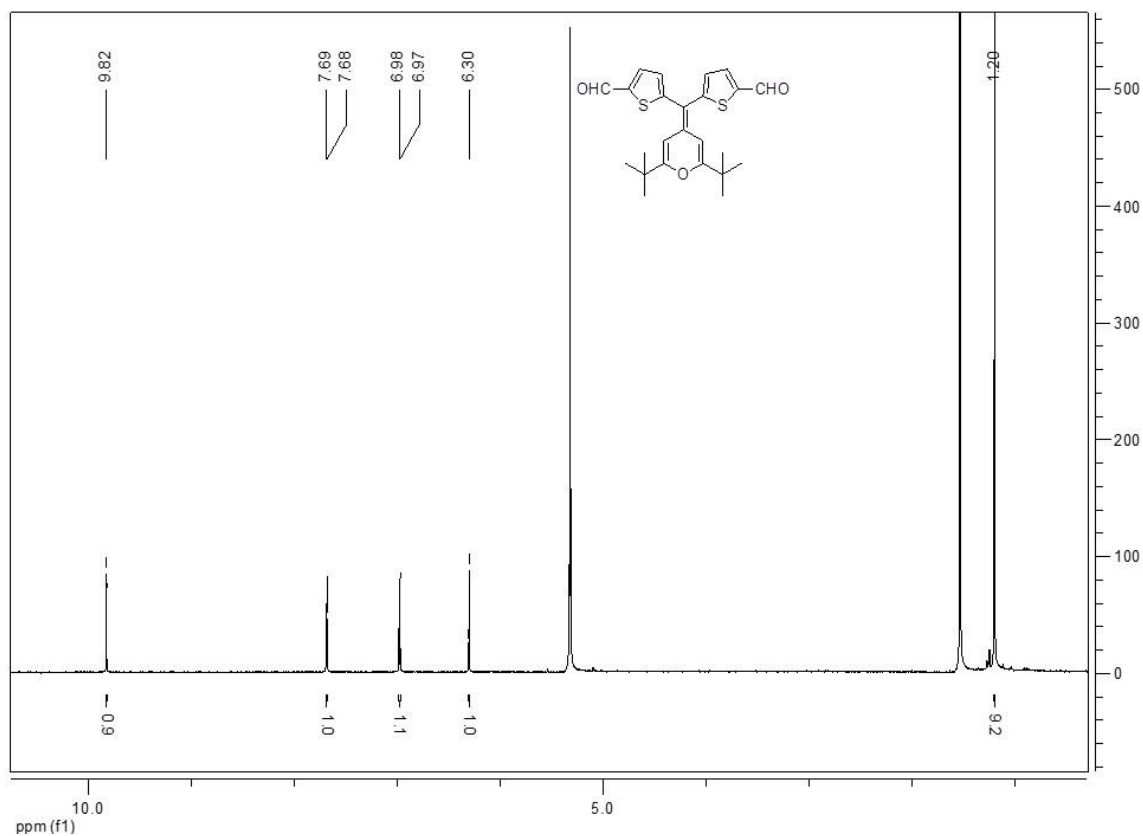


Figura 9: Espectro de <sup>1</sup>H-RMN del compuesto 3.

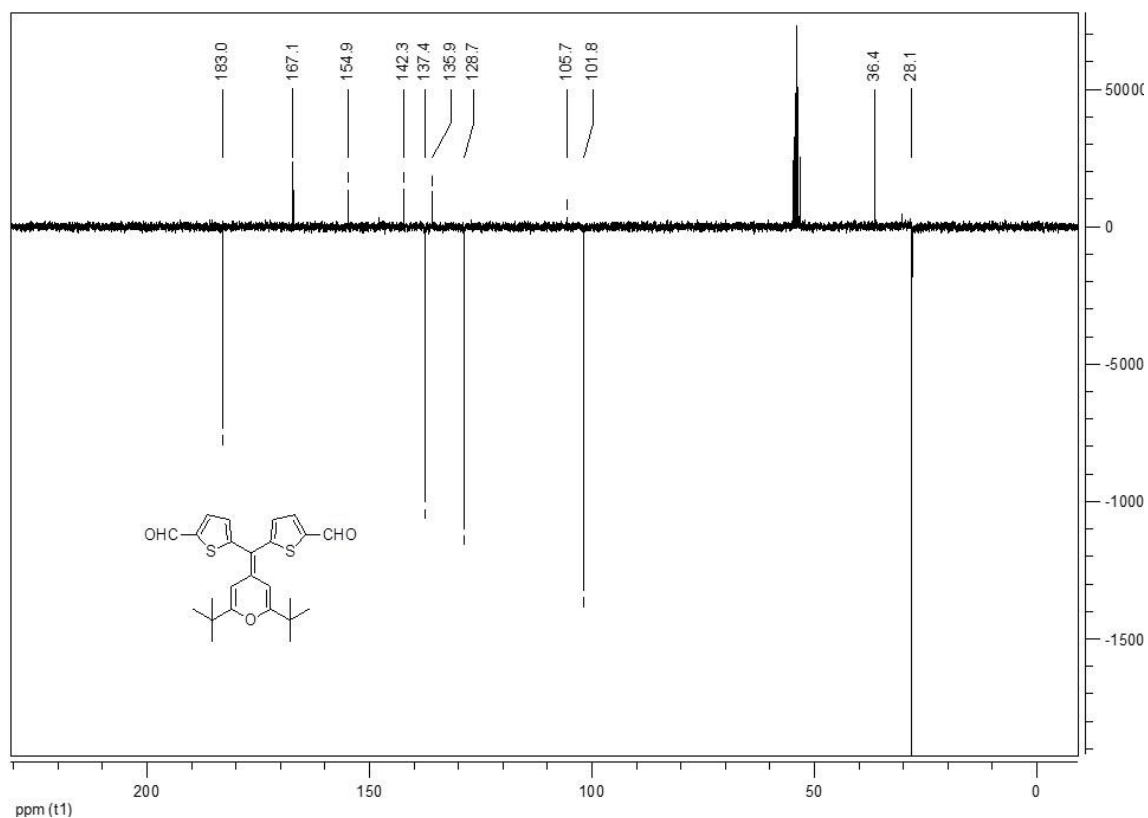


Figura 10: Espectro de <sup>13</sup>C-RMN del compuesto 3.

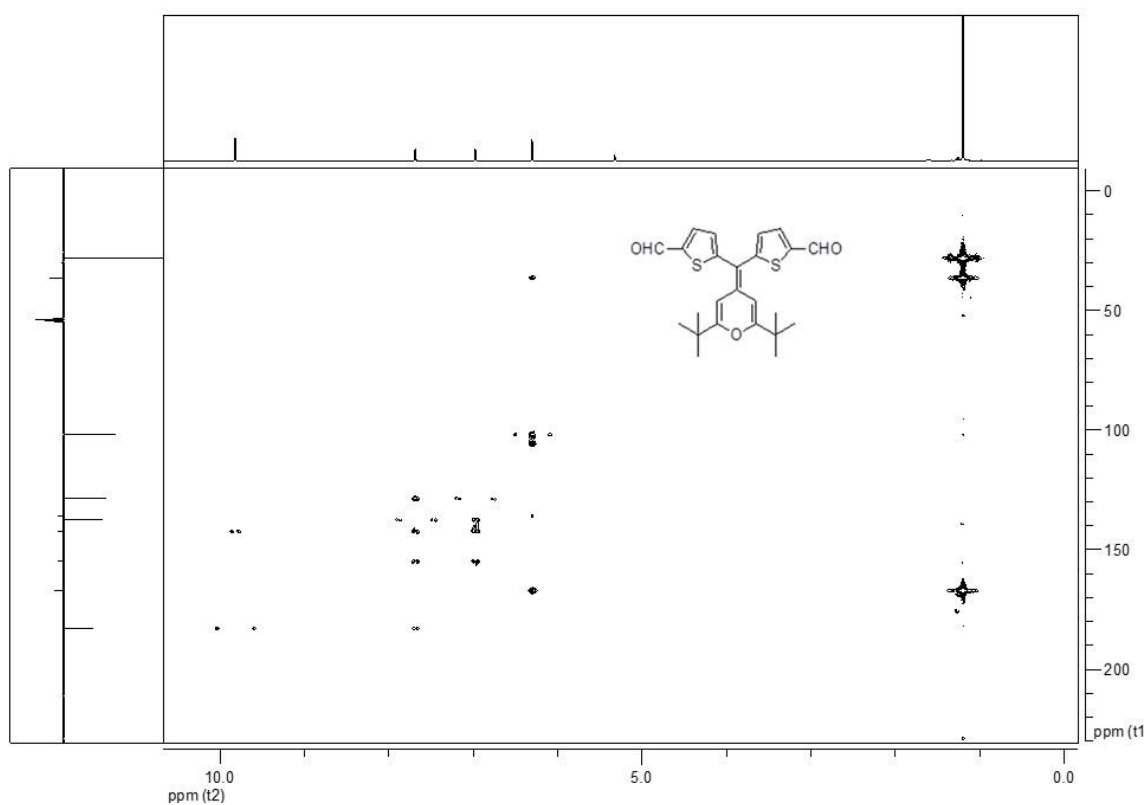


Figura 11: Espectro de  $^1\text{H}$  -  $^{13}\text{C}$  HSQC del compuesto 3.

