

Eletrólise e caracterização de poli(2-metóxi-5-(2-etil-hexilóxi)-*p*-fenileno-*vinileno*) - MEH-PPV.

Elaine Y. Yamauchi^{1*} (PG), José Pedro M. Serbena² (PG), Rosamaria W. C. Li¹ (PQ), Ivo A. Hümmelgen² (PQ), Jonas Gruber¹ (PQ)

*elaineyy@iq.usp.br

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 26077, CEP 05513-970, São Paulo, SP.

²Depto. de Física, Universidade Federal do Paraná, Caixa Postal 19044, CEP 81531-990, Curitiba, PR.

Palavras Chave: polímeros condutores, PPV, eletrólise

Introdução

Poli(*p*-fenileno-*vinileno*)s, PPVs, têm sido muito estudados, por serem materiais eletroluminescentes, o que possibilita a sua utilização em dispositivos optoeletrônicos¹, como diodos emissores de luz orgânicos, OLEDs. Dentre esses polímeros, poli(2-metóxi-5-(2-etil-hexilóxi)-*p*-fenileno-*vinileno*), MEH-PPV, é um dos mais estudados, podendo ser adquirido comercialmente² a um custo de US\$ 500 por grama. Possivelmente, este custo é elevado devido à sua rota de obtenção (Wessling)³, que emprega baixa pressão e alta temperatura e apresenta rendimento baixo.

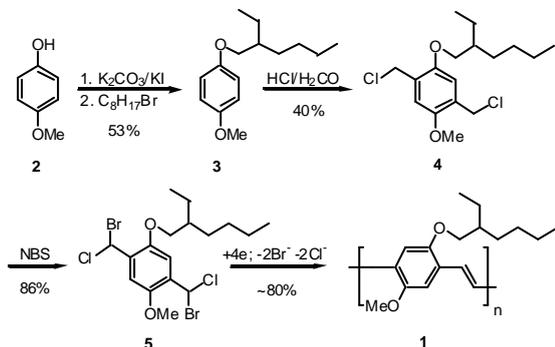
Nesta comunicação, apresentamos uma rota eletroquímica para MEH-PPV com custo dezenas de vezes inferior ao do polímero comercial, bem como a sua caracterização.

Resultados e Discussão

O Esquema 1 apresenta a rota sintética utilizada e o rendimento obtido em cada etapa.

Esquema 1. Rota sintética para MEH-PPV

MEH-PPV (**1**) foi obtido em quatro passos a partir



de *p*-metóxi-fenol (**2**) comercial. Este, por meio de uma reação de Williamson, foi convertido no éter **3**, o qual foi bis-clorometilado nas posições 2 e 5, originando o produto **4**. O tratamento de **4** com NBS conduziu ao precursor polimérico **5**. Um ensaio de voltametria cíclica permitiu determinar o potencial a ser empregado na redução catódica⁴ de **5**, que conduziu ao polímero **1** com 80% de rendimento.

O custo estimado dos insumos envolvidos foi cerca de US\$ 15,00 por grama de polímero produzido.

Todos os compostos intermediários foram caracterizados pelas suas propriedades físicas e espectroscópicas.

O espectro de RMN de ¹H do polímero mostrou a presença dos grupos laterais alcóxilados e dos hidrogênios vinilênicos e aromáticos.

O espectro no UV-VIS apresentou os três picos de absorção típicos de PPV⁵, sendo o início da primeira absorção em 530 nm, correspondendo a uma energia da lacuna proibida (*E*_{gap}) de 2,3 eV.

O espectro de fluorescência apresentou λ_{max} em 545 nm.

O espectro no IV apresentou bandas de estiramento de ligações: C(sp²)-H (3059) e C(sp³)-H (2953, 2926 e 2854), C=C (1504 e 1464), C-O-C (1206 e 1040), além de deformação angular de HC=C-H *trans* em 970 cm⁻¹.

A voltametria cíclica do polímero e o dado de *E*_{gap} óptico permitiram a construção do diagrama de energia do polímero: HOMO = 4,3 eV, *E*_{gap} = 2,3 eV e LUMO = 2,0 eV, permitindo estimar afinidade eletrônica e potencial de ionização.

Conclusões

A rota sintética apresentada permitiu obter MEH-PPV em bom rendimento a um custo 30 vezes menor do que o praticado no mercado.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e à CAPES pelos auxílios concedidos.

¹ Gruber, J.; Li, R. W. C.; Hümmelgen, I. A. in *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices*, H. S. Nalwa, Ed.; Academic Press, San Diego **2001**, vol. 8, p. 163-184.

² Aldrich Handbook of Fine Chemicals and Laboratory Equipment, 2005-2006.

³ Wessling, R. A. J. Polym. Sci.: Polym. Symp. **1985**, 72, 55.

⁴ Utley, J. H. P.; Gruber, J. *J. Mater. Chem.* **2002**, *12*, 1613.

⁵ Bradley, D. D. C. *J. Phys. D, Appl. Phys.* **1987**, *201*, 1389.