

导电聚合物 PEDOT 在有机溶剂中的分散性研究^{*}

王 纲^{1,2} 姜成群^{1,2} 高彩艳^{2**} 王 新^{1**} 陈光明^{2**}

(¹ 青岛科技大学橡塑材料与工程教育部重点实验室 青岛 266042)

(² 中国科学院化学研究所 北京分子科学国家实验室 北京 100190)

摘 要 以硫酸铁为氧化剂,在 pH = 2 的条件下,通过化学氧化法制备了聚(3,4-乙撑二氧噻吩)(PEDOT),重点研究了 PEDOT 在九种有机溶剂中的分散性.结果表明,PEDOT 在 *N*-甲基吡咯烷酮中分散性最好,其分散液在静置 3 周后仍能够保持 1.35 mg/mL 的浓度.采用比重瓶法和基团贡献法,得到聚合物的密度和溶度参数分别为 105.2 cm³/mol 和 21.28 J^{0.5} cm^{-1.5};通过 Chem 3D 模拟,计算得到聚合物的偶极矩为 14.58 × 10⁻³⁰ C·m.尽管溶剂 NMP (13.64 × 10⁻³ C·m) 和 DMSO (13.34 × 10⁻³ C·m) 的偶极矩都与 PEDOT (14.58 × 10⁻³⁰ C·m) 非常接近,然而,溶剂 NMP (22.94 J^{0.5} cm^{-1.5}) 的溶度参数更接近于 PEDOT (21.28 J^{0.5} cm^{-1.5}).从溶度参数分量来看,与 DMSO (19.03 J^{0.5} cm^{-1.5}) 相比,NMP (18.03 J^{0.5} cm^{-1.5}) 与 PEDOT (16.39 J^{0.5} cm^{-1.5}) 的色散溶度参数分量也更为接近.丁达尔现象的结果表明,聚合物在有机溶剂中以胶体形式存在.红外光谱和扫描电镜的研究结果表明,PEDOT 在有机溶剂中能够保持良好的结构稳定性.

关键词 聚(3,4-乙撑二氧噻吩),分散性,溶度参数,偶极矩

自从具有导电性的聚乙炔发现以来,导电聚合物就引起了科学家的极大兴趣^[1,2].常见的导电聚合物有聚乙炔(PA)、聚噻吩(PTh)、聚苯胺(PANI)、聚吡咯(PPy)及聚乙撑二氧噻吩(PEDOT)等,由于它们特殊的 π -共轭结构和优异的物理化学性能等在很多领域都得到了广泛的研究和应用^[3-6].其中,PEDOT 以其高电导率、良好的薄膜透明性以及环境稳定性等^[7-9]吸引了越来越多研究者的关注,并在电致变色、抗静电涂层以及有机发光二极管(OLED)中显示出广阔的应用前景^[10-15].实际上,在这些应用领域中真正广泛使用的主要是 PEDOT/聚(苯乙烯磺酸)(PEDOT/PSS)复合物的水分散液^[16].这是由于 PEDOT 本身的主链具有较强的 π -共轭刚性结构,且链与链之间存在较强的 π 电子相互作用,使其在水或有机溶剂中很难溶解,造成加工处理困难,因而 PEDOT 作为单一组分的应用受到了限制;然而,在 PEDOT/PSS 体系中,作为聚电解质的 PSS 不仅可以与 PEDOT 很好的结合,而且其磺酸基作为侧基能够使 PEDOT 在水介质中得到良好的分散,从而极大地提高了 PEDOT 的可加工性,便于其实际应用.

PEDOT/PSS 体系的亲水性也会限制 PEDOT 在某些工业领域的应用.例如,为了提高薄膜的抗刮痕性以及塑料基材的可浸润性,通常需要某种具有憎水基团的聚合物键合剂与 PEDOT/PSS 体系混合,因而该体系的亲水性反而具有极为不利的影响.另外,已有研究也发现 PEDOT/PSS 膜中残余的水分不仅会降低某些电子元件的性能,而且会缩短设备的使用寿命^[17].

