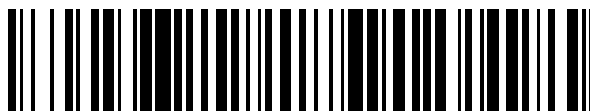


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 712 101**

51 Int. Cl.:

C07D 333/18 (2006.01)

C09K 11/00 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **22.07.2014** **PCT/IB2014/063308**

87 Fecha y número de publicación internacional: **05.02.2015** **WO15015368**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **22.07.2014** **E 14759320 (6)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **21.11.2018** **EP 3027596**

54 Título: **Compuestos que contienen una unidad de pentaleno y procedimiento para su preparación**

30 Prioridad:

31.07.2013 IT MI20131295

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

09.05.2019

73 Titular/es:

**ENI S.P.A. (100.0%)
Piazzale E. Mattei 1
00144 Roma, IT**

72 Inventor/es:

**BIANCHI, GABRIELE y
SCHIMPERNA, GIULIANA**

74 Agente/Representante:

ELZABURU, S.L.P

Observaciones:

**Véase nota informativa (Remarks, Remarques o
Bemerkungen) en el folleto original publicado por
la Oficina Europea de Patentes**

ES 2 712 101 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Compuestos que contienen una unidad de pentaleno y procedimiento para su preparación

La presente invención se refiere a un compuesto que contiene una unidad de pentaleno.

Más específicamente, la presente invención se refiere a un compuesto que contiene una unidad de pentaleno sustituido con grupos alcoxi.

La presente invención también se refiere a un procedimiento para la preparación de dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno por medio de una reacción de homocoplación reductora de un compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado sustituido en posición orto con un grupo aril-alquino o heteroaril-alquino en presencia de un catalizador que contiene paladio.

Dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno, como tal o después de una funcionalización y polimerización apropiadas, se puede usar ventajosamente en la construcción de dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) tales como, por ejemplo, células fotovoltaicas (o células solares), módulos fotovoltaicos (o módulos solares) o sobre soportes tanto rígidos como flexibles. Dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno también se puede usar ventajosamente como una unidad constitutiva de concentradores solares luminiscentes (LSCs). Además, dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno se puede usar ventajosamente como precursor de unidades monoméricas en la preparación de polímeros semiconductores.

Los dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) son capaces de convertir la energía de una radiación luminosa en energía eléctrica. En la actualidad, la mayoría de los dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) que se pueden usar para aplicaciones prácticas, explotan las propiedades quimicofísicas de materiales fotoactivos del tipo inorgánico, en particular el silicio cristalino de alta pureza. Sin embargo, como resultado de los altos costes de producción del silicio, la investigación científica ha estado orientando sus esfuerzos hacia el desarrollo de materiales alternativos de tipo orgánico que tengan una estructura conjugada, oligomérica o polimérica, para obtener dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) orgánicos tales como, por ejemplo, células fotovoltaicas (o células solares) orgánicas. A diferencia del silicio cristalino de alta pureza, de hecho, dichos materiales del tipo orgánico se caracterizan por una relativa facilidad de síntesis, un bajo coste de producción, un peso reducido de los dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) orgánicos relacionados, y también permiten el reciclaje de dichos materiales de tipo orgánico al final del ciclo de vida del dispositivo fotovoltaico (o dispositivo solar) orgánico en el que se usan.

Las ventajas indicadas anteriormente hacen que el uso de dichos materiales de tipo orgánico sea interesante desde el punto de vista energético y económico, a pesar de las posibles eficiencias (η) más bajas de los dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) orgánicos obtenidos de este modo con respecto a los dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) inorgánicos.

El funcionamiento de los dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) orgánicos tales como, por ejemplo, células fotovoltaicas (o células solares) orgánicas, se basa en el uso combinado de un compuesto aceptor de electrones y un compuesto dador de electrones. En el estado de la técnica, los compuestos aceptores de electrones más ampliamente usados en dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) orgánicos son derivados de fullereno, en particular PC61BM (éster metílico del ácido 6,6-fenil-C₆₁-butírico) o PC71BM (éster metílico del ácido 6',6-fenil-C₇₁-butírico), que han alcanzado las mayores eficiencias cuando se mezclan con compuestos dadores de electrones seleccionados de polímeros π -conjugados tales como, por ejemplo, politiofenos ($\eta > 5\%$), policarbazoles ($\eta > 6\%$), derivados de poli-(tienotiofeno)-benzoditiofeno (PTB) ($\eta > 8\%$).

El procedimiento básico de conversión de la luz en corriente eléctrica en una célula fotovoltaica (o célula solar) orgánica tiene lugar por medio de las siguientes etapas:

1. absorción de un fotón en la parte del compuesto dador de electrones con la formación de un excitón, es decir, un par de "electrón-hueco electrónico (o hueco)"; transportadores de carga;

2. difusión del excitón en una región del compuesto dador de electrones hasta la interfase con el compuesto aceptor de electrones;

3. disociación del excitón en los dos transportadores de carga: electrón (-) en la fase aceptora (es decir, en el compuesto aceptor de electrones) y hueco electrónico [(o hueco (+)) en la fase dadora (es decir, en el compuesto dador de electrones);

4. transporte de las cargas formadas de este modo al cátodo (electrón, por medio del compuesto aceptor de electrones) y al ánodo [hueco electrónico (o hueco) por medio del compuesto dador de electrones], con la generación de una corriente eléctrica en el circuito de la célula fotovoltaica (o célula solar) orgánica.

El procedimiento de fotoabsorción con la formación del excitón y la subsecuente cesión del electrón al compuesto aceptor de electrones conduce a la excitación de un electrón desde el orbital molecular ocupado más alto (HOMO, del inglés "Highest Occupied Molecular Orbital") hasta el orbital molecular no ocupado más bajo (LUMO, del inglés "Lowest Unoccupied Molecular Orbital") del compuesto dador de electrones, y subsecuentemente el paso de este al LUMO del compuesto aceptor de electrones.

Como la eficiencia de una célula fotovoltaica (o célula solar) orgánica depende del número de electrones libres que se generan por disociación de los excitones que, a su vez, se pueden correlacionar directamente con el número de fotones absorbidos, una de las características estructurales de los compuestos dadores de electrones que influyen principalmente en dicha eficiencia es la diferencia de energía existente entre los orbitales HOMO y LUMO del compuesto dador de electrones, es decir, la denominada banda prohibida. El valor de longitud de onda máxima al que el compuesto dador de electrones es capaz de recoger y convertir efectivamente los fotones en energía eléctrica, es decir, el proceso denominado "captación de luz" o "captación de fotones", depende, en particular, de dicha diferencia. Para obtener corrientes eléctricas aceptables, la banda prohibida, es decir, la diferencia de energía entre el HOMO y el LUMO del compuesto dador, no debe ser excesivamente alta para permitir la absorción del mayor número de fotones, pero al mismo tiempo no excesivamente baja, ya que podría reducir el voltaje en los electrodos del dispositivo.