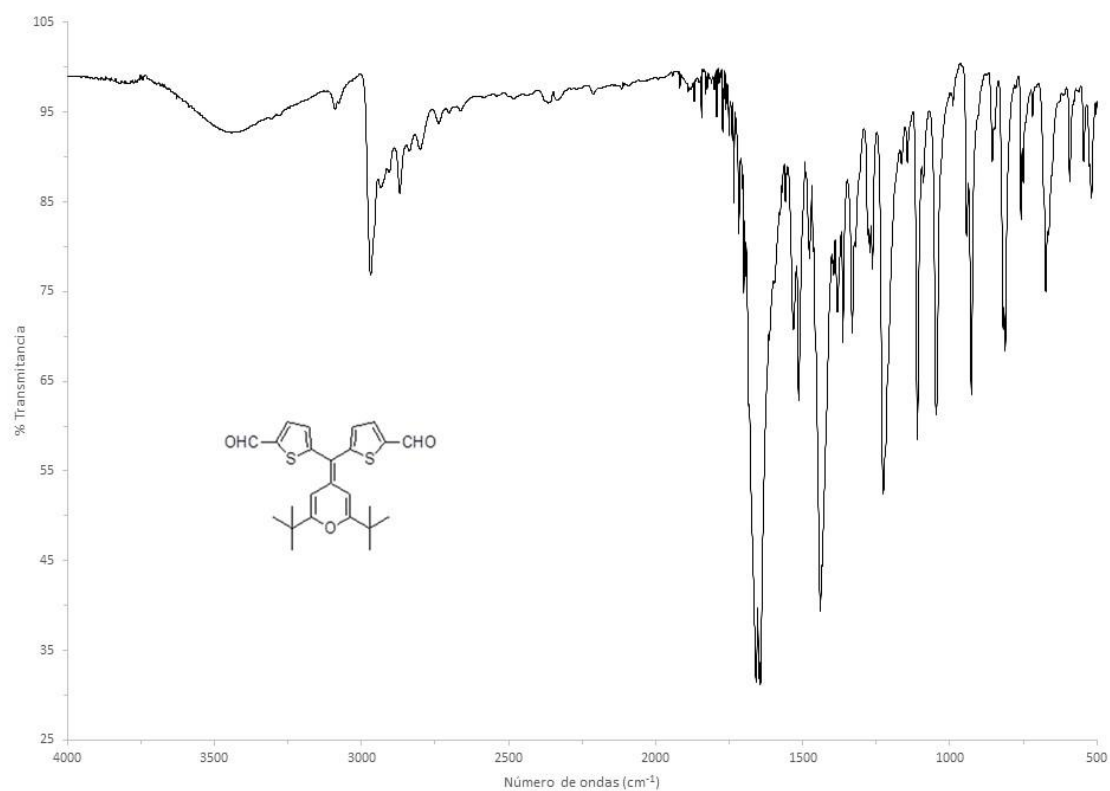


Figura 12: Espectro de IR del compuesto 3.

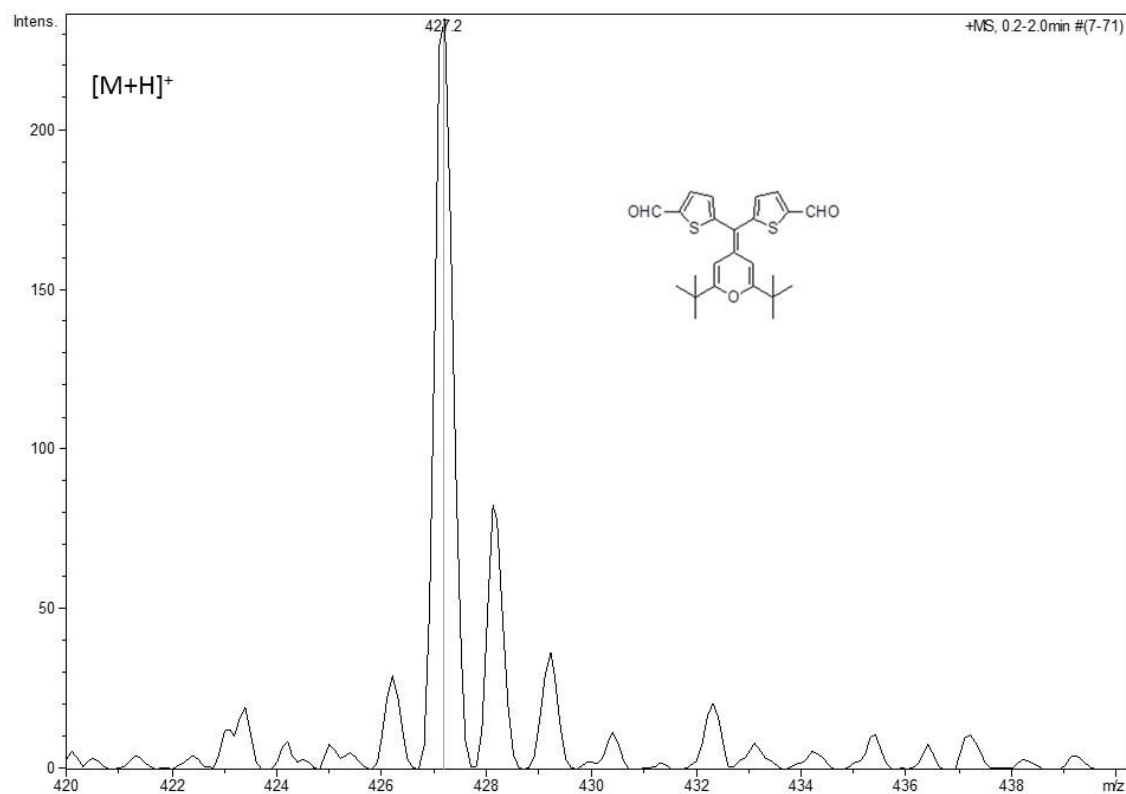


Figura 13: Espectro de MS (MALDI) del compuesto 3.