因此,发展有机溶剂分散的 PEDOT 体系就显得极其重要.然而,到目前为止,有关 PEDOT 在有机溶剂中分散性的研究报道很少.在 2005 年,Meerreyes 等^[18]曾报道了在聚合物离子液体存在的情况下几种常见导电聚合物(包括 PEDOT)在有机溶剂中的分散性,但没有对该聚合物离子液体在分散性实验中所起的作用给予解释.2008 年,Suh 等^[19]研究了在聚合物离子液体存在下 PEDOT 在有机溶剂中的分散性,并研究了其各组分间的相互作用.尽管聚合物离子液的存在一定程度上改善了 PEDOT 在有机溶剂中的分散性,但是一方面离子液体本身价格昂贵,另一方面离子液的存在也使得体系复杂化,对于 PEDOT 的实际

* 2014-03-26 收稿,2014-04-15 修稿;国家自然科学基金(基金号 51343005)资助项目.

** 通讯联系人,E-mail:gaocaiyan@iccas.ac.cn;wangxin@qust.edu.cn;chengm@iccas.ac.cn

doi:10.11777/j.issn1000-3304.2014.14094

应用造成诸多不利影响。

由此可见,在不加任何分散辅助剂的条件下,研究 PEDOT 在有机溶剂中的分散性对于解决聚合物的实际应用有着非常重要的现实意义. 本文首先对 PEDOT 在九种不同有机溶剂中分散性进行现象观察,比较不同溶剂对聚合物分散性的影响. 然后,通过计算得到溶剂的溶度参数及偶极矩,并与计算得到的聚合物 PEDOT 本身的溶度参数及偶极矩进行比较. 在此基础上,将 PEDOT 和溶剂分子的结构因素与宏观分散性进行比较,总结分散性规律,探讨相应机理. 另外,对其中分散性较好的体系进行了丁达尔现象实验,并用扫描电子显微镜和傅里叶变换红外光谱对聚合物在有机溶剂中分散前后的形貌和结构进行了比较研究.

1 实验部分

1.1 实验原料

N-甲基吡咯烷酮(NMP),天津博迪化工股份有限公司;四氢呋喃(THF),北京化学试剂厂;丙酮(acetone),北京化工厂;乙醇(ethanol),北京化学试剂厂;甲苯(toluene),北京化学试剂厂;三乙胺(triethylamine),西陇化工股份有限公司;间甲酚(*m*-cresol),国药集团化学试剂有限公司;氯仿(chloroform),国药集团化学试剂有限公司;二甲亚砜(DMSO),国药集团化学试剂有限公司. 以上试剂均为分析纯(AR).

1.2 主要仪器

真空干燥箱,DZF-6050 型,上海浦东荣丰科学仪器有限公司;电热恒温鼓风干燥箱,DHG-9023A 型,上海圣欣科学仪器有限公司;电子天平,AR2130 型,梅特勒-托利多仪器(上海)有限公司,精确度 0.0001 g;超声波清洗机,B5200S 型,上海元创化纤仪器科技有限公司;傅立叶变换红外光谱仪(FTIR),Perkin-Elmer System 2000 型,美国 PE 公司,采用 KBr 压片,波数范围 4000 ~ 400 cm^{-1} ;扫描电子显微镜(SEM),S-4300 型,日本日立公司,加速电压 15 kV.

1.3 PEDOT 的制备

将 3,4-乙烯二氧噻吩(3.5 mmol)和 20 mL 蒸馏水加入三角瓶中,在室温下磁力搅拌 1 h. 然后,将 25 mL 硫酸铁的水溶液(0.14 mol/L)缓慢滴加到三角瓶中,调整体系的 $\text{pH} = 2$,升温至 60 $^{\circ}\text{C}$,磁力搅拌下反应,将所得到的蓝黑色悬浮物过滤、洗涤,最后于 60 $^{\circ}\text{C}$ 真空干燥 24 h 后,得

到固体粉末 PEDOT^[20].

1.4 PEDOT 在有机溶剂中的分散

称取 0.1 g PEDOT,分别置于 9 个 50 mL 的血清瓶中,加入不同的有机溶剂,进行超声分散 30 min. 然后,将分散体系静置,在特定的时间取出适量的分散液,真空干燥后称重,计算得到所分散的聚合物的质量.