En la forma más sencilla de operar, las células fotovoltaicas (o células solares) orgánicas se producen mediante la introducción de una capa delgada (alrededor de 100 nanómetros) de una mezcla del compuesto aceptor de electrones y del compuesto dador de electrones (arquitectura conocida como "heterounión masiva"), entre dos electrodos, que normalmente consisten en óxido de indio-estaño (ITO) (ánodo) y aluminio (Al) (cátodo). Para producir una capa de este tipo, generalmente se prepara una disolución de los dos compuestos y subsecuentemente se crea una película fotoactiva en el ánodo [óxido de indio-estaño (ITO)] a partir de esta disolución, recurriendo a técnicas de deposición apropiadas, tales como, por ejemplo, "revestimiento por rotación", "revestimiento por pulverización" "impresión por chorro de tinta" y similares. Finalmente, el contraelectrodo [es decir, el cátodo de aluminio (Al)] se deposita sobre la película seca. Opcionalmente, se pueden introducir otras capas adicionales capaces de ejercer funciones específicas de naturaleza eléctrica, óptica o mecánica entre los electrodos y la película fotoactiva.

Generalmente, con el fin de facilitar los huecos electrónicos (o huecos) para alcanzar el ánodo [óxido de indio-estaño (ITO)] y al mismo tiempo bloquear el transporte de electrones, mejorando de este modo la recogida de las cargas por parte del electrodo y la inhibición de los fenómenos de recombinación, antes de crear la película fotoactiva a partir de la mezcla del compuesto aceptor y del compuesto dador como se describe anteriormente, se deposita una película, a partir de una suspensión acuosa de PEDOT:PSS [poli(3,4-etilendioxitiofeno)-poli(estirenosulfonato)], recurriendo a técnicas de deposición apropiadas tales como, por ejemplo, "revestimiento por centrifugación", "revestimiento por pulverización", "impresión por chorro de tinta" y similares.

El compuesto dador de electrones que se usa más comúnmente en la construcción de células fotovoltaicas (o células solares) orgánicas es el poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) regioregular. Este polímero tiene características ópticas y electrónicas óptimas (buenos valores orbitales de HOMO y LUMO, buen coeficiente de adsorción molar), una buena solubilidad en los disolventes usados en la construcción de células fotovoltaicas (o células solares) y una movilidad razonable de las separaciones entre bandas electrónicas.

Otros ejemplos de polímeros que se pueden usar ventajosamente como compuestos dadores de electrones son: el polímero PCDTBT {poli[N-9"-heptadecanil-2,7-carbazol-alt-5,5-(4',7'-di-2-tienil-2',1',3'-benzotiadiazol)]}, el polímero PCPDTBT {poli[2,6-(4,4-bis-(2-etilhexil)-4H-ciclopenta[2,1-b;3,4-b']-ditiófeno)-alt-4,7-(2,1,3-benzotiadiazol)]}.

También se conocen compuestos dadores de electrones que contienen unidades de benzoditiofeno que tienen una estructura similar a poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) en los que las unidades de tiofeno, sin embargo, están planarizadas por medio de anillos de benceno. Esta característica no solo incrementa el potencial de oxidación de dichos compuestos dadores de electrones, sino que también mejora su estabilidad al aire e incrementa el orden molecular durante la formación de la película fotoactiva: esto conduce a excelentes propiedades de transporte de carga [electrones o huecos electrónicos (huecos)]. El uso de compuestos dadores de electrones que contienen unidades de benzoditiofeno, por lo tanto, permite la producción de dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) que tienen rendimientos mejorados con respecto al uso de poli(3-hexiltiofeno) (P3HT).

También se sabe que los compuestos que contienen una unidad de pentaleno no solo tienen las características de los compuestos dadores de electrones anteriores que contienen unidades de benzoditiofeno, sino que también tienen un carácter dirradical típico de los anillos aromáticos condensados con 4 π electrones: dicha característica implica un incremento considerable de la vida útil del excitón durante la difusión del mismo en una región del compuesto dador de electrones hasta la interfase con el compuesto aceptor de electrones. Se pueden encontrar más detalles relacionados con dicha característica, por ejemplo, en el artículo de Nakano M. et al.: "Diradical Character Based Design for Singlet Fission of Condensed-Ring Systems with 4 π Electrons", "The Journal of Physical Chemistry C" (2012), vol. 116, páginas 19729-19736.

En consecuencia, el uso de compuestos dadores de electrones que contienen una unidad de pentaleno puede permitir que se produzcan dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) con rendimientos mejorados adicionalmente.

Los procedimientos para la preparación de compuestos que contienen una unidad de pentaleno son conocidos en la técnica, en particular para la preparación de compuestos que contienen una unidad de dibenzopentaleno.

El dibenzopentaleno se puede obtener, por ejemplo, mediante la pirólisis instantánea al vacío de 1,4-difenilbutadieno como se describe, por ejemplo, por Brown R. F. C. et al. en el artículo: "The ethyne-ethylidene rearrangement: Formation of Indeno[2,1-a]indene and fluoranthene on flash vacuum pyrolysis of 1,4-diphenylbutadiyne", "Tetrahedron Letters" (2013), Vol. 34, Número 22, páginas 3607-3608.

O, el dibenzopentaleno se puede obtener por reacción de benzaldehído con cianuro de bencilo para dar 2,3-difenilsuccinonitrilo que subsecuentemente se somete a hidrólisis para dar ácido 2,3-difenilsuccínico. Dicho ácido 2,3-difenilsuccínico se cicla con ácido sulfúrico para dar una dicetona que subsecuentemente se somete a la acción de un reactivo de Grignard (es decir, 2-bromomagnesiotiofeno) como se describe, por ejemplo, por Cava M. P. et al. en el artículo: "Synthesis and characterization of 5,10-Bis(2-thienyl)indeno[2,1-a]indene Derivatives: The First Examples of Conducting Polymers Containing a Rigid Bis(thienyl)butadiene Core", "The Journal of Organic Chemistry" (2000), Vol. 65, páginas 6739-6742.