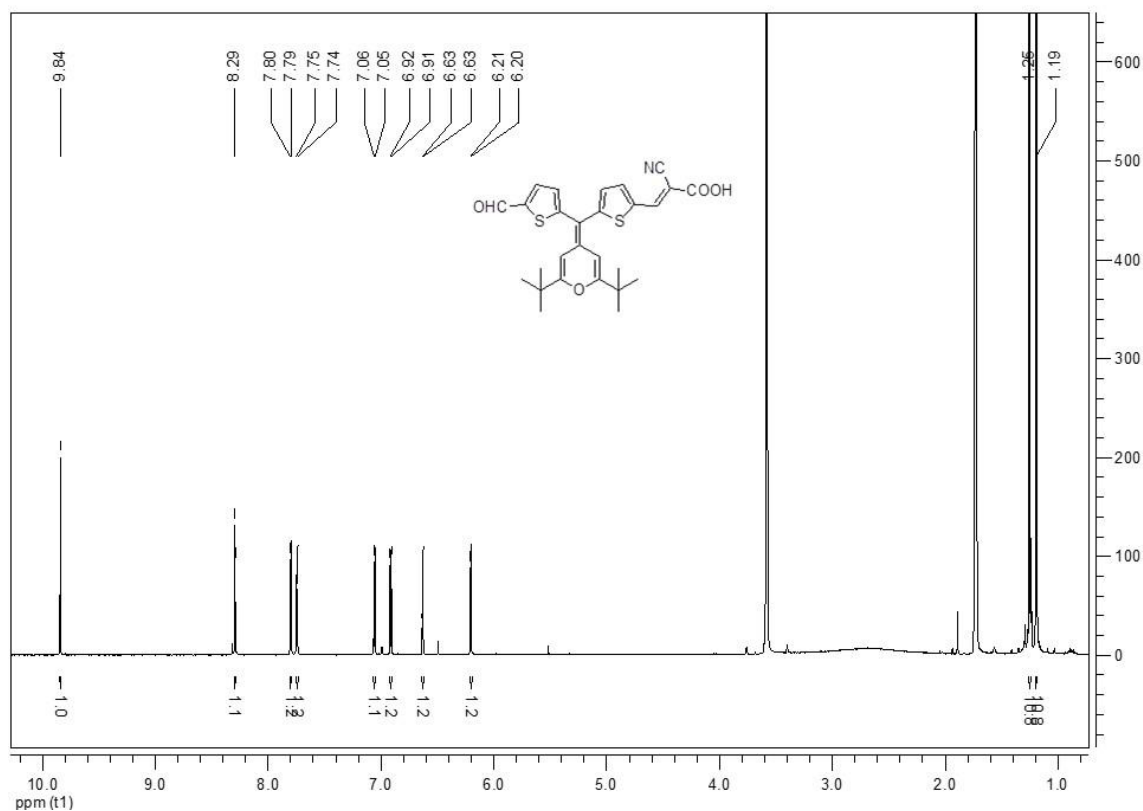
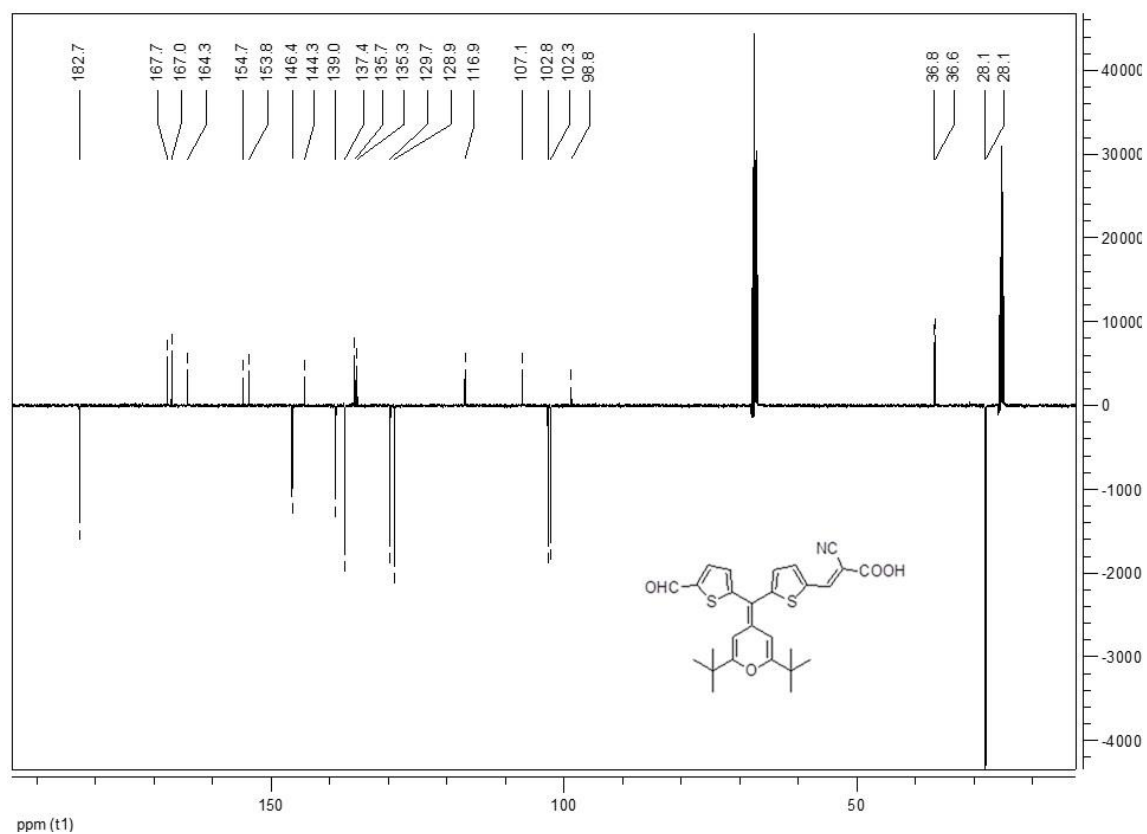
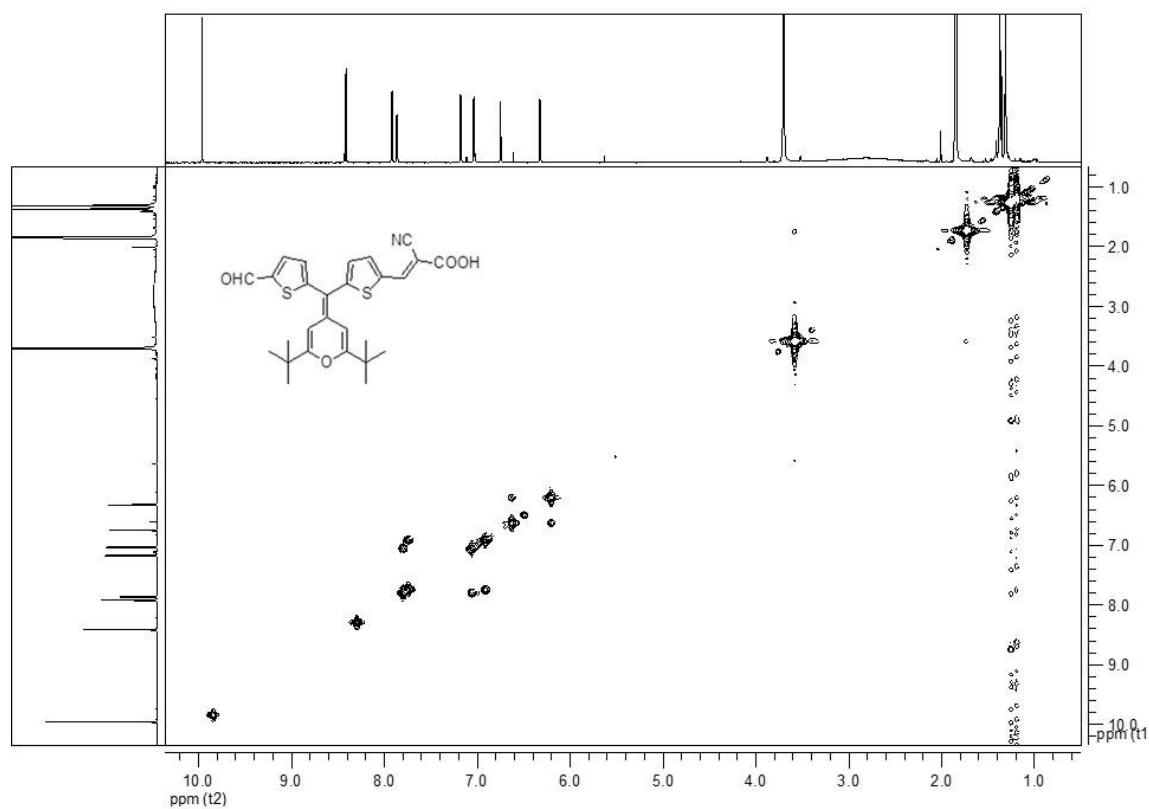


Figura 14: Espectro de  $^1\text{H}$ -RMN del compuesto 4.

Figura 15: Espectro de  $^{13}\text{C}$ -RMN del compuesto 4.Figura 16: Espectro de  $^1\text{H}$  -  $^1\text{H}$  COSY del compuesto 4.

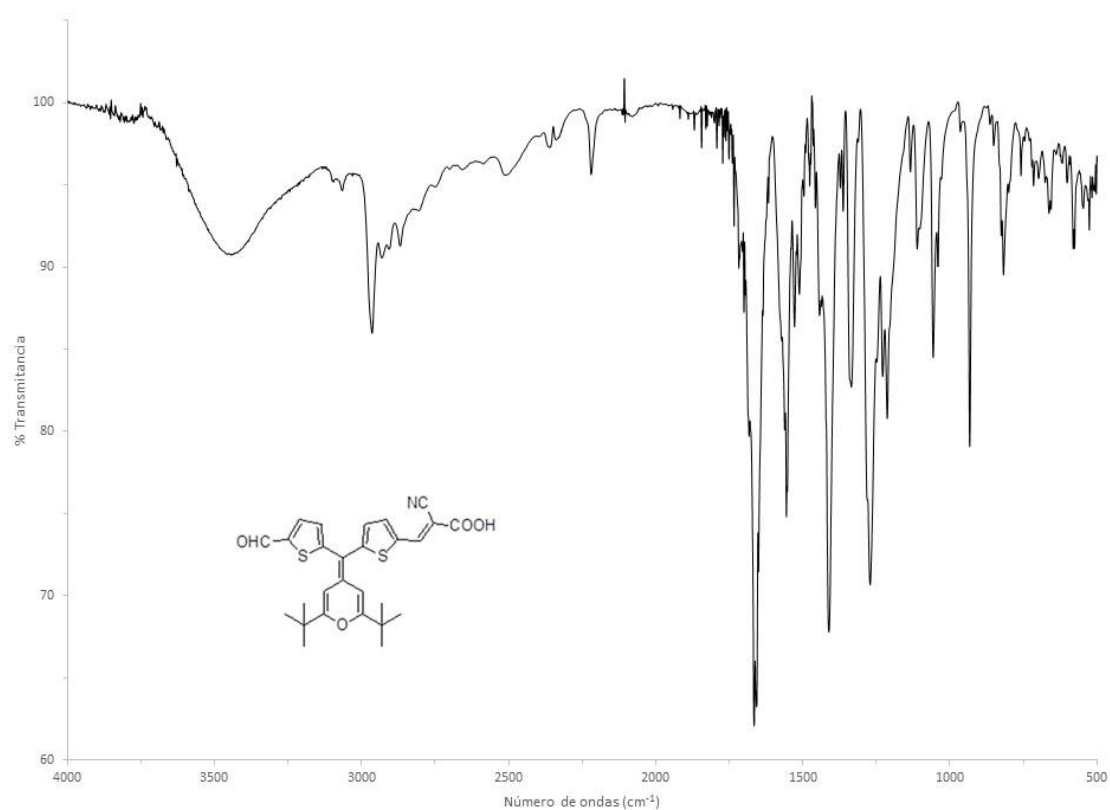


Figura 17: Espectro de IR del compuesto 4.