1.5 聚合物密度的计算

聚合物密度的计算方法采用比重瓶法,以无水乙醇为浸渍液. 首先,取干净的 5 mL 容量瓶称重备用,质量记为 M_0 ;加入一定量的聚合物粉末,质量记为 M_1 ;加入无水乙醇至刻度线处称重,质量记为 M_2 ;聚合物的密度记为 ρ ,无水乙醇的密度记为 ρ_1 . 聚合物密度的计算公式为:

$$\rho = \frac{M_1 - M_0}{5 - \frac{M_2 - M_1}{\rho_1}} \quad (1)$$

1.6 聚合物溶度参数的计算

聚合物溶度参数按基团贡献法计算^[21]. 首先,确定聚合物中的结构单元类型和个数;然后,根据结构单元类型和个数计算各基团的摩尔引力常数 F 值之和($\sum F$);按照聚合物的密度计算出聚合物单元的摩尔体积;最后根据公式(2)计算得到聚(3,4-乙烯二氧噻吩)的溶度参数.

$$\frac{\sum F}{\bar{V}} \quad (2)$$

1.7 聚合物偶极矩的计算

通过在 Chem 3D 中画出的聚合结构球棍模型,经软件计算得到聚合物的偶极矩.

1.8 有机溶剂分散液的丁达尔现象

对于能够超声均匀分散且保持长时间不完全沉淀的分散体系,将血清瓶中的试剂取出一部分,放入 5 mL 的烧杯中,用激光笔照射,观察丁达尔现象.

1.9 分散前后聚合物结构及形貌的表征

用红外光谱和扫描电子显微镜,表征了聚合物的结构以及形貌.

2 结果与讨论

2.1 PEDOT 的制备

利用酸性条件下氧化剂硫酸铁不会水解和硫酸不易挥发的性质,在 60 $^{\circ}\text{C}$ 的反应温度和 $\text{pH} = 2$ 的条件下,通过化学氧化聚合,制备了较高产率的 PEDOT(65.1%)^[20].

2.2 PEDOT 在不同溶剂中的分散性实验

根据前述的分散方法,将 PEDOT 分别分散到间甲酚、*N*-甲基吡咯烷酮、二甲亚砜、乙醇、四氢呋喃、丙酮、氯仿、甲苯和三乙胺九种有机溶剂中.表

1 为超声分散后静置 1 h、72 h 和 3 周时上层分散相的浓度,图 1 为超声分散后 1 h、72 h 和 3 周的分散现象数码照片.

从表1可以看出,在超声分散静置1 h之后,

Table 1 PEDOT concentration change in the upper layer of the dispersion

Solvent	<i>m</i> -Cresol	NMP	DMSO	EtOH	THF	Acetone	CHCl ₃	Toluene	Et ₃ N
after 1 h (mg/mL)	2.13	1.93	1.47	1.05	0.63	0.45	0.4	0	0
after 72 h (mg/mL)	1.17	1.40	0.80	0.22	0.63	0.40	0	0	0
after 3 weeks (mg/mL)	0.82	1.35	0.75	0	0	0	0	0	0