O, los derivados de pentaleno se pueden sintetizar mediante la reacción de homocoplación reductora de haloeninas, como se describe, por ejemplo, por Tilley T. D. et al. en el artículo: "Versatile Synthesis of Pentalene Derivatives via the Pd-catalyzed Homocoupling of Haloenynes", "The Journal of American Chemical Society" (2009), Vol. 131, páginas 2796-2797.

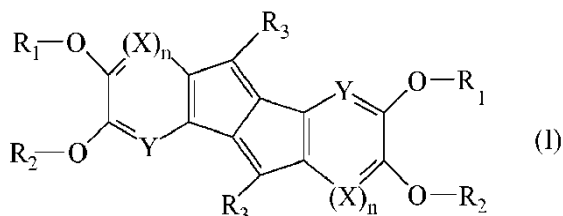
El artículo: "Intramolecular Reductive Double Cyclization of o,o'-Bis(arylcarbonyl)-diphenylacetylenes: Synthesis of Ladder n-Conjugated Skeletons", "Organic Letters" (2009), Vol. 11, páginas 3076-3079, describe compuestos que contienen una unidad de pentaleno que se puede usar en dispositivos electrónicos orgánicos.

Como se indicó anteriormente, dado que el uso de compuestos dadores de electrones que contienen una unidad de pentaleno puede permitir que se produzcan dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) con rendimientos mejorados adicionalmente, el estudio de nuevos compuestos dadores de electrones que contienen una unidad de pentaleno es aún de gran interés.

Por tanto, el solicitante ha considerado el problema de encontrar un compuesto que contenga una unidad de pentaleno que se pueda usar, como tal o después de una funcionalización y polimerización apropiadas, como un compuesto dador de electrones.

El solicitante ha encontrado ahora un compuesto que contiene una unidad de pentaleno sustituido con grupos alcoxilo que, como tal o después de una funcionalización y polimerización apropiadas, se puede usar ventajosamente en la construcción de dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) tales como, por ejemplo, células fotovoltaicas (o células solares), módulos fotovoltaicos (o módulos solares), en soportes tanto rígidos como flexibles. Dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno también se puede usar ventajosamente como una unidad constitutiva de concentradores solares luminiscentes (LSCs). Además, dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno se puede usar ventajosamente como precursor de unidades monoméricas en la preparación de polímeros semiconductores.

Un objetivo de la presente invención se refiere, por lo tanto, a un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I):



en la que:

- R₁ y R₂, iguales o diferentes entre sí, se seleccionan de: grupos alquilo de C₁-C₂₀, preferentemente de C₂-C₁₂, lineales o ramificados, saturados o insaturados, que contienen opcionalmente heteroátomos, grupos cicloalquilo opcionalmente sustituidos, grupos alcoxilo de C₁-C₂₀, preferentemente de C₂-C₁₂, lineales o ramificados, saturados o insaturados, opcionalmente sustituidos;

- o R_1 y R_2 se pueden unir opcionalmente entre sí para formar, junto con los átomos de carbono a los que están unidos, un ciclo o un sistema policíclico que contiene de 3 a 14 átomos de carbono, preferentemente de 4 a 6 átomos de carbono, saturado, insaturado o aromático, que contiene opcionalmente uno o más heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre, nitrógeno, silicio, fósforo, selenio;

5 - R_3 se selecciona de grupos arilo opcionalmente sustituidos, grupos heteroarilo opcionalmente sustituidos;

- n es 1;

- X es igual a Y, y representa un grupo CH, o un átomo de nitrógeno (N).

Según una realización preferida de la presente invención, en dicha fórmula general (I):

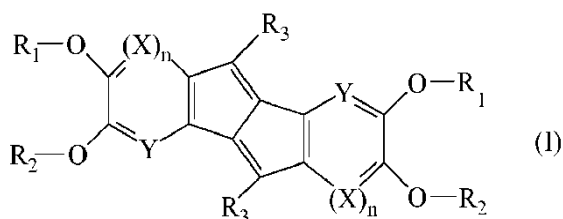
10 • R_1 y R_2 , iguales entre sí, se seleccionan de grupos alquilo de C_2 - C_{12} ramificados, y son preferentemente un grupo 2-etilhexiloxilo;

• R_3 se selecciona de grupos heteroarilo opcionalmente sustituidos, y es preferentemente un grupo tienilo;

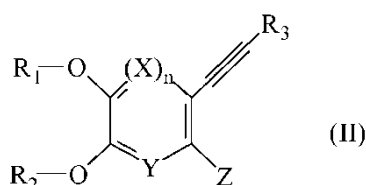
• X es igual a Y, y representa un grupo CH.

La presente invención también se refiere a un procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I).

15 Un objetivo adicional de la presente invención se refiere, por lo tanto, a un procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I):



20 en la que R_1 , R_2 , R_3 , X, Y y n tienen los mismos significados descritos anteriormente, por medio de una reacción de homocoplación reductora de un compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II):



en la que R_1 , R_2 , R_3 , X, Y y n tienen los mismos significados descritos anteriormente, Z representa un átomo de halógeno seleccionado de bromo, cloro, yodo, preferentemente bromo, en presencia de por lo menos un catalizador que contiene paladio.

25 Para el propósito de la presente descripción y de las siguientes reivindicaciones, las definiciones de los intervalos numéricos siempre comprenden los extremos a menos que se especifique lo contrario.

Para el propósito de la presente descripción y de las siguientes reivindicaciones, la expresión "que comprende" también incluye las expresiones "que consiste esencialmente en" o "que consiste en".

30 La expresión "grupos alquilo de C_1 - C_{20} " quiere decir grupos alquilo lineales o ramificados que tienen de 1 a 20 átomos de carbono, saturados o insaturados. Los ejemplos específicos de grupos alquilo de C_1 - C_{20} son: metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, iso-butilo, t-butilo, pentilo, etil-hexilo, hexilo, heptilo, octilo, nonilo, decilo, dodecilo.

35 La expresión "grupos alquilo de C_1 - C_{20} que contienen opcionalmente heteroátomos" quiere decir grupos alquilo lineales o ramificados que tienen de 1 a 20 átomos de carbono, saturados o insaturados, en los que por lo menos uno de los átomos de hidrógeno está sustituido por un heteroátomo seleccionado de: halógenos tales como, por ejemplo, flúor, cloro, preferentemente flúor; nitrógeno; azufre; oxígeno. Los ejemplos específicos de grupos alquilo de C_1 - C_{20} que contienen opcionalmente heteroátomos son: fluorometilo, difluorometilo, trifluorometilo, triclorometilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2,2,3,3-tetrafluoropropilo, 2,2,3,3,3-pentafluoropropilo, perfluoropentilo, perfluorooctilo, perfluorodecilo, oximetilo, tiometilo, tioetilo, dimetilamina, propilamina, dioctilamina.