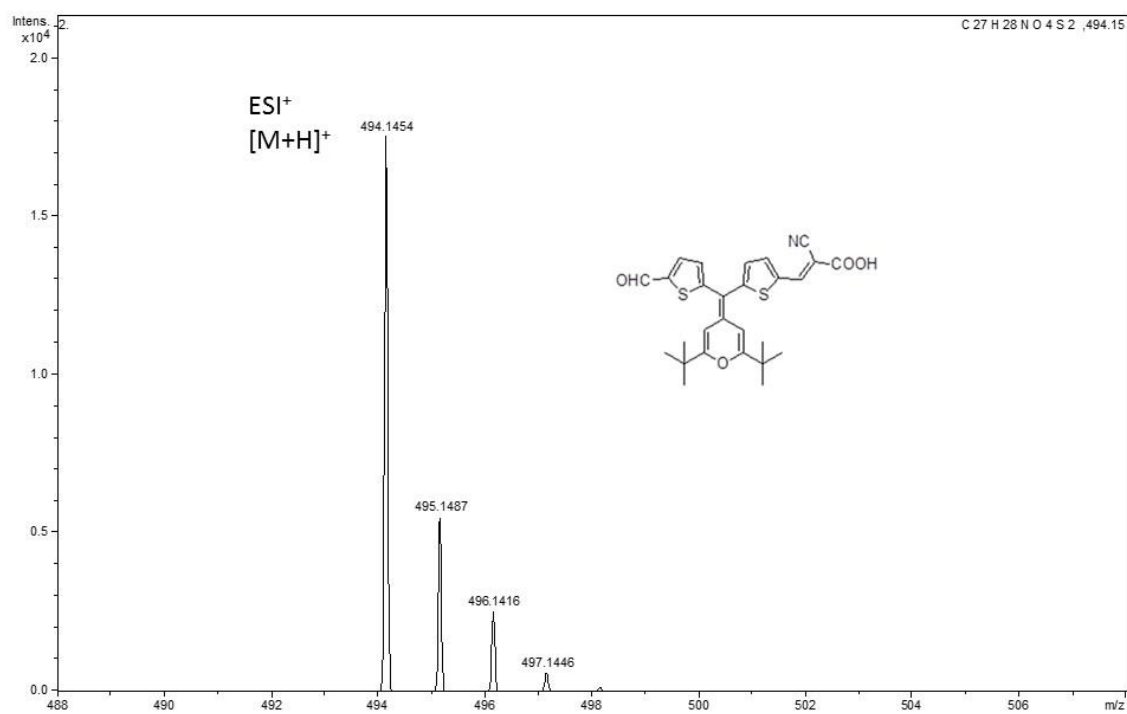


Figura 18: Espectro de MS (ESI<sup>+</sup>) del compuesto 4.

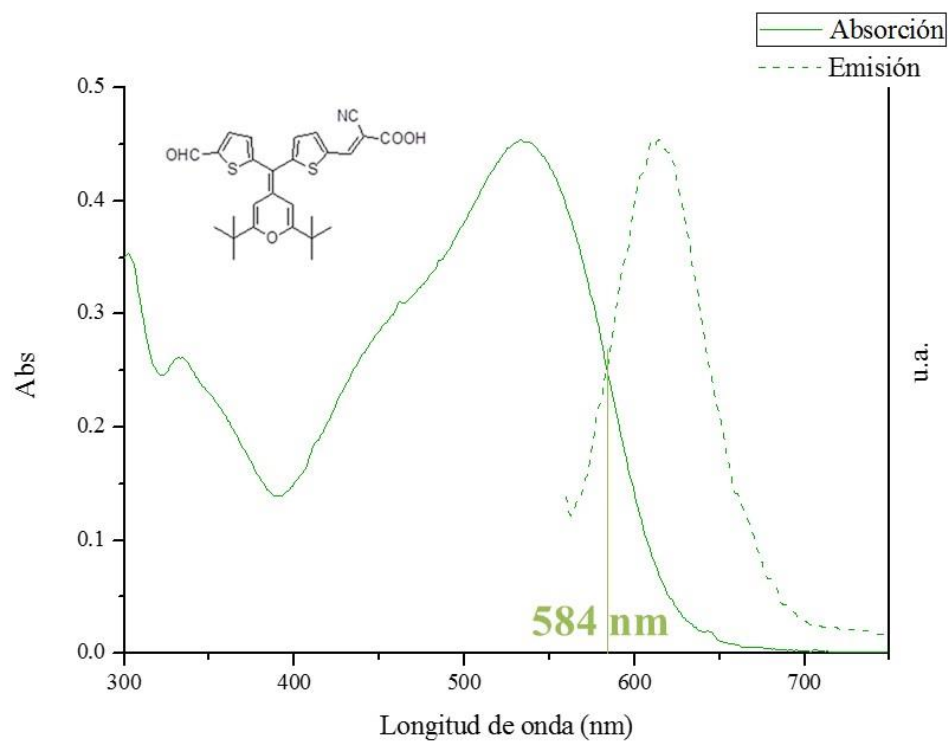


Figura 19: Espectro de absorción y emisión de UV-vis del compuesto 4.

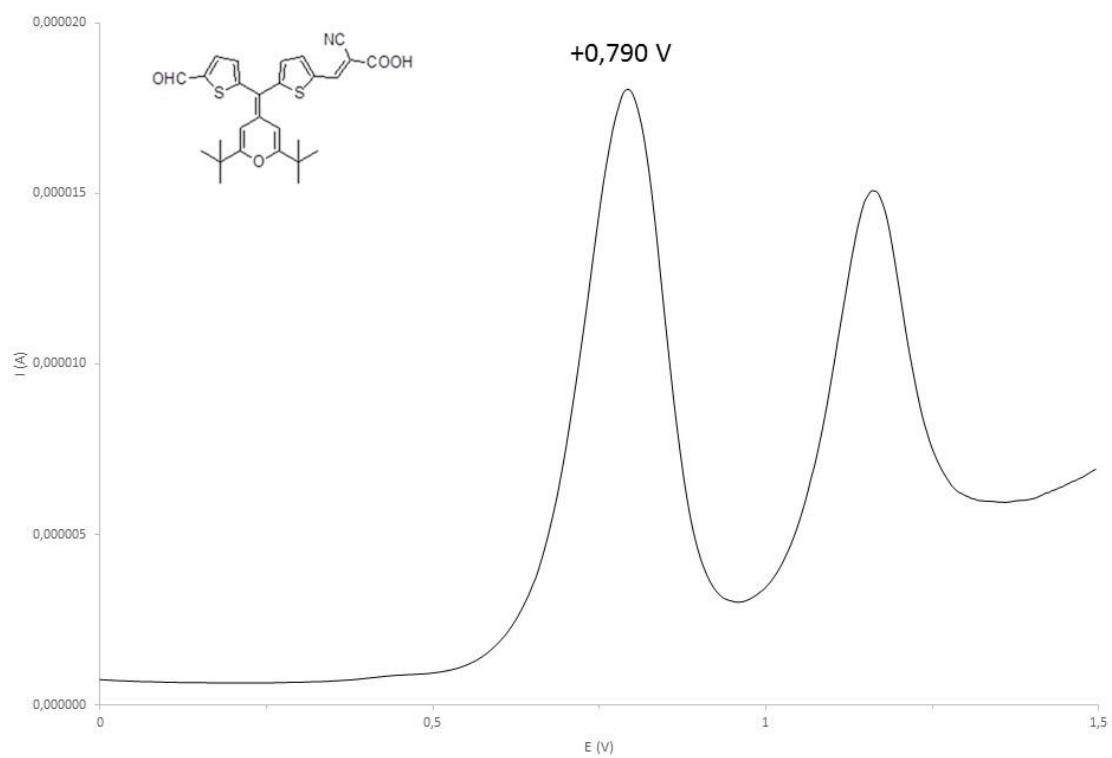
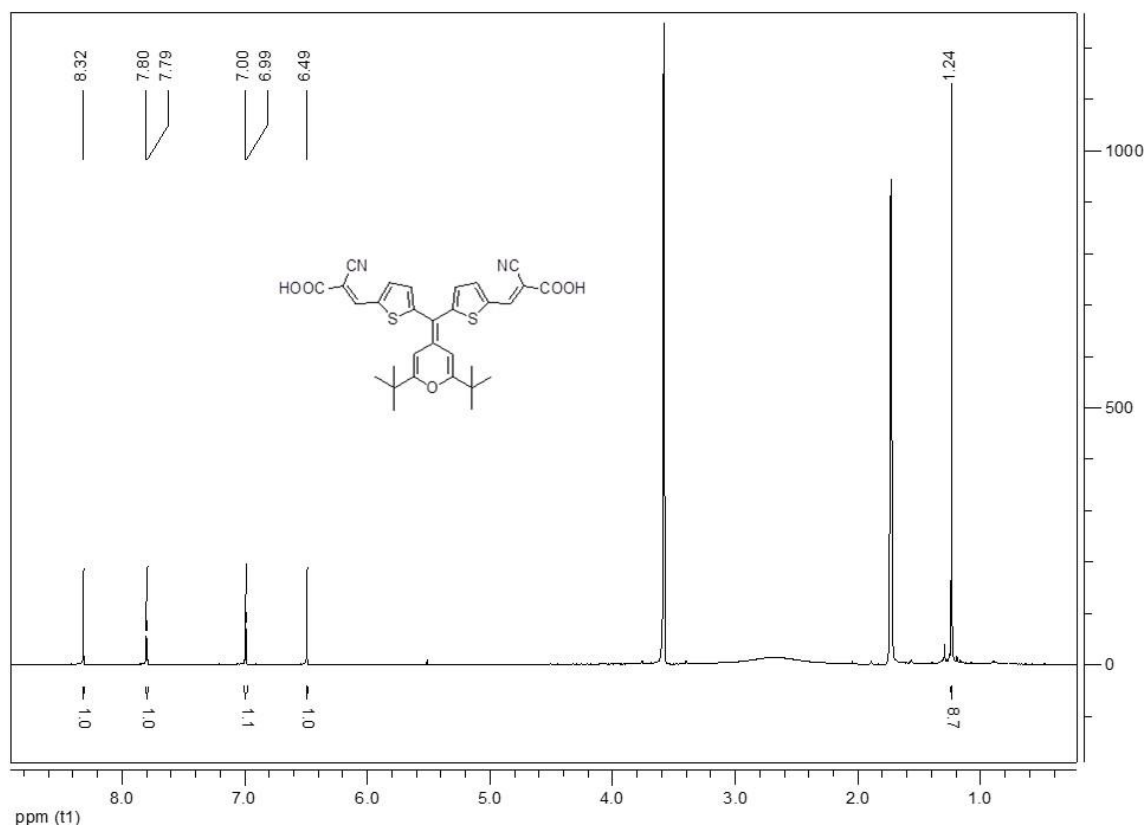
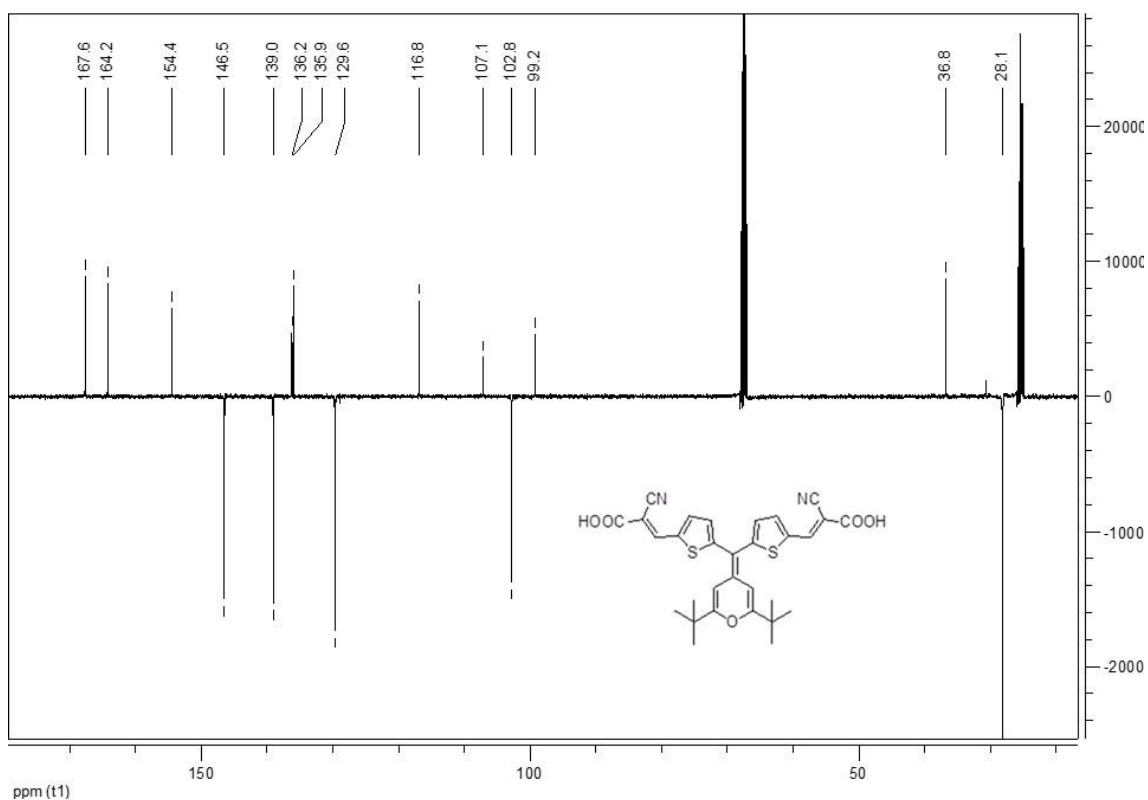


