

Investigando mecanismos moleculares de formação de filmes finos de polímeros conjugados por espectroscopia de femtossegundos e microscopia confocal.

Rene A. N. Silva (PQ), Adans James Araujo e Silva (IC).

Resumo

No presente trabalho, propõe-se o estudo de blendas de polímeros conjugados híbridos inorgânicos – orgânicos contendo complexos de coordenação com o objetivo de investigar correlações entre morfologia dos filmes e suas propriedades fotofísicas.

Palavras Chave: Fotofísica, Fotoquímica, Eletrônica Orgânica.

Introdução

Nos últimos anos, vários trabalhos tem destacado a importância da preparação de novos materiais eletroluminescentes para camadas ativas emissores de luz em diodos emissores de luz orgânicos e poliméricos (OLEDs/PLEDs)¹. Neste contexto, corantes orgânicos fluorescentes e fosforescentes, semicondutores orgânicos e inorgânicos, e matrizes poliméricas eletroluminescentes representam as espécies luminescentes mais comuns, sendo adequadas para montagem de OLEDs e PLEDs.

Resultados e Discussão

Foram empregadas técnicas de espectroscopia eletrônica de absorção e emissão no estado estacionário com os compósitos de PVK:KN-10/Zn, e montados filmes finos contendo o polímero semicondutor poli-N-vinilcarbazol (PVK) com o composto KN10/Zn ([Zn(sal-5-Clpym)]) nos percentuais massa/massa (% m/m) 0,1, 0,5, 1,0, 2,5, 5,0 e 10 %. Com o aumento da concentração do KN-10/Zn nos compósitos, começou a ser observado a partir da concentração de 2,5 % duas bandas de emissão centradas em $\lambda_{em} = 495$ nm e $\lambda_{em} = 525$ nm. Essas duas bandas de emissão são provenientes do complexo KN10/Zn, sendo a segunda uma progressão vibrônica (0-1) e a primeira uma transição puramente eletrônica (0-0). Como em todos os filmes o comprimento de onda de excitação foi fixado em 295 nm, que é a excitação do PVK, supõe-se que está ocorrendo um processo de transferência de energia do polímero semicondutor para o composto de coordenação de Zn(II), que pode ser por mecanismo trivial, por transferência de carga (modelo de Dexter) ou ainda por transferência de energia ressonante entre estados de fluorescência – FRET (modelo de Förster). Foi observado um abaixamento gradativo do tempo de vida de estado excitado médio com o aumento da concentração, isto pode ser notado observando a mudança das funções exponenciais nos decaimentos de cada uma das concentrações dos compósitos, e assim foi construída uma curva

da eficiência percentual de FRET em função da fração molar do composto de coordenação KN-10/Zn, a mesma não apresentou um comportamento linear, entretanto, apresentou uma tendência coerente com o modelo de FRET, onde a eficiência de FRET aumenta com o aumento da concentração do receptor, apresentando uma variação da eficiência de FRET de 19,0 á 39,5 %. Com isto, foram obtidos os valores médios do raio de Förster (R_0) e a distância entre os dois cromóforos (r), utilizando o modelo proposto para eficiência de FRET em função da fração molar de aceitador de energia (χ_i)²:
$$E_{FRET} = \frac{1}{1 - \frac{r^6}{\chi_i \pi R_0^6}}$$

A Figura 1 apresenta a curva de eficiência de FRET (E_{FRET}) em função da fração molar de KN10/Zn, e o ajuste da curva feito pelo programa MatLab 2012, função cftool.

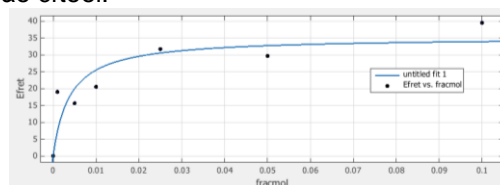


Figura 1. Ajuste da curva de EFRET em função da fração molar de KN10/Zn através da equação 1.

Conclusões

Desta forma, com o uso do modelo de Förster adaptado na equação 1, foi possível a determinação dos valores de r e R_0 , apresentado valores de 6 Å 3 Å) respectivamente, o que sem mostrou esperado de acordo com as interações intermoleculares entre os PVK e o KN10/Zn ($\pi-\pi$ stacking).

Agradecimentos

Agradeço aos doutorandos José C. Germino e Bruno F. Zornio, e a Prof^a. Dr^a Teresa D. Z. Atvars por toda orientação e suporte sem as quais não seria possível o desenvolvimento do meu projeto.

¹Friend, R. H., Gymer R. W., Holmes A. B., Burroughes J. H, Marks, R. N., Taliani C., Bradley D. D. C., Dos Santos D. A.,