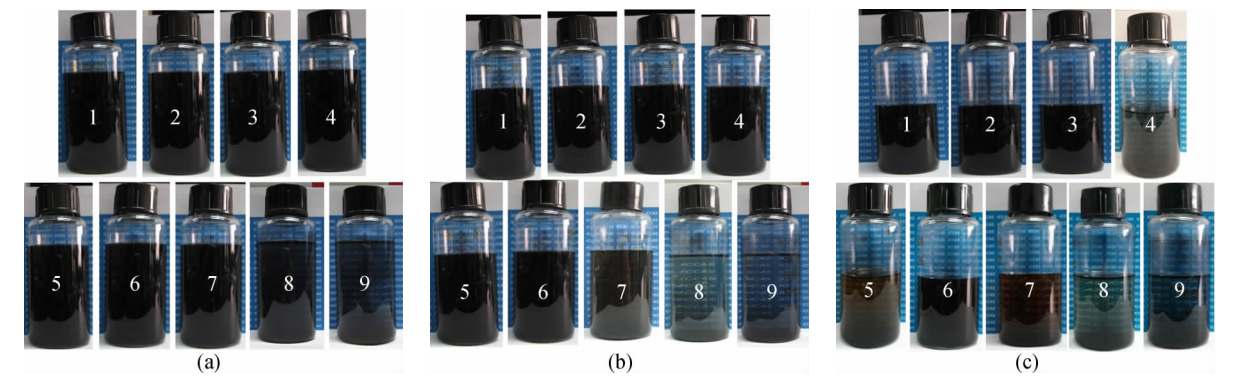


Fig. 1 Digital photos of the PEDOT dispersion systems after ultrasonic treatment and subsequent standing for (a) 1 h, (2) 72 h and (c) 3 weeks in different solvents: (1) *m*-cresol, (2) *N*-methyl pyrrolidone, (3) dimethyl sulfoxide, (4) ethanol, (5) tetrahydrofuran, (6) acetone, (7) chloroform, (8) toluene and (9) triethylamine, respectively

三乙胺和甲苯对于 PEDOT 的分散性最差,溶剂上层已经变得澄清透明(如图 1(a)所示),PEDOT 在这两种溶剂中的分散浓度基本为 0 mg/mL;分散性较差的还有氯仿、丙酮和四氢呋喃,分散浓度在 0.5 mg/mL 左右;分散性较好的有间甲酚、*N*-甲基吡咯烷酮、二甲亚砜、乙醇,其分散浓度均高于 1.0 mg/mL,其中间甲酚甚至超过 2.0 mg/mL.

经超声分散后静置 72 h,发现所有溶剂分散体系均出现一定程度的沉降,上层分散体系的浓度都有所减小.这表明,溶剂和聚合物不能形成非常稳定和热力学相容的两相体系.其中,虽然从图 1(b)观察,以氯仿为溶剂的体系分散液上层颜色很浅,但此时聚合物在氯仿中的分散浓度已经检测不出来,这表明氯仿对于聚合物不仅具有较差的分散性,而且分散体系也非常不稳定;PEDOT 在乙醇中的分散体系浓度下降也非常明显,静置后上层液体浓度仅约为 0.22 mg/mL.

另外,从表 1 也可看出,在超声分散后静置 3 周之后,仅剩间甲酚、*N*-甲基吡咯烷酮和二甲亚砜体系中仍能检测到上层液体中的聚合物分散浓度,而在其它溶剂中的聚合物含量都为 0 mg/mL.从图 1(c)的数码照片也可以得到相同的结论.可

以看出,除了前 3 种溶剂的分散体系呈现黑色不透明状态,其他几种溶剂体系都已经变得透明或接近透明.

2.3 溶剂的溶度参数及偶极矩对分散性的影响

为解释 PEDOT 在不同溶剂中的分散性的差异,我们根据“相似相溶”原理及溶度参数相近原则,对不同溶剂的溶度参数和偶极矩进行汇总,从中分析分散性差异的原因.为了便于进行比较,表 2 不仅列出了不同溶剂分子的溶度参数、溶度参数分量^[22]以及偶极矩,同时也给出了 PEDOT 的文献报道溶度参数、部分溶度参数分量^[23,24]以及通过计算得到的偶极矩(由于三乙胺和甲苯分散能力太差,故不在此列出).

根据溶度参数相近原则,不仅需要溶剂的溶度参数数据,还需通过计算得到 PEDOT 的溶度参数,并与文献值进行对照.根据公式(1)计算得到 PEDOT 的密度为 1.331 g/cm³,进一步得到 PEDOT 的单元摩尔体积为 105.2 cm³/mol. PEDOT 结构如图 2 所示,从图中可以看出, PEDOT 的重复单元中含有 2 个—CH₂—、2 个—O—(醚)、2 个=C<(芳香)、2 个—C=(芳

Table 2 Solubility parameters and dipole moments of solvents^a

Solvent	<i>m</i> -Cresol	NMP	DMSO	EtOH	THF	Acetone	CHCl ₃	PEDOT
δ(J ^{0.5} cm ^{-1.5})	22.75	22.94	29.87	26.56	19.44	20.03	19.03	21.28
δ _d (J ^{0.5} cm ^{-1.5})	18.03	18.03	19.03	15.91	16.84	15.53	17.84	16.39
δ _p (J ^{0.5} cm ^{-1.5})	5.12	12.32	19.44	2.11	5.71	10.41	3.11	—
δ _{hi} (J ^{0.5} cm ^{-1.5})	12.93	7.22	12.34	19.44	8.02	7.02	5.71	—
Dipole moment (10 ⁻³⁰ C·m)	5.15	13.64	13.34	5.60	5.70	8.97	3.84	14.58