Figura 20: Voltagrama de pulso diferencial del compuesto 4.



Figura 21: Espectro de <sup>1</sup>H-RMN del compuesto 5.Figura 22: Espectro de <sup>13</sup>C-RMN del compuesto 5.

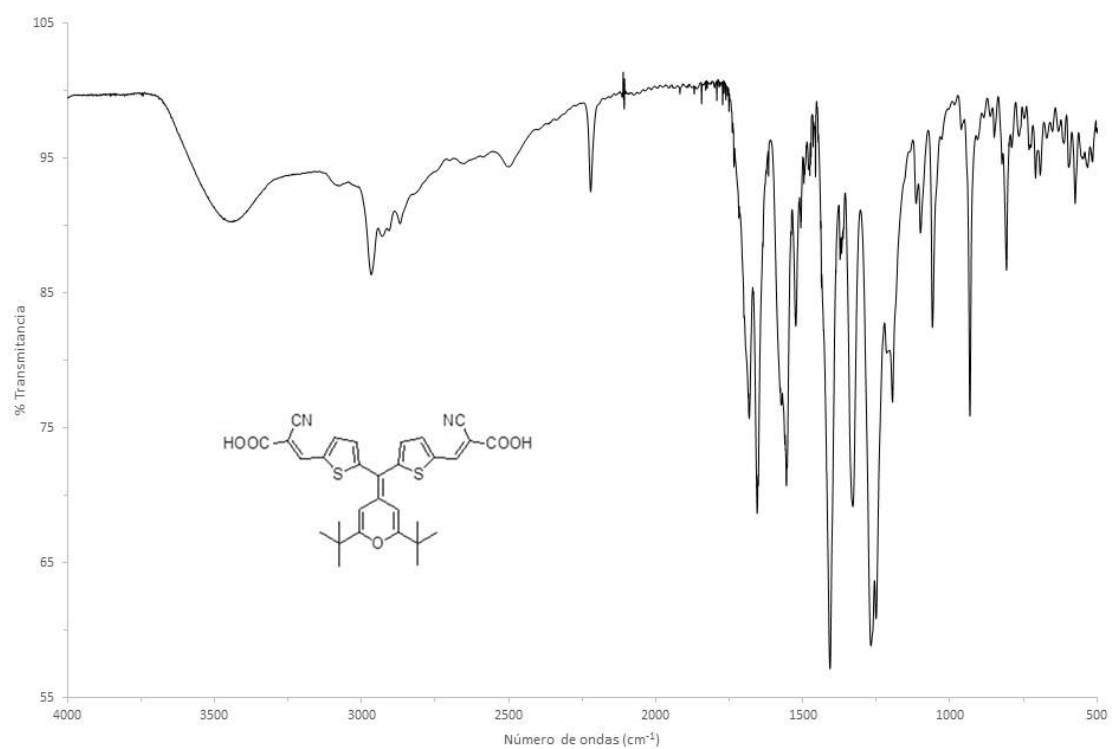
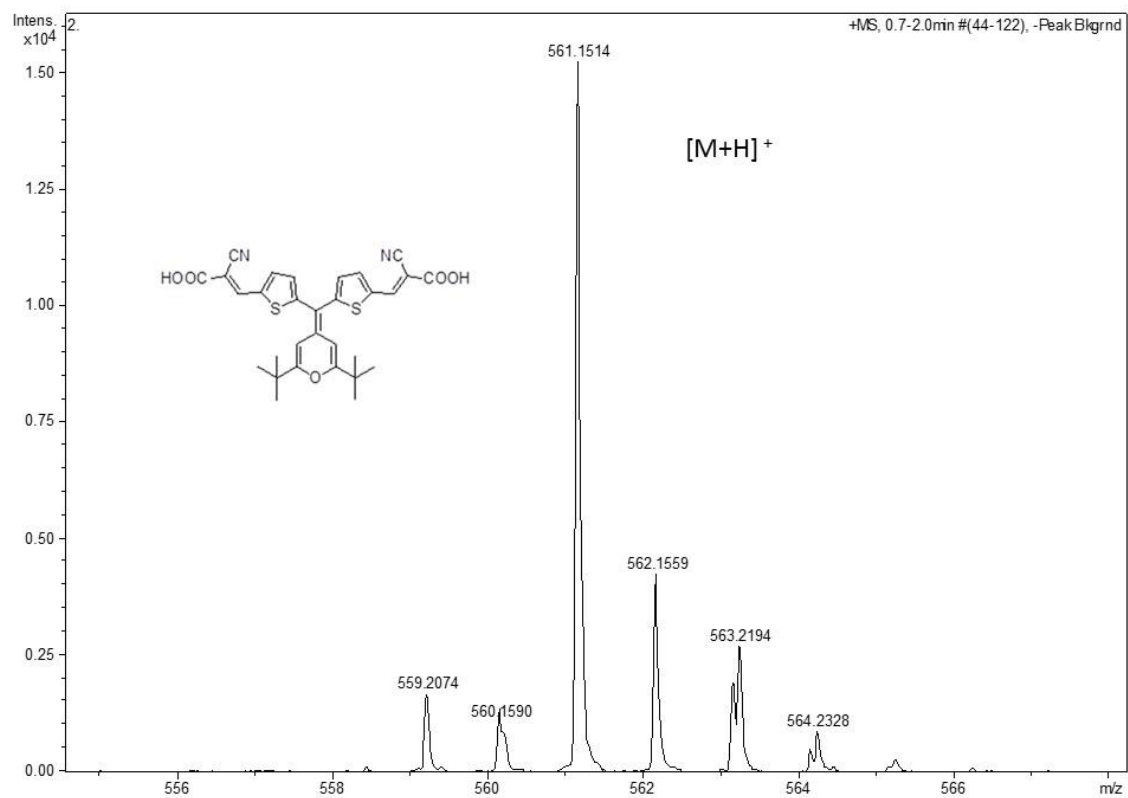


Figura 23: Espectro de IR del compuesto 5.

Figura 24: Espectro de MS (ESI<sup>+</sup>) del compuesto 5.

