

## Síntese de um novo polímero conjugado do tipo *push-pull* da família dos poli(*p*-fenilenovinileno)s.

Elaine Y. Yamauchi<sup>1</sup> (PG), Rosamaria W. C. Li<sup>2</sup> (PQ), Bruna R. Vieira<sup>1</sup> (IC), Juliana R. Cordeiro<sup>1</sup> (PQ), Jonas Gruber<sup>1\*</sup> (PQ).

\*jogruber@iq.usp.br

<sup>1</sup> Instituto de Química – Universidade de São Paulo, CP 26077, CEP 05513-970, São Paulo, SP.

<sup>2</sup> Centro Universitário Estácio Uniradial, Campus Vila dos Remédios, São Paulo – SP.

Palavras Chave: Polímero condutor, polímero conjugado, PPV, poli(*p*-fenileno vinileno), síntese de polímeros.

### Introdução

Uma forma de se conseguir polímeros condutores com baixa energia da lacuna proibida (Egap) é alternando unidades ricas em elétrons (doadoras) com unidades deficientes em elétrons (receptoras). Nesses casos, devido a transferências de elétrons intra-cadeia do HOMO do doador para o LUMO do receptor, a Egap se torna relativamente baixa<sup>1</sup>.

O objetivo deste trabalho é a preparação de um polímero conjugado da família dos poli(*p*-fenilenovinileno)s, PPVs, contendo unidades de 2,1,3-benzotiadiazol (elétron-deficiente) e de 2,5-dialcoxifenileno (rico em elétrons) alternados por grupos vinileno. Os grupos alcóxi são de cadeia longa (-OC<sub>8</sub>H<sub>17</sub>) para conferir solubilidade ao polímero final em solventes orgânicos usuais, permitindo a posterior processabilidade do material.

### Resultados e Discussão

O polímero **1** (Figura 1) foi formado via reação de Wittig entre o aldeído **2** e o sal de fosfônio **3**.

O aldeído **2** foi obtido a partir de hidroquinona, que foi submetida a uma reação de Williamson com brometo de octila para formar um éter aromático, o qual foi clorometilado com paraformaldeído e cloreto de hidrogênio nas posições 2 e 5, formando um composto cuja oxidação com DMSO/NaHCO<sub>3</sub> conduziu ao aldeído desejado.

Já o sal de fosfônio **3** foi formado a partir de 2,1,3-benzotiadiazol comercial, o qual foi bromometilado nas posições 4 e 7, pelo emprego de formaldeído e ácido bromídrico em ácido acético (30%), formando um composto cuja reação com trifetilfosfina conduziu ao sal de fosfônio desejado.

O polímero **1** foi caracterizado por RMN de <sup>1</sup>H e de <sup>13</sup>C e por UV-Vis. As análises por RMN foram consistentes com a estrutura do polímero. A análise por UV-Vis permitiu determinar a energia da lacuna proibida (Egap), cujo valor é de 2,18 eV. Análise de

termogravimetria indicou estabilidade térmica até 211 °C, quando ocorreu 5 % de perda de massa.

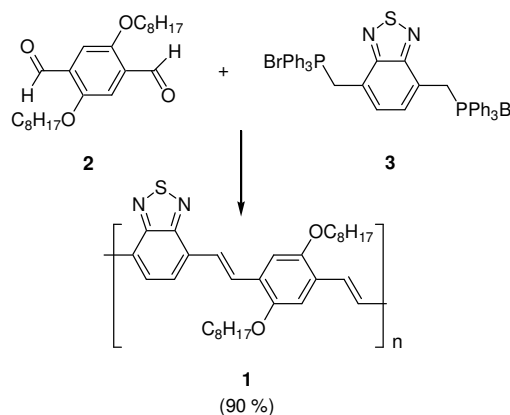


Figura 1. Etapa para a obtenção do polímero 1.

### Conclusões

O polímero proposto, poli[4,7-(2,1,3-benzotiadiazolileno)-co-(2,5-dioctiloxi-1,4-fenilenovinileno)], foi sintetizado com êxito, a partir de reagentes comerciais como hidroquinona e 2,1,3-benzotiadiazol, sendo a última etapa uma reação de Wittig. Esse polímero apresenta Egap relativamente baixo (2,18 eV) o que sugere que será possível aplicá-lo como camada ativa em dispositivos optoeletrônicos, além de sensores de gases e em narizes eletrônicos.

### Agradecimentos

À FAPESP processo nº 2011/51249-3 e ao CNPq processos nº 303717/2010-6 e 141188/2009-0 pelos auxílios financeiros

<sup>1</sup> Bundgaard, E.; Krebs, F. C.; *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **2007**, *91*, 954.