

Produção e caracterização de filmes finos com propriedades ópticas pelos métodos de casting e automontados.

Dicleyson Pereira da Rocha (*bolsista ICV*), Cleânio da Luz Lima (*Orientador, Depto de Física – UFPI*), Bartolomeu Cruz Viana Neto (*Co-orientador, Depto de Física-UFPI*), Angel Alberto Hidalgo (*Colaborador, Depto de Física-UFPI*)

INTRODUÇÃO:

Os polímeros condutores ou semicondutores apresentam propriedades semelhantes aos semicondutores inorgânicos. O Poly (2-methoxy-5-(2'-ethyl-hexyloxy)-1,4-phenylene vinylene), o MEH-PPV, derivado do PPV, é um dos polímeros mais aplicados na indústria de dispositivos eletrônicos, apresentando boa solubilidade em solventes orgânicos. Assim como o PPV, ele possui alternância de ligações simples e duplas na cadeia principal conjugada, o que lhe confere ótimas propriedades semicondutoras, fotoluminescentes e eletroluminescentes [1]. O MEH-PPV vem sendo bastante estudado devido suas propriedades elétricas e ópticas de um semicondutor. Demonstrando ser um dispositivo emissor de luz tipo Schottky exibindo relativamente grande eficiência eletroluminescente, o MEH-PPV apresenta grande mobilidade em comparação a outros polímeros conjugados, resultando numa grande densidade de corrente, sendo assim um ótimo material para construção de dispositivos fotovoltaicos [2].

O molibdato ($\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) é um material pertencente ao grupo dos óxidos de metais de transição. O grupo deste material tem sido largamente estudado devido às suas diversas estruturas e propriedades físicas, tais como: transições de fase do tipo metal isolante, condução mista, supercondutividade, expansão térmica negativa e transformações cristalográficas, principalmente quando eles são submetidos à variação de temperatura e pressão. Por apresentar a característica de condutividade espera-se que materiais desta família venha a melhorar as propriedades elétricas dos dispositivos, justificando assim a sua utilização do $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ como dopante.

METODOLOGIA:

Com o objetivo de sintetizar e caracterizar experimentalmente compósitos de filmes finos poliméricos híbridos, MEH-PPV: $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, usamos as técnicas de “**Casting**” e “**spin-coating**”. No método casting, Utilizou-se como substrato papel alumínio para a posterior realização das análises de espectroscopia Raman e Infravermelho. Para as análises de UV-vis, os filmes foram obtidos pelo método spin-coating Utilizando-se neste caso como substrato o vidro BK7. Foram feitos filmes com diferentes concentrações 0, 5, 10 e 20% de MgO em miligrama em relação ao MEH-PPV, sempre utilizando o clorobenzeno como solvente orgânico na quantidade de 2,0 mL para 8,0 mg/mL de MEH-PPV.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Apresentaremos aqui os resultados das análises das amostras realizadas com as técnicas de espectroscopia no infravermelho, Raman e UV-Vis, onde tais análises, foram utilizadas para observar se houve a interação entre o polímero MEH-PPV e o $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Na_2MoO_4).

A figura 1 mostra o comportamento dos modos vibracionais na região do infravermelho relacionado ao Na_2MoO_4 e MEH-PPV puro e dopado com Molibdato de Sódio em diferentes concentrações. Inicialmente vemos claramente que nos filmes de MEH-PPV dopados com 10 e 20% o aparecimento dos modos vibracionais 818 e 899 cm^{-1} do Na_2MoO_4 puro na figura 1a, e em 3298 cm^{-1} na figura 1b, onde tais observações estão indicadas por

setas e com seus respectivos valores de número de onda. Observamos ainda, que com o aumento da concentração de Na_2MoO_4 tais modos aumentam de intensidade.

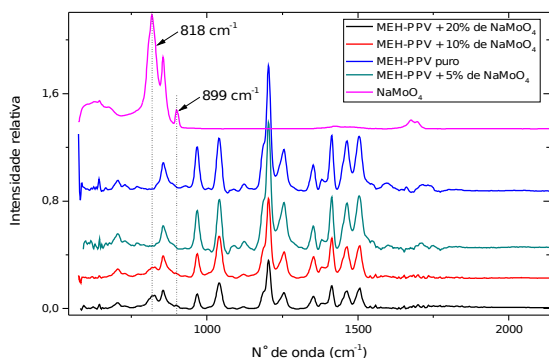


Figura 1 a. Análise espectroscópica de infravermelho (IR)

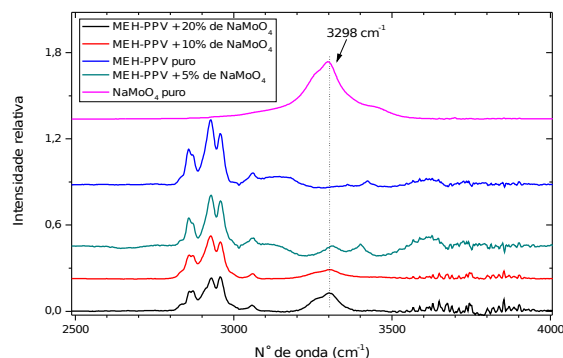
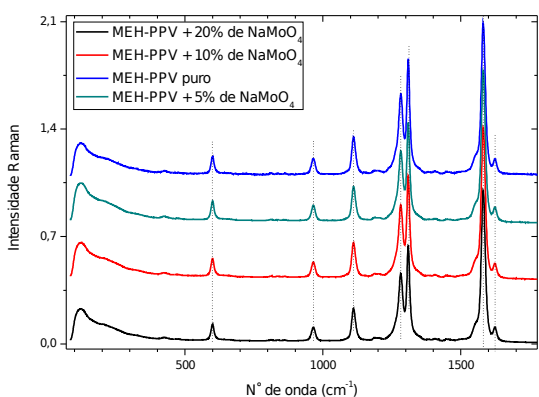


