

Síntese e Caracterização de um Polímero Conjugado Inédito Derivado de 2,1,3-Benzotiadiazol e Fluoreno

Juliana R. Cordeiro* (PG), Gustavo C. Simões (IC), Rosamaria W. C. Li (PQ), Jonas Gruber (PQ)

jr@iq.usp.br

Instituto de Química da USP

Palavras-Chave: polímero condutor, célula solar, 2,1,3-benzotiadiazol, fluoreno

Introdução

A síntese de polímeros condutores pode representar um grande avanço no desenvolvimento de novos materiais, tendo em vista a possibilidade de aplicação dessas espécies em células solares¹, LEDs (*light-emitting diodes*)², sensores de gases³ etc.

O trabalho apresentado tem como objetivo reportar a síntese e caracterização do polímero condutor inédito poli(2,1,3-benzotiadiazol-4,7-ilenovinileno-*alt*-9,9-*n*-dioctil-2,7-fluorenilenovinileno) (Figura 1).

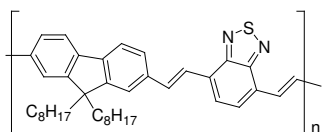


Figura 1. Estrutura do polímero sintetizado.

Resultados e Discussão

A Figura 2 ilustra a rota sintética que conduziu ao copolímero desejado.

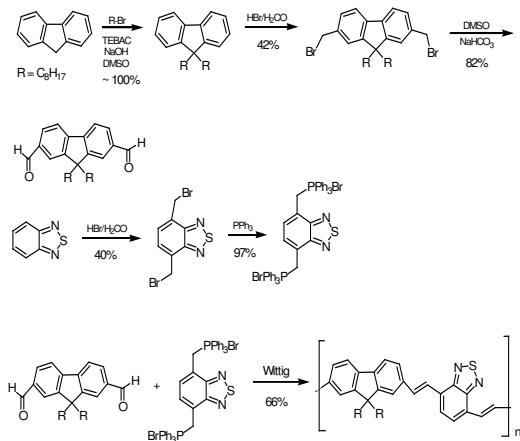


Figura 2. Rota sintética proposta para a obtenção do polímero desejado.

A rota sintética utilizada para a obtenção do copolímero consiste na reação de Wittig entre os precursores adequados derivados de fluoreno e 2,1,3-benzotiadiazol.

Para a síntese dos precursores, primeiramente, fluoreno foi dialquilado em condições de catálise de transferência de fase, sendo então dibromometilado nas posições 2 e 7 com HBr e paraformaldeído. O produto dessa reação foi oxidado com DMSO ao dialdeído correspondente. Paralelamente, 2,1,3-benzotiadiazol foi dibromometilado nas posições 4 e 7 por meio do tratamento com HBr e paraformaldeído e, em seguida, convertido ao sal de fosfônio duplo pela reação com trifetilfosfina.

Após o isolamento do polímero, esse foi submetido à isomerização radicalar com traços de iodo com o objetivo de obter apenas o isômero *trans*.

O polímero isomerizado foi caracterizado pelas técnicas de espectroscopia de RMN de ¹H e ¹³C, FTIR, termogravimetria, calorimetria exploratória diferencial, cromatografia por exclusão de tamanho, espectrofotometria de absorção no UV-VIS, espectroscopia de fluorescência molecular e análise elemental.

Conclusões

O polímero foi sintetizado com sucesso pela rota de Wittig. Sua aplicação em células solares, LEDs e sensores de gases será estudada no futuro próximo.

Agradecimentos



¹ Brabec, C. J.; Sariciftci, N. S e Hummelen, J. C. *Adv. Funct. Mater.* **2001**, *11*, 15.

² Burroughes, J. H.; Bradley, D. D. C.; Brown, A. R.; Marks, R. N.; Mackay, K.; Friend, R. H.; Bruns, P. L. e Holmes, A. B. *Nature* **1990**, *347*, 539.

³ Li, R. W. C.; Ventura, L.; Gruber, J.; Kawano, Y. e Carvalho, L. R. F. *Sens. Actuators B: Chem.* **2008**, *131*, 646.