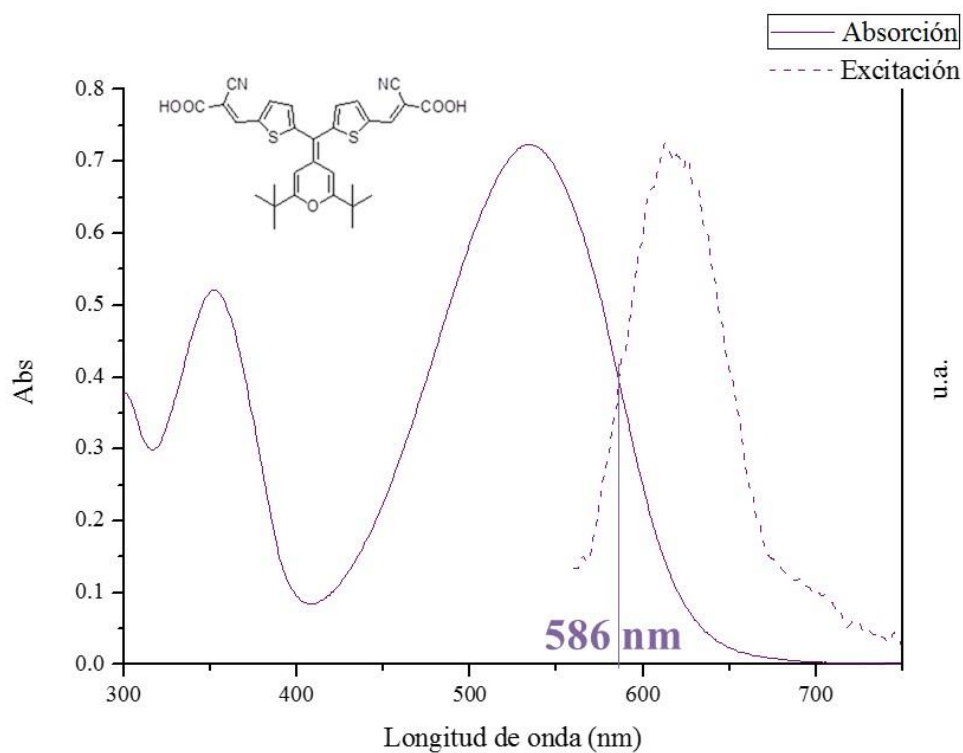


Figura 25: Espectro de absorción y emisión de UV-vis del compuesto 5.

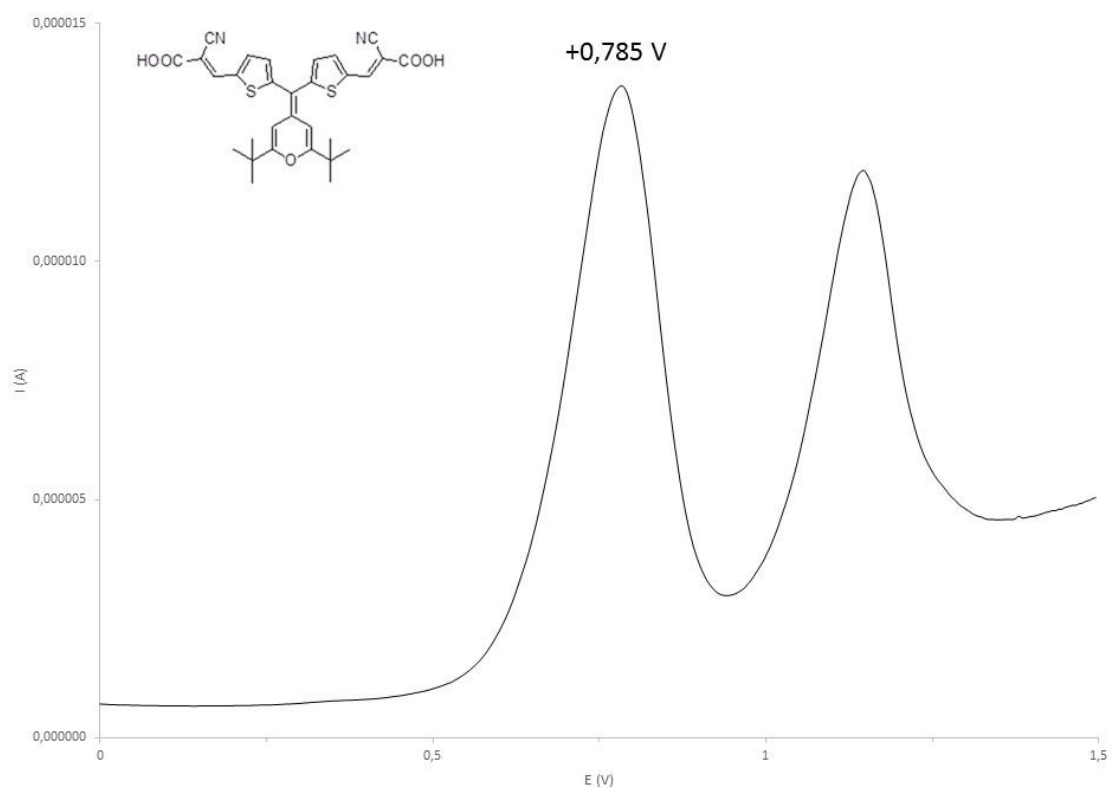
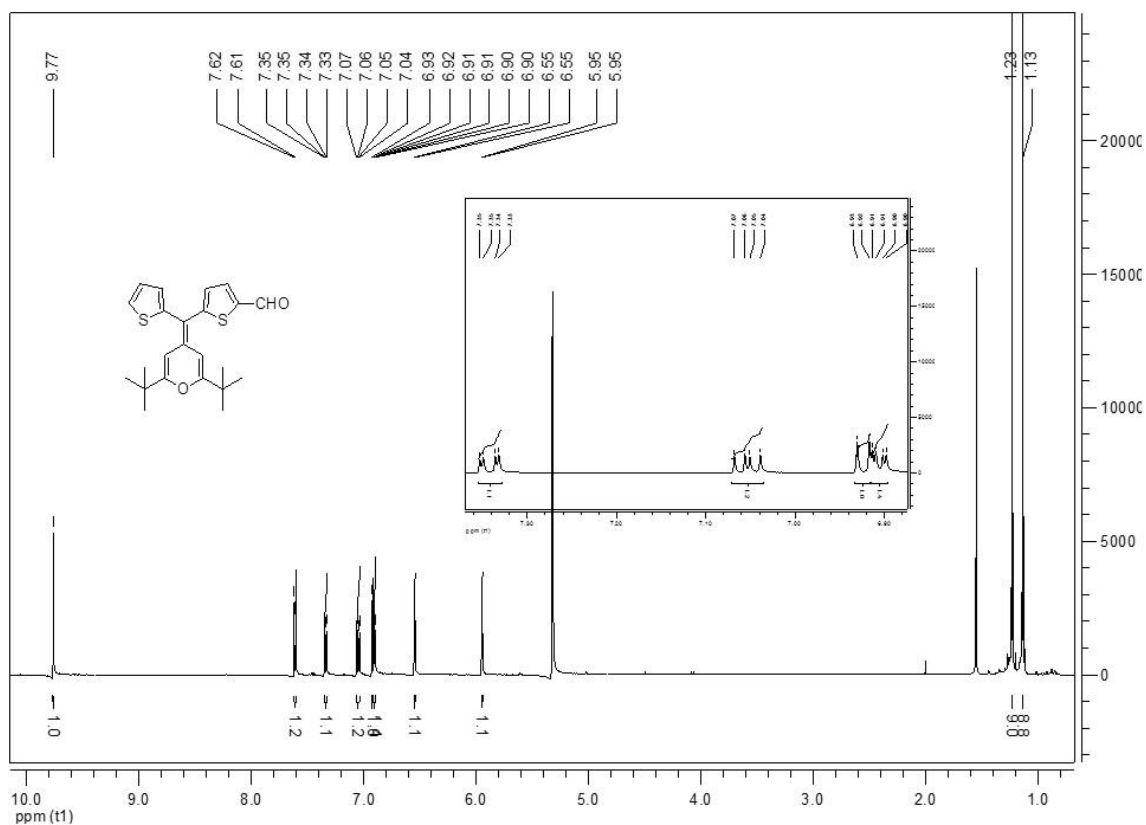
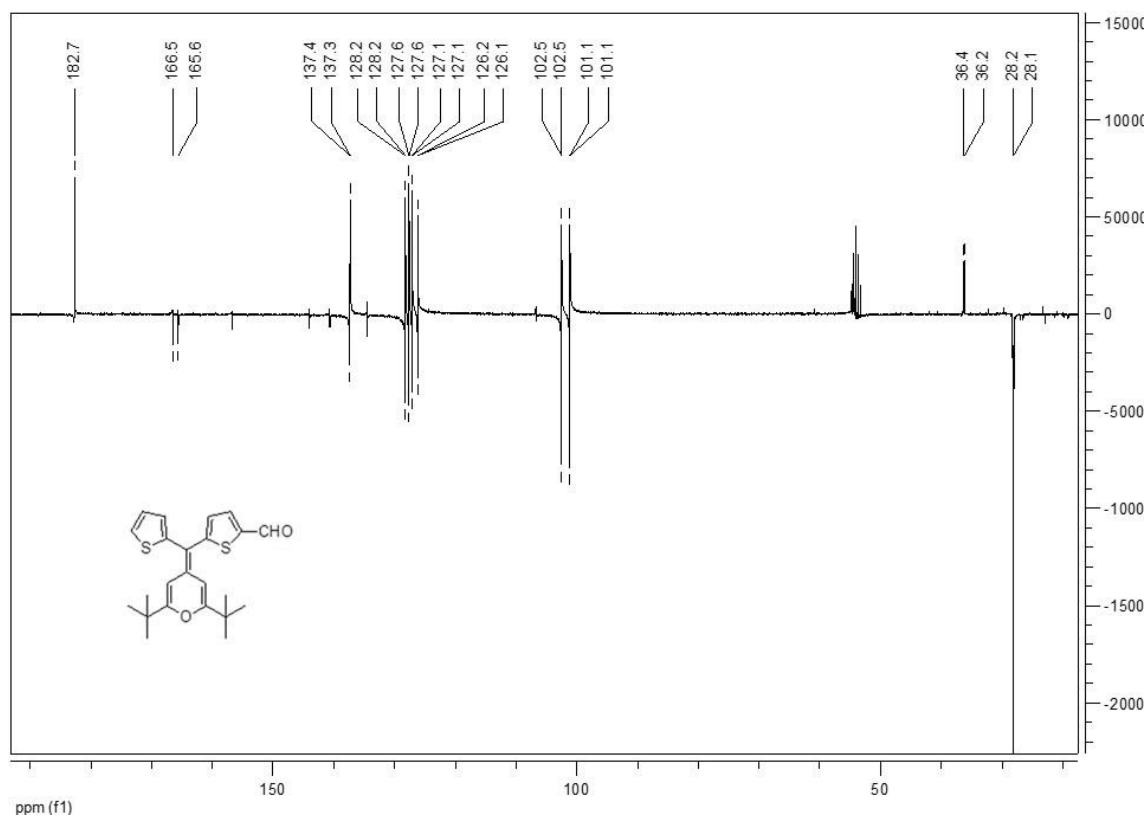