^aδ: Solubility parameter; δ_d: Dispersion solubility parameter; δ_p: Dipole solubility parameter; δ_{hi}: Hydrogen bonding solubility parameter

香)以及1个—S—。因此,其重复单元总的摩尔引力常数值为:Σ*F* = 2 × 131.5 + 2 × 115.0 + 2 × 84.5 + 2 × 117.1 + 209.4 = 2265.8 J^{0.5} cm^{1.5} mol⁻¹^[21]。根据公式(2),计算得到其溶度参数为21.28 J^{0.5} cm^{-1.5},与文献报道值(10.4 cal^{0.5} cm^{-1.5})^[24]一致。

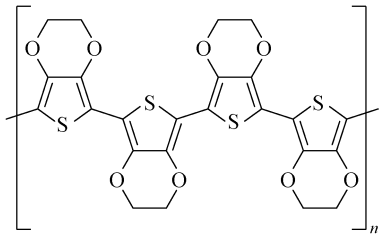


Fig. 2 Structure diagram of PEDOT

聚合物偶极矩的计算,如图3所示,可根据Chem 3D的聚合物结构球棍模型,通过软件计算得到聚合物的偶极矩为14.58 × 10⁻³⁰ C·m,该结果列于表2中。

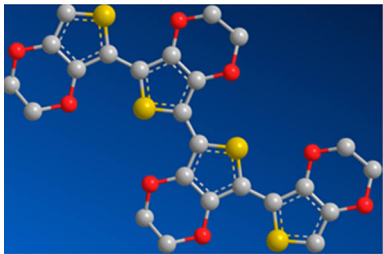


Fig. 3 3D model of PEDOT after optimization

总的来看,由于*N*-甲基吡咯烷酮和二甲亚砜的溶度参数和偶极矩均与PEDOT相近,因此可以很好地解释PEDOT在这两种溶剂中分散性较好的结果。对于其他几种溶剂而言,至少有一种参数与PEDOT相差较大,所以其分散性相对较差。其中,溶剂NMP与PEDOT更为符合“相似相溶”的原则,而且从各溶度参数分量^[21]来看,NMP的色散溶度参数分量也与PEDOT更为接近。

需要说明的是,尽管间甲酚与PEDOT的溶度参数相差较大,但是3周之后的分散浓度仍有0.8 mg/mL左右,这可能主要归因于其较大的黏

度。另外,经静置后,分散体系浓度下降最为显著的是含有间甲酚的体系。其静置后上层液体浓度约为1.17 mg/mL,明显低于其静置前的浓度2.13 mg/mL。间甲酚中的分散体系浓度在静置前后之所以有如此大的变化,也可能是由于间甲酚较大的黏度导致的沉降阻力造成的。尽管短时间内(1 h后),聚合物粒子由于较大的沉降阻力不容易沉降,但是随着时间的延长,大量聚合物粒子还是会沉降下来。

2.4 分散体系的丁达尔现象

对于几种分散性较好的溶剂体系(二甲亚砜、*N*-甲基吡咯烷酮、四氢呋喃、丙酮、间甲酚和乙醇)的分散液,进行了丁达尔现象的观察。从图4中,可以清楚地观察到丁达尔现象,表明聚合物在溶剂中是以胶体形式分散的。

2.5 分散对聚合物结构和形貌的影响

为了解溶剂分散后对聚合物的结构有无影响,对用间甲酚、*N*-甲基吡咯烷酮、二甲亚砜、乙醇、丙酮和氯仿分散干燥后的聚合物进行了红外光谱测试,结果如图5所示。可以看出,分散前后聚合物特征谱带的形状和位置均无明显变化。在693、841和983 cm⁻¹的特征吸收带为噻吩环中的C-S键的伸缩振动吸收;在1517和1345 cm⁻¹处的特征吸收谱带为噻吩环的C—C单键或C=C双键的伸缩振动吸收;在1091和1209 cm⁻¹为C—O—C的伸缩振动^[25]。另外,在1647 cm⁻¹处的吸收非常弱,说明PEDOT基本上是以未掺杂的形式存在的^[20]。由此可见,分散实验并没有改变聚合物的分子结构,也就是说聚合物在这些有机溶剂中是可以稳定存在的。