La expresión "grupos cicloalquilo" quiere decir grupos cicloalquilo que tienen de 3 a 30 átomos de carbono. Dichos grupos cicloalquilo pueden estar opcionalmente sustituidos con uno o más grupos, iguales o diferentes entre sí, seleccionados de: átomos de halógeno tales como, por ejemplo, flúor, cloro, bromo, preferentemente flúor; grupos hidroxilo; grupos alquilo de C₁-C₁₂; grupos alcoxilo de C₁-C₁₂; grupos tioalcoxilo de C₁-C₁₂; grupos tri-alquilsililo de C₃-C₂₄; grupos polietilenoxilo; grupos ciano; grupos amino; grupos mono- o di-alquilamina de C₁-C₁₂; grupos nitro. Los ejemplos específicos de grupos cicloalquilo son: ciclopropilo, 2,2-difluorociclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, metilciclohexilo, metoxiciclohexilo, fluorociclohexilo, fenilciclohexilo, decalina, abietilo.

La expresión "grupos alcoxilo de C₁-C₂₀" quiere decir grupos que comprenden un átomo de oxígeno al que está unido un grupo alquilo de C₁-C₂₀ lineal o ramificado, saturado o insaturado. Los ejemplos específicos de grupos alcoxilo de C₁-C₂₀ son: metoxilo, etoxilo, n-propoxilo, iso-propoxilo, n-butoxilo, iso-butoxilo, t-butoxilo, pentoxilo, hexiloxilo, 2-etilhexiloxilo, heptiloxilo, octiloxilo, noniloxilo dodeciloxilo.

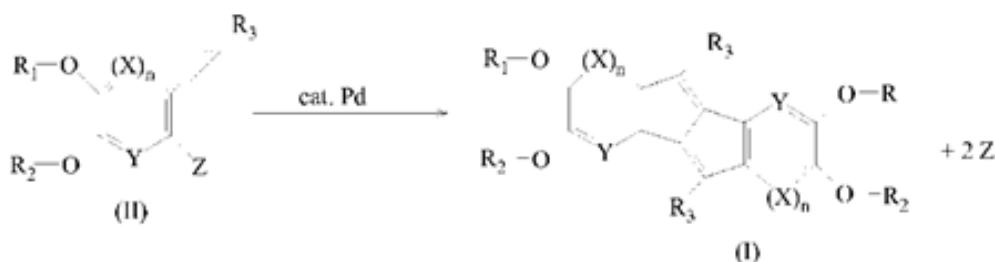
La expresión "sistema ciclo o policíclico" quiere decir un sistema que contiene uno o más anillos que contienen de 3 a 14 átomos de carbono, que opcionalmente contiene heteroátomos seleccionados de nitrógeno, oxígeno, azufre, silicio, selenio, fósforo. Los ejemplos específicos de sistema ciclo o policíclico son: tiadiazol, benzotiofeno, quinoxalina, piridina.

La expresión "grupos arilo" quiere decir grupos carbocíclicos aromáticos que contienen de 6 a 60 átomos de carbono. Dichos grupos arilo pueden estar opcionalmente sustituidos con uno o más grupos, iguales o diferentes entre sí, seleccionados de: átomos de halógeno tales como, por ejemplo, flúor, cloro, bromo, preferentemente flúor; grupos hidroxilo; grupos alquilo de C₁-C₁₂; grupos alcoxilo de C₁-C₁₂; grupos tioalcoxilo de C₁-C₁₂; grupos tri-alquilsililo de C₃-C₂₄; grupos polietilenoxilo; grupos ciano; grupos amino; grupos mono- o di-alquilamina de C₁-C₁₂; grupos nitro. Los ejemplos específicos de grupos arilo son: fenilo, metilfenilo, trimetilfenilo, metoxifenilo, hidroxifenilo, feniloxifenilo, fluorofenilo, pentafluorofenilo, clorofenilo, bromofenilo, nitrofenilo, dimetilaminofenilo, naftilo, fenilinaftilo, fenantreno, antraceno.

La expresión "grupos heteroarilo" quiere decir grupos heterocíclicos aromáticos, penta- o hexa-atómicos, también benzocondensados o heterobicíclicos, que contienen de 4 a 60 átomos de carbono y de 1 a 4 heteroátomos seleccionados de nitrógeno, oxígeno, azufre, silicio, selenio, fósforo. Dichos grupos heteroarilo pueden estar opcionalmente sustituidos con uno o más grupos, iguales o diferentes entre sí, seleccionados de: átomos de halógeno tales como, por ejemplo, flúor, bromo, cloro, preferentemente flúor; grupos hidroxilo; grupos alquilo de C₁-C₁₂; grupos alcoxilo de C₁-C₁₂; grupos tioalcoxilo de C₁-C₁₂; grupos tri-alquilsililo de C₃-C₂₄; grupos polietilenoxilo; grupos ciano; grupos amino; grupos mono- o di-alquilamina de C₁-C₁₂; grupos nitro. Los ejemplos específicos de grupos heteroarilo son: piridina, metilpiridina, metoxipiridina, fenilpiridina, fluoropiridina, pirimidina, piridazina, triazina, tetrazina, quinolina, quinoxalina, quinazolina, furano, tiofeno, hexiltiofeno, bromotiofeno, dibromotiofeno, pirrol, oxazol, tiazol, isooxazol, isotiazol, oxadiazol, tiadiazol, pirazol, imidazol, triazol, tetrazol, indol, benzofurano, benzotiofeno, benzooxazol, benzotiazol, benzooxadiazol, benzotiadiazol, benzopirazol, bencimidazol, benzotriazol, triazolpiridina, triazolpirimidina, cumarina.

El procedimiento, objetivo de la presente invención, se puede llevar a cabo según el siguiente Esquema 1

Esquema 1



en la que R₁, R₂, R₃, X, Y, n y Z tienen los mismos significados descritos anteriormente y "cat. Pd" es el catalizador que contiene paladio.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho catalizador que contiene paladio se selecciona de: cloruro de paladio(II) [PdCl₂], acetato de paladio(II) [Pd(OAc)₂], tris(dibencilideno)paladio(0) [Pd₂(dba)₃] en la que dba = C₆H₅CH=CHCOCH=CHC₆H₅, cloruro de bis(acetonitrilo)paladio(II) [Pd(CH₃CN)₂Cl₂], cloruro de bis(trifenilfosfina)paladio(II) [Pd(PPh₃)₂Cl₂], acetato de bis(trifenilfosfina)paladio(II) [Pd(PPh₃)₂(OAc)₂], tetrakis(trifenilfosfina)paladio(0) [Pd(PPh₃)₄], o mezclas de los mismos. Dicho catalizador que contiene paladio es preferentemente tris(dibencilideno)paladio(0) [Pd₂(dba)₃] en el que dba = C₆H₅CH=CHCOCH=CHC₆H₅.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicho catalizador que contiene paladio se pueden usar en una relación molar que varía de 100:0.1 a 100:6, preferentemente en un intervalo de 100:0.2 a 100:4.