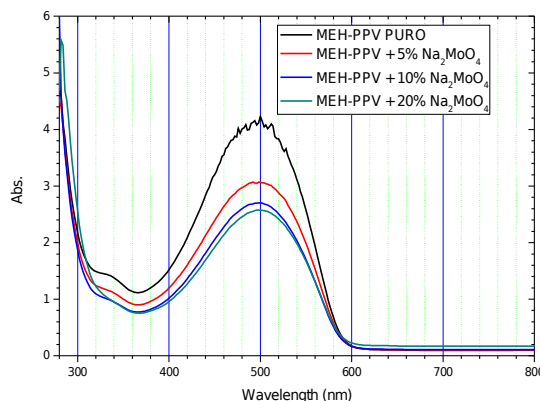
Figura 1 b. Análise espectroscópica de infravermelho (IR)

Tanto para a figura 1a e 1b observamos que os modos vibracionais da molécula do MEH-PPV dopado com as diferentes concentrações (10 e 20%) sofrem mudança em relação ao MEH-PPV puro, observado com o desaparecimento das bandas em 1600 , 3150 e 3400 cm^{-1} , o que nos indica que houve interação direta entre as moléculas de MEH-PPV e Na_2MoO_4 , isso, a princípio, não é ruim, pois todas as propriedades elétricas de ambos os materiais podem ser conservadas.

Os resultados das análises de espectroscopia Raman, não corroboram com as análises de espectroscopia no infravermelho, ou seja, não apresenta mudança dos espectros dos filmes de MEH-PPV dopados em relação ao espectro do MEH-PPV puro (Figura 2), o que nos indica, que não houve interação de ambos os materiais.



Análise espectroscópica Raman.



Espectro de absorção UV-Vis normalizado.

Figura 2

Figura 3.

Na Fig. 3. Apresentamos os espectro de absorção para os filmes de MEH-PPV puro e MEH-PPV:Na₂MoO₄.2H₂O na região do visível. Nestes espectros podemos observar duas bandas de absorção, uma em 330 nm e a outra em 500 nm. Esta centrada em torno de 500 nm (2,48 eV) é uma banda larga de absorção que é atribuída á transição π - π^* entre estados deslocalizados do polímero conjugado e representa a diferença de energia entre os estados eletrônicos HOMO-LUMO [3]. A outra banda de menos intensa, centrada em 330 nm, é atribuída á quebra de simetria da cadeia com a inserção de dois grupos substituintes [4], característicos do MEH-PPV.

Podemos observar que ambas as absorção óptica dos compósitos é suprimido à medida que se acrescenta o Na₂MoO₄.2H₂O, isso indica que este inibe a penetração de luz no compósito em relação ao polímero puro em ambas as absorção. Para a absorção em 500 nm há um pequeno deslocamento para valores maiores para os compósitos MEH-PPV: Na₂MoO₄.2H₂O em relação ao espectro de absorção do MEH-PPV puro, o que indica que houve mudança na energia entre os estados eletrônicos HOMO-LUMO, corroborando com os resultados de infravermelho.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

As notáveis semelhanças e diferenças entre os espectros Raman e infravermelho do MEH-PPV (puro e dopados) e molibdato Na₂MoO₄.2H₂O, embora tenha havido um pequeno deslocamento nos espectros de UV-Vis, nos permitem concluir que houve interação entre estes compostos, ou seja, nos espectros houve mudanças, tais como: deslocamento, aparecimento ou desaparecimento de modos vibracionais. Tal resultado é muito relevante, pois já que não ocorreu a interação entre tais materiais, a princípio, todas as propriedades elétricas de ambos os materiais foram conservadas.

APOIO:

UFPI e CAPES.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

- [1] - Nogueira, S. L. Estudos das Propriedades Ópticas, Estruturais e Elétricas do Compósito MEH-PPV/SWNT. Dissertação (Mestrado em Física) Universidade Federal de Uberlândia, 2008.
- [2] - HUNG, L.S.; C.H. CHEN. Recent progress of molecular organic electroluminescent materials and devices. Materials Science and Engineering, 2002. 39: p. 143.
- [3] - A. Petrella, M. Tamborra, P.D. Cozzoli, M.L. Curri, M. Striccoli, P. Cosma, G.M. F. Barinola, F. Babudric, F. Nasoc, A. Agostiano. TiO₂ nanocrystals - MEH-PPV composite thinfilms as photoactive material. Thin Solid Films 451- 452 (2004) 64 - 68.
- [4] - L. F. Santos. Estudo de processos de transporte em dispositivos poliméricos emissores de luz. Tese de Doutorado, IFSC, São Carlos (2003).

Palavras-chave: Polímeros.Dispositivos fotovoltaicos e eletroluminescentes.Filmes finos.