

Estudo do comportamento térmico do MEH-PPV através da espectroscopia Raman.

Alvaro C. C. Barra¹ (IC), Thaeny C. Amaral¹ (IC), Celly M. S. Izumi^{1*} (PQ).

*celly.izumi@ufjf.edu.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora.

Palavras Chave: Espectroscopia Raman, Polímeros Condutores, MEH-PPV.

Introdução

O MEH-PPV, poli [2-metóxi-5-(2-etil-hexiloxi)-1,4-fenilenovinileno], é um polímero condutor com propriedades foto e eletroluminescentes que tem despertado grande interesse para aplicações em dispositivos ópticos. As propriedades ópticas do MEH-PPV dependem da temperatura e o processamento deste polímero envolve tratamentos térmicos¹, portanto, o entendimento do efeito da temperatura na estrutura deste polímero é um ponto chave para sua aplicação. Neste trabalho, investigou-se o efeito da temperatura na estrutura do MEH-PPV através da espectroscopia Raman e no infravermelho.

Resultados e Discussão

A curva termogravimétrica do MEH-PPV realizada em ar sintético indica que a degradação térmica do polímero ocorre entre 220 e 500 °C. Com o objetivo de monitorar o efeito da temperatura no MEH-PPV, foram registrados espectros Raman ($\lambda_0 = 785 \text{ nm}$) em um intervalo de temperatura de -125 à 275 °C utilizando um acessório de temperatura Linkam FTIR600. As bandas Raman do MEH-PPV à 25 °C, Fig 1A, são relacionadas à cadeia principal: 1624, 1581, 1552, 1309, 1282, 1111, 965 e 600 cm^{-1} .

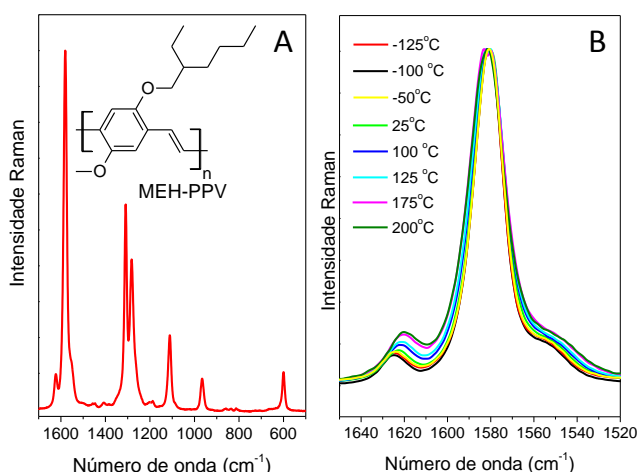


Figura 1. A- Espectro Raman do MEH-PPV (25°C) e B – Espectros Raman do MEH-PPV em diferentes temperaturas, espectros normalizados em relação a banda mais intensa em 1581 cm^{-1} . $\lambda_0 = 785 \text{ nm}$.

Nos espectros Raman realizados até 200 °C (antes da decomposição térmica – Fig 1B), observa-se um deslocamento da banda em 1625 cm^{-1} ($\nu_{\text{C=C}}$ vinileno) para 1619 cm^{-1} com o aumento da temperatura. Adicionalmente, há um aumento da razão I_{1625}/I_{1553} . Estes dois resultados indicam uma diminuição do comprimento de conjugação com o aumento de temperatura² e estão de acordo com o observado para o poli(*p*-fenilenovinileno); com a diminuição da temperatura há um aumento do comprimento de conjugação devido a uma menor desordem conformacional³.

Nos espectros registrados entre 225 e 275 °C, nota-se um aumento da intensidade relativa da banda em 966 cm^{-1} , atribuída à deformação C–H fora do plano no grupo vinileno na forma *trans*. O aparecimento desta banda no espectro Raman está relacionado à distorção da forma planar *trans* e pode ser utilizada como um marcador da distorção ao redor do grupo vinileno. Observa-se uma relação direta entre a intensidade relativa e a temperatura, sugerindo que o aumento de temperatura e consequentemente a degradação térmica induz à distorção da estrutura planar ao redor do grupo vinileno.

Os espectros FT-IR de amostras aquecidas à 250 °C mostram o aparecimento de novas bandas em 1596 e 1678 cm^{-1} que podem ser atribuídas ao $\nu_{\text{C=O}}$ de aldeído ou ácido carboxílico formados devido à oxidação do polímero durante decomposição térmica.

Conclusões

Através da espectroscopia Raman foi possível investigar o efeito da temperatura na estrutura do polímero MEH-PPV. O comprimento de conjugação no MEH-PPV aumenta com a diminuição da temperatura. Durante a decomposição térmica há distorção da estrutura planar ao redor do grupo vinileno e oxidação do polímero.

Agradecimentos

UFJF, FAPEMIG, CNPq

¹ Köhler, A.; Hoffmann, S. T.; Bässler, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 11594.

² Sakamoto, A.; Furukawa, Y.; Tasumi, M. *J. Phys. Chem.* **1992**, 96, 1490.

³ Yu, J.; Hayashi, M.; Lin, S. H.; Liang, K. K.; Hsu, J. H.; Fann, W. S.; Chao, C. I.; Chuang, K. R.; Chen, S. A. *Synthetic Metals* **1996**, 82, 159.