5 Según una realización preferida de la presente invención, dicho procedimiento se puede llevar a cabo en presencia de por lo menos una base orgánica débil.

Según una realización preferida de la presente invención, dicha base orgánica débil se puede seleccionar, por ejemplo, de: carboxilatos de metales alcalinos (por ejemplo, sodio, potasio, cesio) o de metales alcalinotérreos (por ejemplo, magnesio, calcio) seleccionados de: acetato de potasio, acetato de sodio, acetato de cesio, acetato de magnesio, acetato de calcio, propionato de potasio, propionato de sodio, propionato de cesio, propionato de magnesio, propionato de calcio o mezclas de los mismos; carbonatos de metales alcalinos (por ejemplo, litio, sodio, potasio, cesio) o de metales alcalinotérreos (por ejemplo, magnesio, calcio) seleccionados de: carbonato de litio, carbonato de potasio, carbonato de sodio, carbonato de cesio, carbonato de magnesio, carbonato de calcio, o mezclas de los mismos; bicarbonatos de metales alcalinos (por ejemplo, litio, sodio, potasio, cesio) o de metales alcalinotérreos (por ejemplo, magnesio, calcio) seleccionados de: bicarbonato de litio, bicarbonato de potasio, bicarbonato de sodio, bicarbonato de cesio, bicarbonato de magnesio, bicarbonato de calcio, o mezclas de los mismos; o mezclas de los mismos. Dicha base orgánica débil se selecciona preferentemente de carbonato de cesio, carbonato de potasio.

20 Según una realización preferida de la presente invención, dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicha base orgánica débil se pueden usar en una relación molar que varía de 1:2.2 a 1:20, preferentemente que varía de 1:2.5 a 1:4.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho procedimiento se puede llevar a cabo en presencia de por lo menos un agente reductor orgánico.

25 Según una realización preferida de la presente invención, dicho agente reductor orgánico se selecciona de: hidroquinona, pirocatecol, para-hidroxiaminobenceno. Dicho agente reductor orgánico es preferentemente hidroquinona.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicho agente reductor orgánico se pueden usar en relaciones molares que varían de 1:1.5 a 1:10, preferentemente de 1:2 a 1:4.

30 Según una realización preferida de la presente invención, dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) se puede usar a una concentración molar que varía de 0.1 mmoles a 10 mmoles, preferentemente de 0.5 mmoles a 1.0 mmoles.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho procedimiento se puede llevar a cabo en presencia de por lo menos un disolvente orgánico aprótico polar.

35 Según una realización preferida de la presente invención, dicho disolvente orgánico aprótico polar se selecciona de: éter dietílico (Et₂O), tetrahidrofurano (THF), 1,4-dioxano, dimetilsulfóxido (DMSO), N-metilpirrolidona (NMP), N,N-dimetilformamida (DMF), o mezclas de los mismos. Dicho disolvente orgánico aprótico polar se selecciona preferentemente de tetrahidrofurano (THF), 1,4-dioxano.

40 Según una realización preferida de la presente invención, dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) se puede usar en dicho disolvente orgánico aprótico polar en una cantidad tal que tenga una concentración molar en dicho disolvente de 0.05 mmoles a 2.0 mmoles, preferentemente de 0.1 mmoles a 1.5 mmoles.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho procedimiento se puede llevar a cabo en presencia de por lo menos un ligando del catalizador que contiene paladio.

45 Según una realización preferida de la presente invención, dicho ligando se selecciona de: tri(t-butil)fosfina, trifenilfosfina, tetrafluoroborato de triciclohexilfosfonio, 2-diciclohexilfosfina-2'-(N,N-dimetil-amino)bifenilo (DavePhos), tetrafluoroborato de di-t-butil(metil)fosfonio, tetrafluoroborato de tri-t-butil(metil)fosfonio, o mezclas de los mismos. Dicho ligando es preferentemente tri(t-butil)fosfina.

50 Según una realización preferida de la presente invención, dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicho ligando se pueden usar en relaciones molares que varían de 100:1 a 100:10, preferentemente que varían de 100:3 a 100:6.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho procedimiento se puede llevar a cabo a una temperatura que varía de 80°C a 170°C, preferentemente de 100°C a 150°C.

Según una realización preferida de la presente invención, dicho procedimiento se puede llevar a cabo durante un tiempo que varía de 12 horas a 72 horas, preferentemente que varía de 16 horas a 48 horas.

- 5 El compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) se puede obtener según los procedimientos conocidos en la técnica, por ejemplo, mediante la copulación de Sonogashira entre un compuesto aromático halogenado y un alquino terminal. Se pueden encontrar más detalles relacionados con dichos procedimientos, por ejemplo, en el artículo de Buchwald, S. L. et al.: "Domino Cu-Catalyzed C-N Coupling/Hydroamidation: A highly Efficient Synthesis of Nitrogen Heterocycles", "Angewandte Chemie International Edition" (2006), Vol. 45, No. 42, páginas 7079-7082; o en el artículo de Takahashi, T. et al.: "Alkynylzirconation of Alkynes and Application to One-Pot Bisalkynylation of Alkynes", "The Journal of Organic Chemistry" (2002), Vol. 67, No. 21, páginas 7451-7456.

- 15 La presente invención también se refiere al uso de dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), como tal o después de funcionalización y polimerización apropiadas, en la construcción de dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) tales como células fotovoltaicas (o células solares), módulos fotovoltaicos (o módulos solares), en soportes tanto rígidos como flexibles.

La presente invención también se refiere al uso de dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I) como una unidad constitutiva de concentradores solares luminiscentes (LSCs).

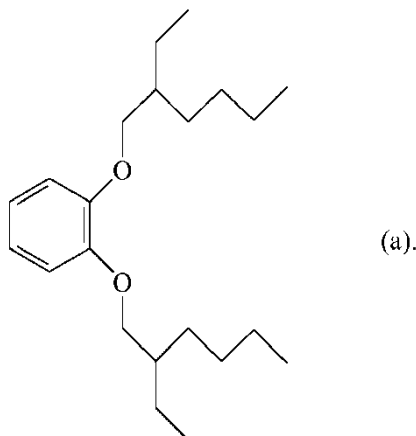
- 20 La presente invención también se refiere al uso de dicho compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I) como un precursor de unidades monoméricas en la preparación de polímeros semiconductores.