同时,我们也对分散前的聚合物和在不同溶剂中分散干燥后得到的聚合物的形貌通过SEM进行了观察,结果如图6所示。从图6(a)可以看出,分散前的PEDOT是以纳米尺寸的鳞片状结构存在的。在不同有机溶剂中分散后得到的PEDOT也基本都呈现类似的纳米鳞片状结构,如图6(b)

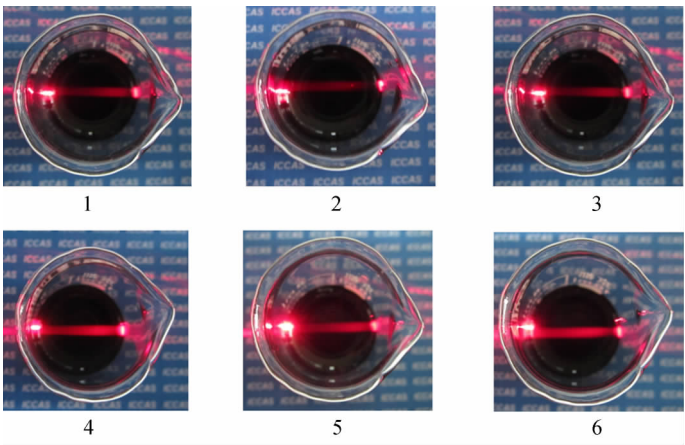


Fig. 4 Tyndall effect of PEDOT in different dispersions with solvents of (1) dimethyl sulfoxide, (2) *N*-methyl pyrrolidone, (3) tetrahydrofuran, (4) acetone, (5) *m*-cresol and (6) ethanol, respectively

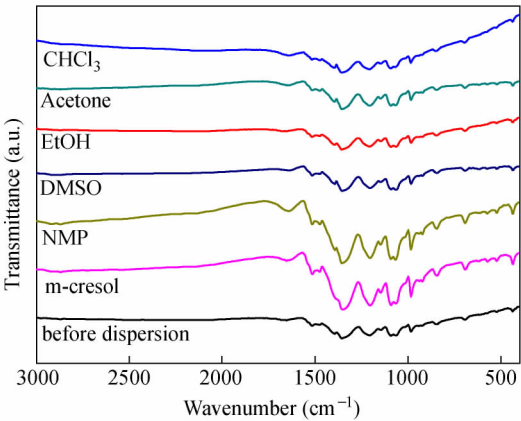


Fig. 5 FTIR spectra of dried PEDOT before and after being dispersed

~6(g). 该结果从微观形貌上也说明 PEDOT 在所分散的有机溶剂中具有很好的稳定性.

3 结论

通过对 PEDOT 在不同有机溶剂中的分散性实验研究,并结合“相似相溶”原理,将实验数据和结构参数相关联,认为 PEDOT 在有机溶剂中分散性的主要影响因素是溶度参数和偶极矩. 只有当聚合物的溶度参数和偶极矩同时与溶剂的溶度参数和偶极矩相近时,聚合物才会在该溶剂中表现出良好的分散性和稳定性;丁达尔现象表明聚合物在有机溶剂中是以胶体形式存在的;红外光谱和形貌观察的结果说明聚合物在有机溶剂中的