Figura 26: Voltograma de pulso diferencial del compuesto 5.

Figura 27: Espectro de  $^1\text{H}$ -RMN del compuesto 6.Figura 28: Espectro de  $^{13}\text{C}$ -RMN del compuesto 6.

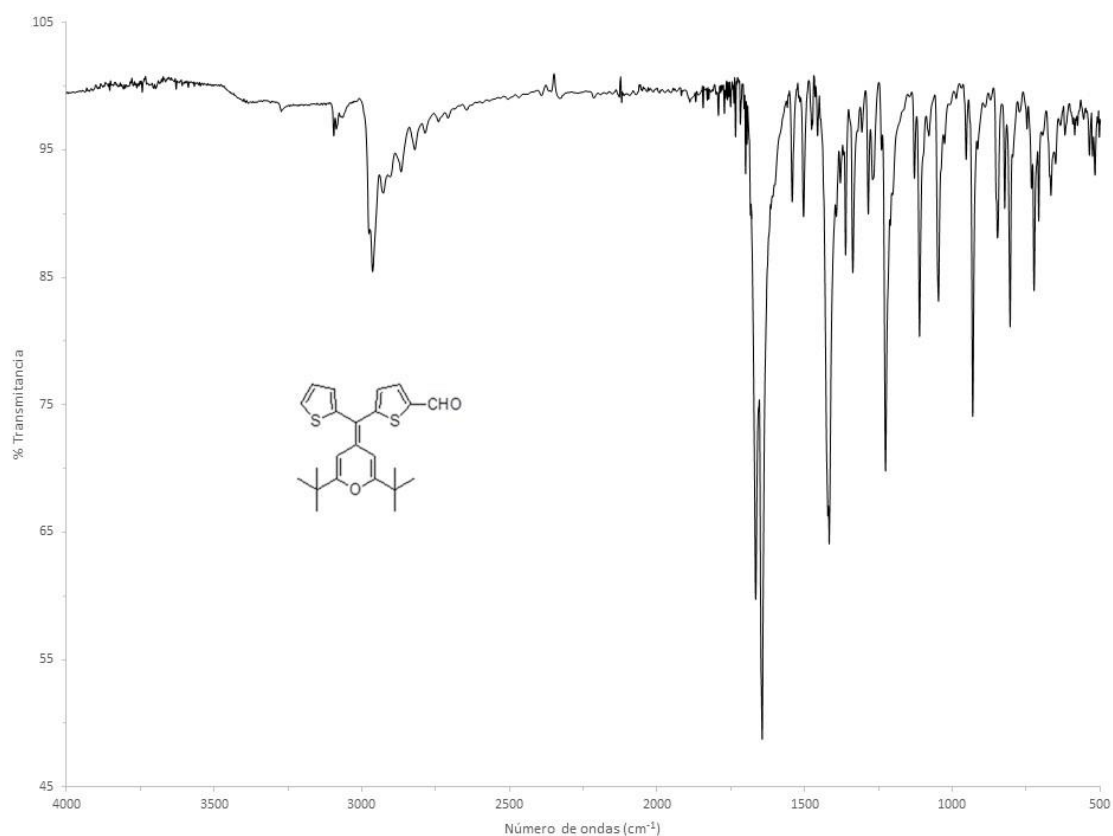


Figura 29: Espectro de IR del compuesto 6.

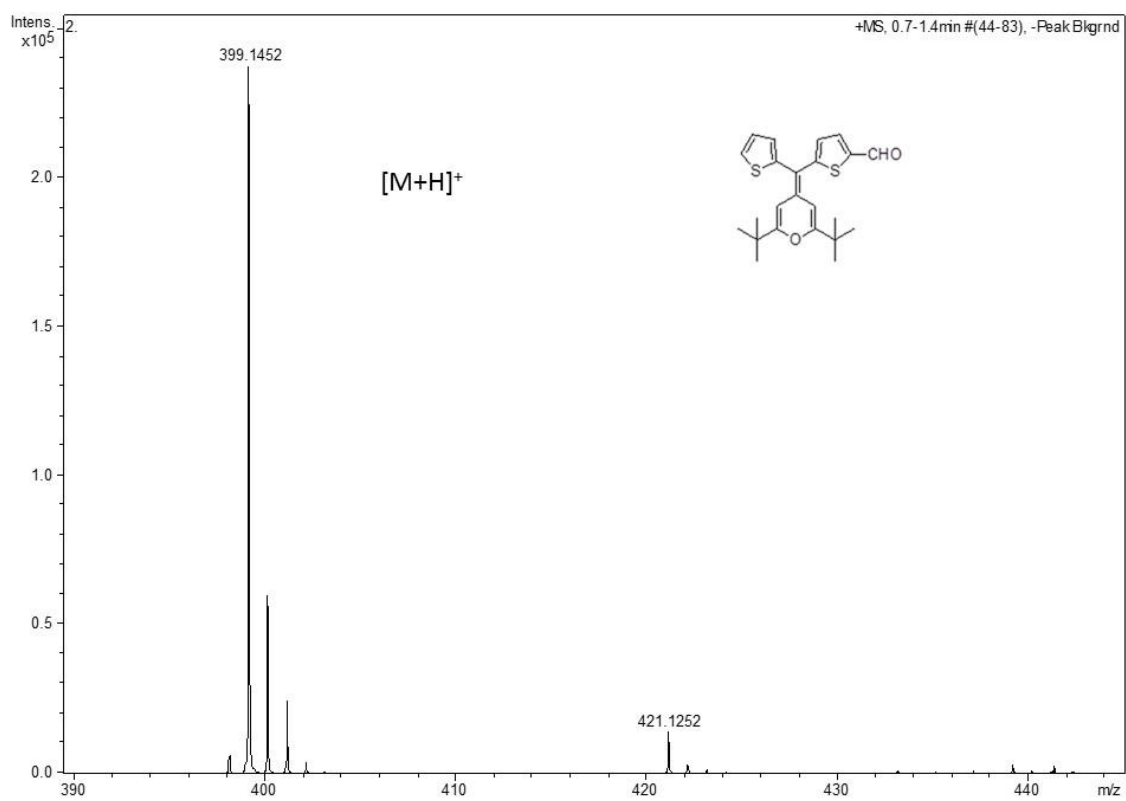


Figura 30: Espectro de MS (ESI<sup>+</sup>) del compuesto 6.



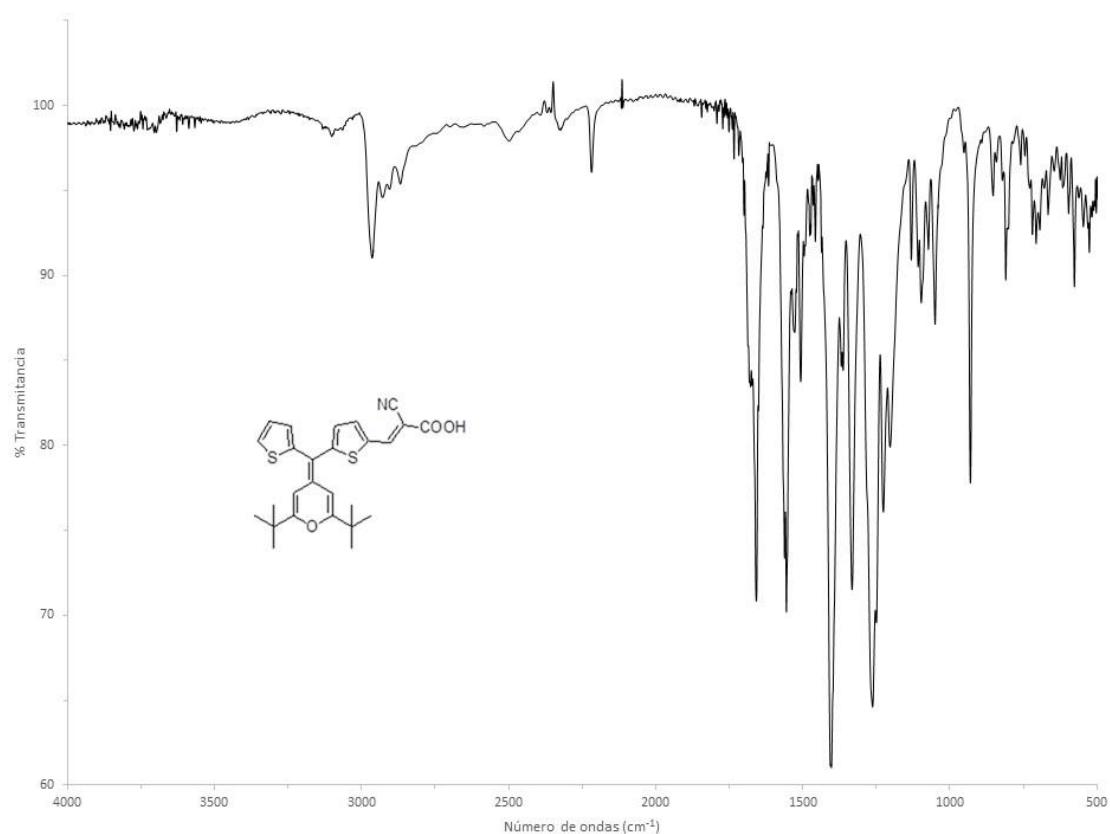


Figura 33: Espectro de IR del compuesto 7.