A continuación se proporcionan algunos ejemplos ilustrativos y no limitantes para una mejor comprensión de la presente invención y para su realización práctica.

Ejemplo 1

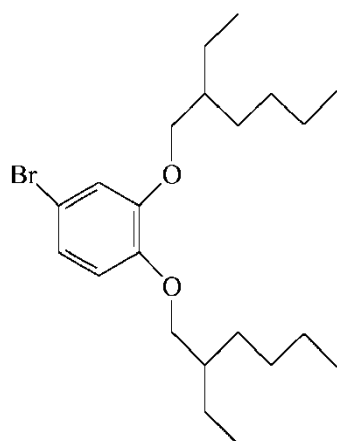
- 25 Preparación de 4,5-bis(2-etilhexiloxi)-2-bromo-yodobenceno

(a) Preparación de 1,2-bis(2-etilhexiloxi)benceno que tiene la fórmula (a):



- 30 Se añadió bromuro de 2-etilhexilo (Aldrich) (11.39 g; 59.0 milimoles) y carbonato de potasio (Aldrich) (9.5 g; 69.0 milimoles), en un matraz de vidrio Pyrex de dos bocas, en una atmósfera inerte, a una disolución de catecol (Aldrich). (2.5 g; 22.7 mmoles) en N, N-dimetilformamida anhidra (Aldrich) (20 ml) y la temperatura se llevó a 95°C. Después de 18 horas, la mezcla de reacción obtenida se vertió en agua y se extrajo con éter etílico (Carlo Erba) (3 x 25 ml). La fase orgánica obtenida se lavó hasta la neutralidad con agua (3 x 25 ml) y subsecuentemente se anhidrificó en sulfato de sodio (Aldrich): el disolvente residual se retiró por destilación a presión reducida. El residuo obtenido se purificó por elución en una columna cromatográfica de gel de sílice [(eluyente: n-heptano) (Carlo Erba)],
- 35 obteniendo 7.2 g de 1,2-bis (2-etilhexiloxi)benceno (rendimiento del 95%).

(b) Preparación de 1,2-bis(2-etilhexiloxi)-4-bromobenceno que tiene la fórmula (b)

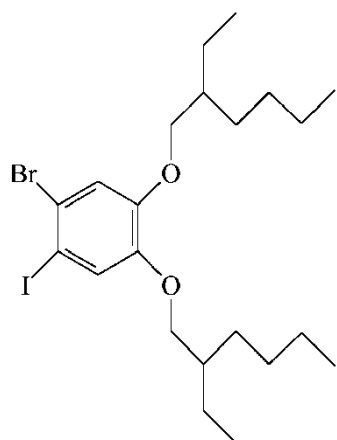


(b).

Ejemplo 1

Se añadió N-bromosuccinimida (NBS) (Aldrich) (3.9 g; 22.0 mmoles), en un matraz de vidrio Pyrex de dos bocas, en una atmósfera inerte, a una disolución de 1,2-bis(2-etilhexiloxi)benceno (7.4 g; 22.0 mmoles), obtenido como se describe en (a), en 39 ml de tetrahidrofurano anhidro (THF) (Aldrich): la disolución obtenida se dejó en la oscuridad, con agitación. Después de 18 horas, la mezcla de reacción obtenida se vertió en agua y se extrajo con éter etílico (Carlo Erba) (3 x 25 ml). La fase orgánica obtenida se lavó hasta la neutralidad con agua (3 x 25 ml) y subsecuentemente se anhidrificó en sulfato de sodio (Aldrich): el disolvente residual se retiró por destilación a presión reducida. El residuo obtenido se purificó por elución en una columna cromatográfica de gel de sílice [(eluyente: n-heptano) (Carlo Erba)], obteniendo 7.5 g de 1,2-bis (2-etilhexiloxi)-4-bromobenceno (rendimiento 83%).

(c) Preparación de 1,2-bis(2-etilhexiloxi)-4-bromo-5-yodobenceno que tiene la fórmula (c)

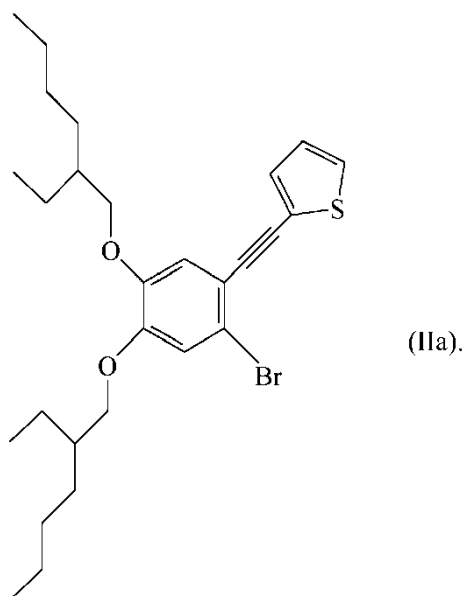


(c).

Se añadió N-yodosuccinimida (NIS) (Aldrich) (4.7 g; 20.9 mmoles), en un matraz de vidrio Pyrex de dos bocas, en una atmósfera inerte, a una disolución de 1,2-bis(2-etilhexiloxi)-4-bromobenceno (7.5 g; 18.2 mmoles), obtenido como se describe en (b), en 18 ml de cloroformo (Carlo Erba) y 18 ml de ácido acético (Carlo Erba): la disolución obtenida se dejó en la oscuridad, con agitación. Después de 12 horas, la mezcla de reacción obtenida se vertió en agua y se extrajo con diclorometano (Carlo Erba) (3 x 25 ml). La fase orgánica obtenida se lavó primero con una disolución acuosa de tiosulfato de sodio 0.1 N (Aldrich) (3 x 25 ml), a continuación con agua (3 x 25 ml), subsecuentemente con una disolución acuosa saturada de bicarbonato de sodio [NaHCO₃ (sat.)] (preparada con bicarbonato de sodio de Aldrich) [NaHCO₃ (sat.)] (3 x 25 ml), y finalmente hasta la neutralidad con agua, y subsecuentemente se anhidrificó en sulfato de sodio (Aldrich): el disolvente residual se retiró por destilación a presión reducida. El residuo obtenido se purificó por elución en una columna cromatográfica de gel de sílice [(eluyente: n-heptano) (Carlo Erba)], obteniendo 6.7 g de 1,2-bis(2-etilhexiloxi)-4-bromo-5-yodobenceno (rendimiento del 68%).