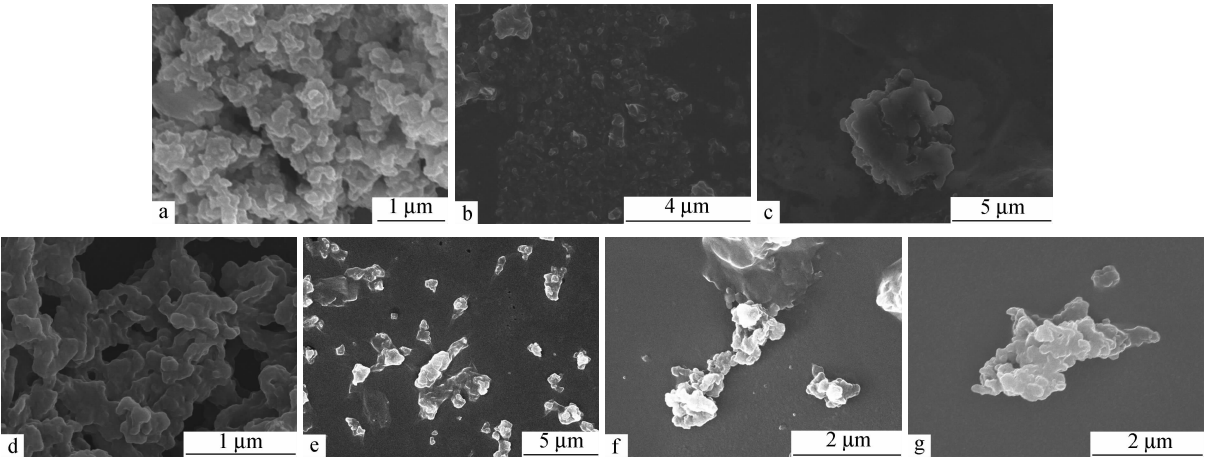


Fig. 6 SEM images of dried PEDOT (a) before dispersion; (b) ~ (g) after dispersion in *m*-cresol, *N*-methyl pyrrolidone, dimethyl sulfoxide, ethanol, acetone and chloroform, respectively

分散不会改变其分子结构和微观形貌,具有非常好的稳定性. 本研究工作的结果对 PEDOT 的实际

应用具有指导意义,可能拓宽 PEDOT 的应用范围和领域.

REFERENCES

1 Shirakawa H, Louis E J, MacDiarmid A G, Chiang C K, Heeger A J. J Chem Soc, Chem Commun, 1977, 578 ~ 579

2 Ito T, Shirakawa H, Ikeda S. J Polym Sci, Polym Chem, 1974, 12(1): 11 ~ 17

3 Hassan K, Mousavim F, Shamsipur M. J Power Sources, 2003, 114(2): 303 ~ 308

4 Guimard N K, Gomez N, Schmidt C E. Prog Polym Sci, 2007, 32(8-9): 876 ~ 921

5 Zhang Z M, Wang Y, Li Q, Yu L M, Trivas-Sejdic J, Zhang L J. Chinese J Polym Sci, 2013, 31(3): 503 ~ 513

6 Wei Yan(危岩), Li Baosong(李保松), Fu Changkui(付长奎), Qi Hongxu(齐宏旭). Acta Polymerica Sinica(高分子学报), 2010, (12): 1399 ~ 1405

7 Heywang G, Jonas F. Adv Mater, 1992, 4(2): 116 ~ 118

8 Kwon C W, Campet G, Kale B B. Active and Passive Electronic, 2003, 26(2): 81 ~ 86

9 Zhang Sha(张莎). Synthesis of Conducting Polymer PEDOT Dispersion and Application in Antistatic Coating(导电聚合物 PEDOT 分散体的制备及其在抗静电涂料中的应用研究). Doctoral Dissertation of South China University of Technology(华南理工大学博士学位论文), 2010

10 Jonas F, Morrison J T. Synth Met, 1997, 85(1-3): 1397 ~ 1398

11 Brown T M, Kim J S, Friend R H, Cacialli F, Daik R, Feast W. J Appl Phys Lett, 1999, 75(12): 1679 ~ 1681

12 Heuter H W, Wehrmann R, Kirchmeyer S. Adv Funct Mater, 2002, 12(2): 89 ~ 94

13 Yun H, Han J H, Kim S. Polym J, 2012, 44(12): 1238 ~ 1243

14 Su Z, Wang L, Li Y, Zhao H, Chu B, Li W. Nanoscale Res Lett, 2012, 7: 465(1-6)

15 King Z A, Shawb C M, Spanninga S A, Martin D C. Polymer, 2011, 52(5): 1302 ~ 1308

16 Groenendaal L, Jonas F, Freitag D, Pielartzik H, Reynolds J R. Adv Mater, 2000, 12(7): 481 ~ 494

17 de Jong M P, van Ijzendoorn L J, de Voigt M J A. Appl Phys Lett, 2000, 77(14): 2255 ~ 2257

