

Síntese de derivados da fenotiazina para aplicações em células solares orgânicas e OFETs.

Paula de Almeida (IC),*¹ Agatha Matsumoto(IC),¹ Fernando Ely (PQ).^{*1}

g072034@iqm.unicamp.br, fernando.ely@cti.gov.br

¹ CTI - Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer, Rodovia Dom Pedro I, km 143,6 Amarais – Campinas SP

Palavras Chave: eletrônica orgânica, células solares, síntese, fenotiazina

Introdução

Uma alternativa para reduzir os custos de manufatura de células solares (CS) é usar materiais orgânicos, produtos de menor custo. Materiais orgânicos com elétrons deslocalizados apresentam comportamento semicondutor ou condutor. Em especial, cristais líquidos discóticos possuem alta mobilidade de portadores de carga em mesofases colunares que os tornam potenciais candidatos para aplicações em uma variedade de dispositivos eletrônicos, incluindo CS e transistores orgânicos de efeito de campo (OFET). Nesta contribuição é apresentada e discutida a síntese de um derivado altamente conjugado e anisométrico da fenotiazina, figura 1. Este alvo foi desenhado de maneira a satisfazer os critérios para surgimento de fases líquido-cristalinas e propriedades semicondutoras.

Resultados e Discussão

A síntese da macromolécula ilustrada na figura 1 ocorreu por 4 etapas conforme esquema de síntese da figura 2.

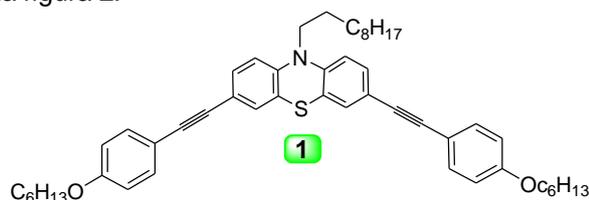


Figura 1. Alvo sintético derivado da fenotiazina.

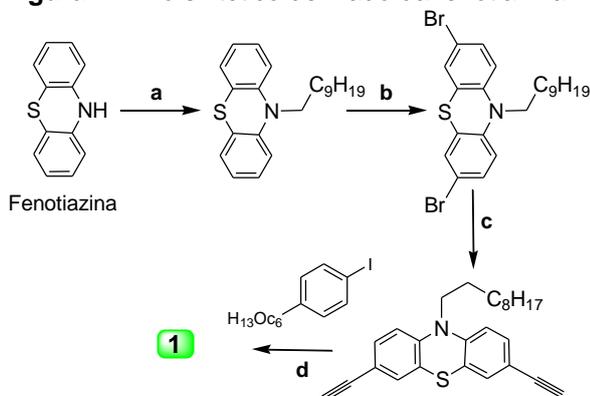


Figura 2. Esquema de síntese utilizado para 1. a) Bromodecano, 110°C, DMSO, OH⁻. b) NBS, 40 °C, CH₂Cl₂. c) i. 90°C, THF/TEA, PdCl₂(PPh₃)₂, TPP, CuI; ii. 25°C, THF, TBAF. d) 70 °C, Et₃N/THF, PdCl₂(PPh₃)₂, TPP, CuI.

a) Reação entre fenotiazina e bromodecano. Analisou-se a síntese pelo desaparecimento do estiramento N-H (3300 cm⁻¹) e aparecimento da banda de cadeia alquílica (2900 cm⁻¹), no espectro de infravermelho obtido; b) Reação com NBS. Analisou-se por TLC e formação de precipitado; c) acoplamento de Sonogashira, em duas etapas: i) acoplamento do alcino com grupo protetor, por reação com TMS-acetileno seguido por ii) sua retirada, remanescendo alcino terminal. Estiramento característico de alcinos (2100 cm⁻¹), apareceram no espectro de infravermelho; d) acoplamento de Sonogashira. Espectroscopia no infravermelho (3300 cm⁻¹) e ressonância magnética nuclear de próton (figura 3) confirmam a síntese do material.

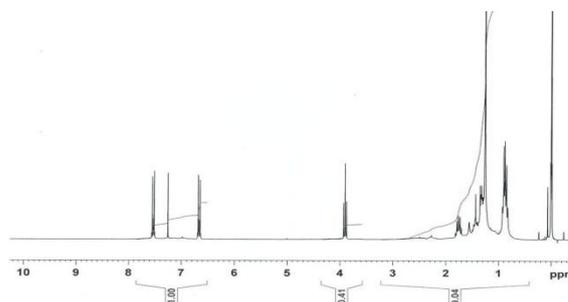


Figura 3. Espectro de ¹H-RMN do composto 1 sintetizado.

Conclusões

Nesse trabalho demonstrou-se que a síntese de novos materiais para CS e OFETs é possível a partir da fenotiazina. Notamos, que o produto possui baixo ponto de fusão e não apresenta fase líquido-cristalina, mesmo tendo geometria apropriada para tal. No entanto, o composto deverá ter suas propriedades fotocondutoras estudadas para guiar possíveis mudanças estruturais.

Agradecimentos

Ao CTI Renato Archer, à FAPESP, e a todos que contribuíram direta e indiretamente ao trabalho.

¹ Zhang, W. W.; Mao, W. L.; Hu, Y. X.; et al., *J. A. Phys. Chem.* **2009**, *113*, 9997–10004