Ejemplo 2

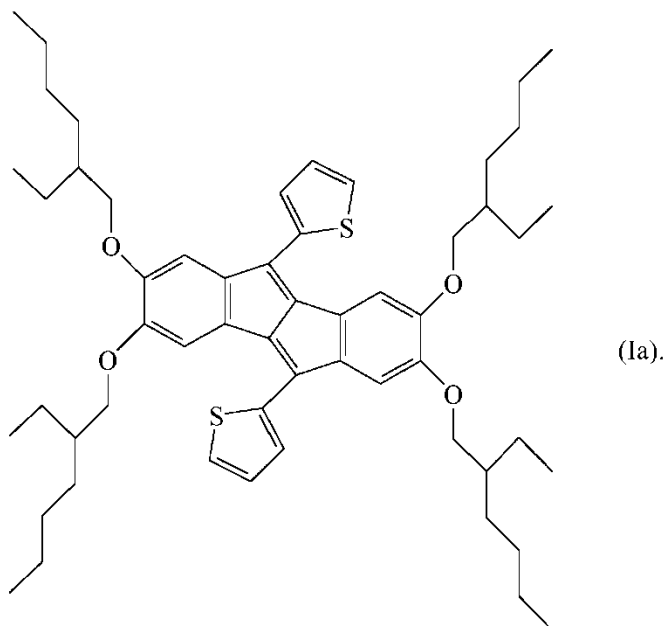
Preparación de 4,5-bis(2-etilhexiloxi)-1-bromo-2-(2-(2-tienil)etil)benzoceno que tiene la fórmula (IIa)



Los siguientes productos se cargaron, por orden, en una atmósfera inerte, en un tubo de ensayo de vidrio Pyrex con cola con un tapón de rosca: 540 mg de 4,5-bis(2-etilhexiloxi)-2-benceno (1.0 mmoles) obtenido como se describe en el Ejemplo 1, 150 mg de 2-[trimetilsilil(etinil)]tiofeno (0.83 mmoles) (Aldrich) disueltos en 5 ml de N,N-dimetilformamida (Aldrich), 35 mg de cloruro de bis(trifenilfosfina)paladio (II) $[Pd(PPh_3)_2Cl_2]$ (Aldrich) (0.05 mmoles), 2 mg de yoduro de cobre (I) (CuI) (Aldrich) (0.01 mmoles), 304 mg de trietilamina (Aldrich) (3.0 mmoles) y finalmente 379 mg de fluoruro de tetra-n-butilamonio (Aldrich) (1.0 mmoles). Después de cerrar el reactor, este se colocó en un baño de aceite precalentado a 50°C, durante 4 horas. Después de enfriar a temperatura ambiente (25°C), se añadió una disolución acuosa de ácido clorhídrico 0.1 M (Aldrich) (50 ml) a la mezcla de reacción y la mezcla completa se extrajo con éter dietílico (Carlo Erba) (3 x 25 ml). La fase orgánica obtenida se lavó hasta la neutralidad con agua (3 x 25 ml) y subsecuentemente se anhidrificó sobre sulfato de sodio (Aldrich) y se evaporó. El residuo obtenido se purificó por elución en una columna cromatográfica de gel de sílice [(eluyente: heptano) (Carlo Erba)], obteniendo 425 mg de 4,5-bis(2-etilhexiloxi)-1-bromo-2-(2-(2-tienil)etinil)benceno en forma de un aceite amarillo (rendimiento del 99%).

Ejemplo 3

Preparación de 5,10-ditienil-2,3,7,8-tetra(2-etilhexiloxi)indeno[2,1-a]indeno que tiene la fórmula (Ia)



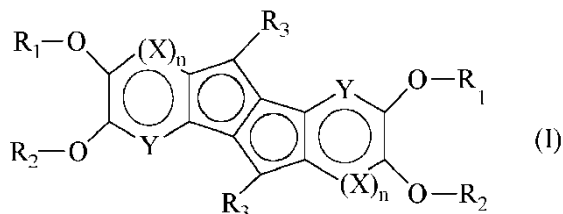
Los siguientes productos se cargaron, por orden, en una atmósfera inerte, en un tubo de ensayo de vidrio Pyrex con

5 cola con un tapón de rosca: 326 mg de carbonato de cesio (Cs_2CO_3) (Aldrich) (1.0 mmoles), 111 mg de hidroquinona (Aldrich) (1.0 mmoles), 167 mg de fluoruro de cesio (CsF) (Aldrich) (1.1 mmoles), 6.07 mg de tri(*t*-butil)fosfina [$\text{P}(\text{tBu})_3$] (Aldrich) (0.03 mmoles), 6.87 mg de tris(dibencilidenacetona)paladio(0) [$\text{Pd}_2(\text{dba})_3$] en la que dba = $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHCOCH}=\text{CHC}_6\text{H}_5$] (Aldrich) (0.0075 mmoles) y finalmente 260 mg de 4,5-bis(2-etilhexiloxi)-1-bromo-2-(2-(2-tienil)etnil)benceno (IIa), obtenido como se describe en el Ejemplo 2, disuelto en 5 ml de 1,4-dioxano (Aldrich). Después de cerrar el reactor, este se colocó en un baño de aceite precalentado a 130°C, durante 24 horas. Después de enfriar a temperatura ambiente (25°C), se añadió una disolución saturada de cloruro de sodio [NaCl (sat.)] (preparada con cloruro de sodio de Aldrich) [NaCl] a la mezcla de reacción y toda la mezcla se extrajo con éter dietílico (Carlo Erba) (3 x 25 ml). La fase orgánica se anhidrificó posteriormente en sulfato de sodio (Aldrich) y se evaporó. El residuo obtenido se purificó por elución en una columna cromatográfica de gel de sílice [(eluyente: heptano) (Carlo Erba)], obteniendo 242 mg de 5,10-ditienil-2,3,7,8-tetra (2-etilhexiloxi)indeno-[2,1-a]indeno en forma de un sólido rojo (rendimiento 55%).

10

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I):



5 en la que:

- R_1 y R_2 , iguales o diferentes entre sí, se seleccionan de: grupos alquilo de C_1-C_{20} lineales o ramificados, saturados o insaturados, que contienen opcionalmente heteroátomos, grupos cicloalquilo opcionalmente sustituidos, grupos alcoxilo de C_1-C_{20} lineales o ramificados, saturados o insaturados, opcionalmente sustituidos;

10 - o R_1 y R_2 se pueden unir opcionalmente entre sí para formar, junto con los átomos de carbono a los que están unidos, un ciclo o un sistema policíclico que contiene de 3 a 14 átomos de carbono, saturado, insaturado o aromático, que contiene opcionalmente uno o más heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre, nitrógeno, silicio, fósforo, selenio;

- R_3 se selecciona de grupos arilo opcionalmente sustituidos, grupos heteroarilo opcionalmente sustituidos;

- n es 1;

15 - X es igual a Y , y representa un grupo CH , o un átomo de nitrógeno (N).