18 Marcilla R, Ochoteco E, Pozo-Gonzalo C, Grande H, Pomposo J A, Mecerreyes D. Macromol Rapid Commun, 2005, 26(14): 1122 ~ 1126

19 Kim T Y, Lee T H, Kim J E, Kasi R M, Sung C S P, Sun K S. J Polym Sci: Part A: Polym Chem, 2008, 46(20): 6872 ~ 6879

20 Jiang C, Chen G, Wang X. Synth Met, 2012, 162(21-22): 1968 ~ 1971

21 He Manjun(何曼君), Chen Weixiao(陈维孝), Dong Xixia(董西侠). Polymer-Physics(高分子物理), Revised edition(修订版). Shanghai (上海): Fudan University Press(复旦大学出版社), 2001. 116 ~ 118

22 Barton A F M. CRC Handbook of Solubility Parameters. 2nd ed. London: CRC Press, 1991. 96 ~ 103

23 Barton A F M. CRC Handbook of Solubility Parameters. 2nd ed. London: CRC Press, 1991. 182 ~ 183

24 Li Y, Feng Y, Feng W. Synth Met, 2012, 162(9-10): 781 ~ 787

25 Zhang X, Liu J, Xu B, Su Y, Luo Y. Carbon, 2011, 49(6): 1884 ~ 1893

Dispersion of Electrically Conductive Polymer PEDOT in Organic Solvents

Gang Wang^{1,2}, Cheng-qun Jiang^{1,2}, Cai-yan Gao^{2*}, Xin Wang^{1*}, Guang-ming Chen^{2*}

(¹ Key Laboratory of Rubber-Plastics, Ministry of Education, Qingdao University of Science & Technology, Qingdao 266042)

(² Beijing National Laboratory of Molecular Sciences (BNLMS), Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190)

Abstract Using iron sulphate as oxidant, poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT) was prepared by chemical oxidation method under the condition of pH = 2. The dispersion of PEDOT in nine different organic solvents was studied. *N*-methyl pyrrolidone displayed the best dispersibility for the polymer; after standing for 3 weeks, the dispersion system still retained a high concentration of 1.35 mg/mL. The density of the polymer was calculated by means of pycnometer method. According to group contribution method, the solubility parameters of the polymer were obtained. The dipole moment of polymer was also calculated with the assistance of the simulation of Chem 3D. Importantly, the solubility parameter and dipole moment were concluded to be two major factors affecting the dispersibility of the polymer in organic solvent. In other words, when both the solubility parameter and the dipole moment of PEDOT are simultaneously close to those of the solvent, the polymer will display good dispersibility in this solvent. Although the dipole moments of solvent NMP ($13.64 \times 10^{-3} \text{ C}\cdot\text{m}$) and DMSO ($13.34 \times 10^{-3} \text{ C}\cdot\text{m}$) are all very close to that of PEDOT ($14.58 \times 10^{-3} \text{ C}\cdot\text{m}$), the solubility parameter of solvent NMP ($22.94 \text{ J}^{0.5} \text{ cm}^{-1.5}$) is more close to that of polymer PEDOT ($21.28 \text{ J}^{0.5} \text{ cm}^{-1.5}$). From the viewpoint of the solubility parameter component, compared to DMSO ($19.03 \text{ J}^{0.5} \text{ cm}^{-1.5}$), the solvent of NMP ($18.03 \text{ J}^{0.5} \text{ cm}^{-1.5}$) has closer dispersion solubility parameter component to the polymer ($16.39 \text{ J}^{0.5} \text{ cm}^{-1.5}$). Additionally, the observed Tyndall phenomenon suggests the colloidal state of PEDOT in the organic solvents. The structure stability of polymer was further confirmed *via* infrared spectroscopy and scanning electron microscopy.

Keywords Poly(3,4-ethylenedioxythiophene), Dispersability, Solubility parameter, Dipole moment

* Corresponding authors; Cai-yan Gao, E-mail: gaocaiyan@iccas.ac.cn

Xin Wang, E-mail: wangxin@qust.edu.cn

Guang-ming Chen, E-mail: chengm@iccas.ac.cn