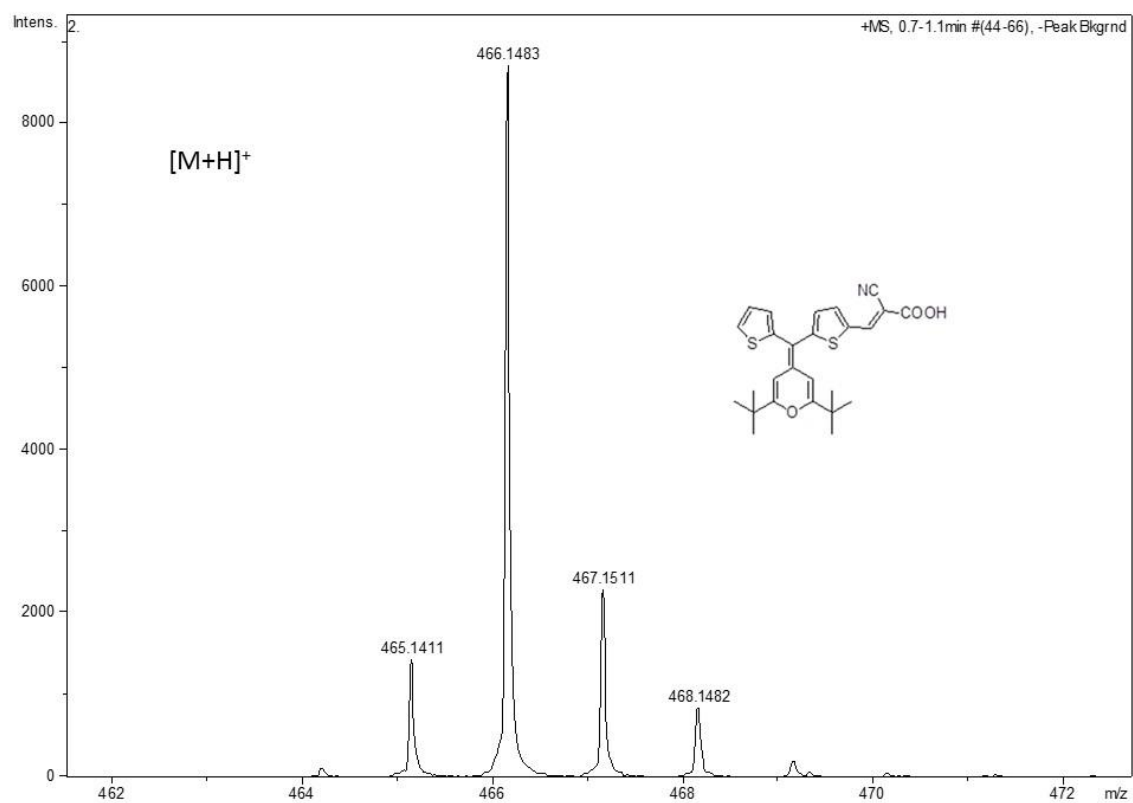


Figura 34: Espectro de MS (ESI<sup>+</sup>) del compuesto 7.

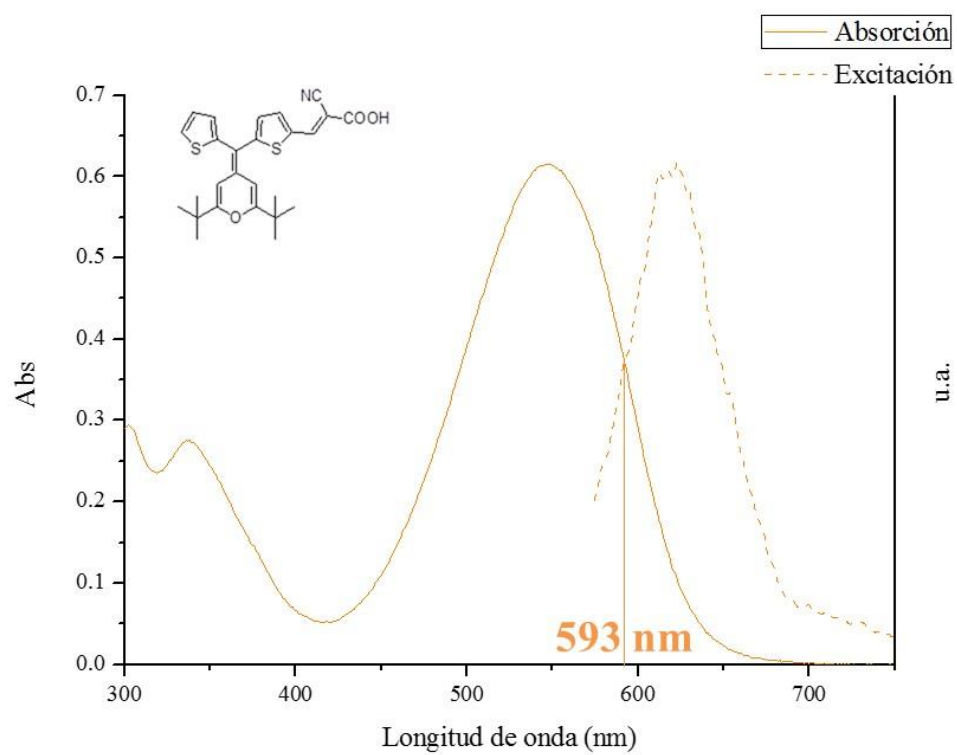


Figura 35: Espectro de absorción y emisión de UV-vis del compuesto 7.

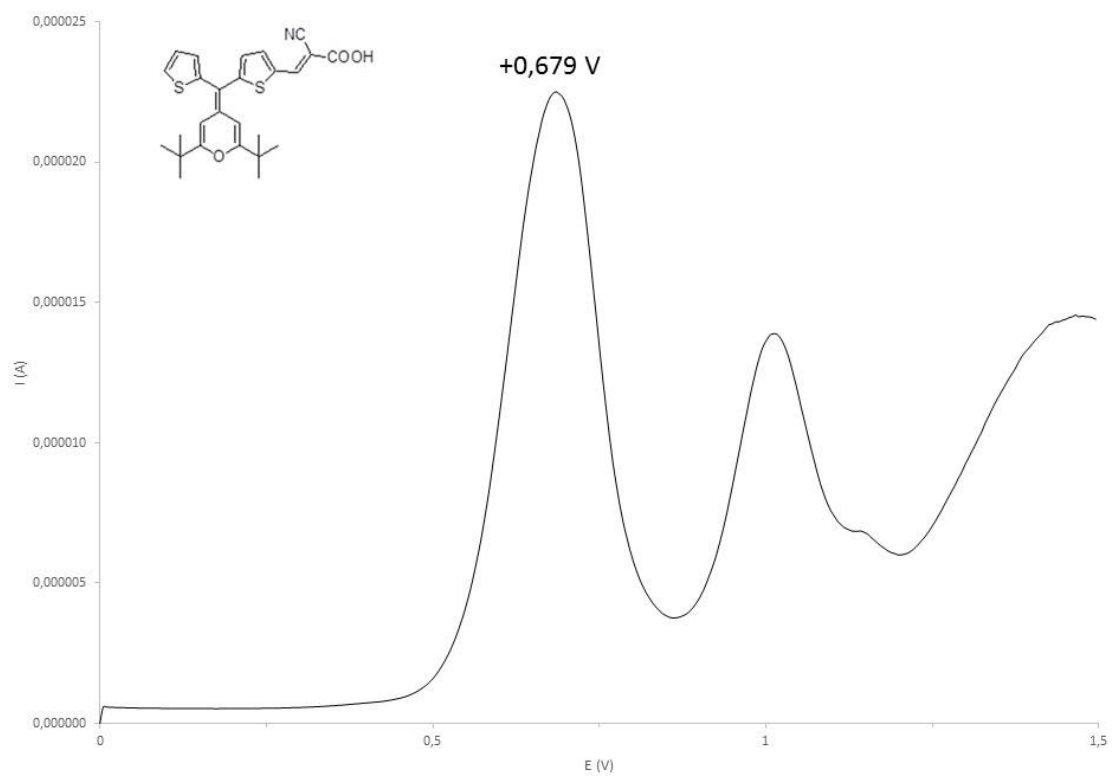


Figura 36: Voltograma de pulso diferencial del compuesto 7.