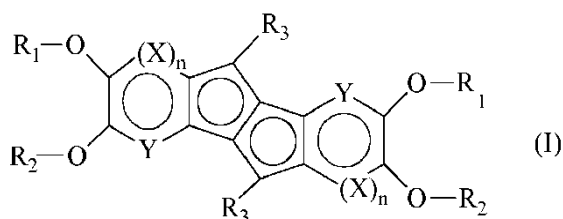
2. El compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I) según la reivindicación 1, en la que:

- R_1 y R_2 , iguales entre sí, se seleccionan de grupos alquilo de C_2-C_{12} ramificado;

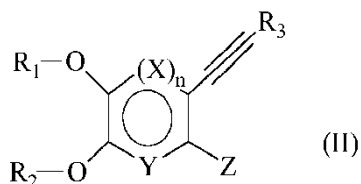
- R_3 se selecciona de grupos heteroarilo opcionalmente sustituidos;

20 - X es igual a Y , y representa un grupo CH .

3. Un procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según la reivindicación 1 o 2:



25 en la que R_1 , R_2 , R_3 , X , Y y n tienen los mismos significados descritos anteriormente, por medio de una reacción de homocoplación reductora de un compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II):



30 en la que R_1 , R_2 , R_3 , X , Y y n tienen los mismos significados descritos anteriormente, Z representa un átomo de halógeno seleccionado de bromo, cloro, yodo, en presencia de por lo menos un catalizador que contiene paladio, seleccionado de: cloruro de paladio(II) $[PdCl_2]$, acetato de paladio(II) $[Pd(OAc)_2]$, bis(dibencilideno)paladio(0)

[Pd₂(dba)₃ en la que dba = C₆H₅CH=CHCOCH=CHC₆H₅], cloruro de bis(acetonitrilo)paladio(II) [Pd(CH₃CN)₂Cl₂], cloruro de bis(trifenilfosfina)paladio(II) [Pd(PPh₃)₂Cl₂], acetato de bis(trifenilfosfina)paladio(II) [Pd(PPh₃)₂(OAc)₂], tetrakis(trifenilfosfina)paladio(0) [Pd(PPh₃)₄], o mezclas de los mismos.

4. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según la reivindicación 3, en el que dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicho catalizador que contiene paladio se usan en una relación molar que varía de 100:0.1 a 100:6.

5. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según la reivindicación 3 o 4, en el que dicho procedimiento se lleva a cabo en presencia de por lo menos una base orgánica débil, seleccionada de: carboxilatos de metales alcalinos o alcalinotérreos seleccionados de acetato de potasio, acetato de sodio, acetato de cesio, acetato de magnesio, acetato de calcio, propionato de potasio, propionato de sodio, propionato de cesio, propionato de magnesio, propionato de calcio o mezclas de los mismos; carbonatos de metales alcalinos o alcalinotérreos seleccionados de carbonato de litio, carbonato de potasio, carbonato de sodio, carbonato de cesio, carbonato de magnesio, carbonato de calcio o mezclas de los mismos; bicarbonatos de metales alcalinos o alcalinotérreos seleccionados de bicarbonato de litio, bicarbonato de potasio, bicarbonato de sodio, bicarbonato de cesio, bicarbonato de magnesio, bicarbonato de calcio, o mezclas de los mismos; o mezclas de los mismos.

6. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones de 3 a 5, en el que dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicha base orgánica débil se usan en una relación molar que varía de 1:2.2 a 1:20.

7. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 6, en el que dicho procedimiento se lleva a cabo en presencia de por lo menos un agente reductor orgánico, seleccionado de: hidroquinona, pirocatecol, parahidroxiaminobenceno.

8. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 7, en el que dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicho agente reductor orgánico se usan en relaciones molares que varían de 1:1.5 a 1:10.

9. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 8, en el que dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) se usa en una concentración molar que varía de 0.1 mmoles a 10 mmoles.

10. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 9, en el que dicho procedimiento se lleva a cabo en presencia de por lo menos un disolvente orgánico aprótico polar seleccionado de: éter dietílico (Et₂O), tetrahidrofurano (THF), 1,4-dioxano, dimetilsulfóxido (DMSO), N-metilpirrolidona (NMP), N,N-dimetilformamida (DMF), o mezclas de los mismos.

11. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones de 3 a 10, en el que dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) se usa en dicho solvente orgánico aprótico dipolar en una cantidad tal para que tenga una concentración molar en dicho disolvente que varía de 0.05 mmoles a 2 mmoles.

12. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 11, en el que dicho procedimiento se lleva a cabo en presencia de por lo menos un ligando del catalizador que contiene paladio, seleccionado de: tri(t-butil)fosfina, trifenilfosfina, tetrafluoroborato de triciclohexilfosfonio, 2-diciclohexilfosfina-2'-(N,N-dimetil-amino)bifenilo (DavePhos), tetrafluoroborato de di-t-butil(metil)fosfonio, tetrafluoroborato de tri-t-butil(metil)fosfonio, o mezclas de los mismos.

13. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones de 3 a 12, en el que dicho compuesto alcoxi-aromático o alcoxi-heteroaromático halogenado que tiene la fórmula general (II) y dicho ligando se usan en relaciones molares que varían de 100:1 a 100:10.

14. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 13, en el que dicho procedimiento se lleva a cabo a una temperatura que varía de 80°C a 170°C.

15. El procedimiento para la preparación de un compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 14, en el que dicho procedimiento se lleva a cabo durante un tiempo que varía de 12 horas a 72 horas.

5 16. El uso del compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según la reivindicación 1 o 2, como tal o después de una funcionalización y polimerización apropiadas, en la construcción de dispositivos fotovoltaicos (o dispositivos solares) seleccionados de células fotovoltaicas (o células solares), módulos fotovoltaicos (o módulos solares), en soportes tanto rígidos como flexibles.

17. El uso del compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según la reivindicación 1 o 2, como unidad constitutiva de concentradores solares luminiscentes (LSCs).

10 18. El uso del compuesto que contiene una unidad de pentaleno que tiene la fórmula general (I), según la reivindicación 1 o 2, como un precursor de unidades monoméricas en la preparación de polímeros semiconductores.