

A Luminescência do Eu^{3+} como Ferramenta para a Elucidação Estrutural: Linguagem, Modelos e Conceitos.

João V. Escremin^{1,2*} (PG), Katia J. Ciuffi¹ (PQ), Eduardo J. Nassar¹ (PQ), Paulo S. Calefi^{1*} (PQ).

joiescremin@iq.com.br e/ou pscalefi@unifran.br

1 – UNIFRAN - Universidade de Franca, Av. Armando Salles Oliveira, 201, CEP 14404-600, Franca-SP, Brasil.
2 - UNIFEV: Centro Universitário de Votuporanga, R. Pernambuco, 4196, CEP 15500-006-SP, Votuporanga-SP, Brasil

Palavras Chave: *Luminescência, Linguagem, Modelos.*

Introdução

A elaboração de conceitos no nível microscópico envolve a abstração e depende do estabelecimento de relações adequadas entre os níveis fenomenológico e teórico-conceitual. Neste contexto a linguagem despenha papel importante no processo de construção e de comunicação de conhecimentos científicos¹.

A luminescência é um fenômeno amplamente explorado por grupos de pesquisa, com destaque para o Eu^{3+} cujas propriedades luminescentes têm sido utilizadas como ferramenta para elucidação estrutural. Em pesquisa recente² analisamos os trabalhos apresentados nas RAs da SBQ, da 25^a à 29^a, e detectamos que cerca de 4% dos resumos da divisão de Química Inorgânica e de 1% dos da Divisão de Química de Materiais utilizam a luminescência do Eu^{3+} para a obtenção de evidências sobre o ambiente químico ao redor do íon e, conseqüentemente, inferir sobre sítios de simetria, arranjos cristalinos e mudanças de estrutura, tanto em sistemas químicos quanto em biológicos.

A análise dos textos também permitiu observar a utilização de algumas frases, que talvez, poderiam ser consideradas jargões pois estão presentes na maioria dos trabalhos. Por outro lado, nos preocupa a possibilidade destas expressões estarem sendo utilizadas de forma mecânica sem atribuição de significados químicos, principalmente pela apropriação de discursos por parte de iniciantes que ainda não dominam o estado da arte. Este fato aliado à não existência de um material didático específico para este tema, nos levou a propor a elaboração de um modelo que possibilite o entendimento dos termos utilizados pelos espectroscopistas, através da transposição do representacional para o fenomenológico. Para tal foi construído um modelo para os orbitais f com massa para biscuit, que foi utilizado no desenvolvimento de explicações sobre os fenômenos mais freqüentemente citados.

Resultados e Discussão

A primeira parte do trabalho consistiu em buscar nos trabalhos apresentados nas RAs da SBQ (da 25^a a 29^a) expressões que fossem de uso corriqueiro em trabalhos que envolvessem a luminescência do Eu^{3+} como ferramenta para a elucidação estrutural. Abaixo são apresentados alguns trechos que envolvem expressões muito presentes em trabalhos sobre luminescência.

Os espectros de emissão... mostram as bandas características das transições $^5D_0 @ ^7F_J$ ($J = 0, 1, 2, 3$ e 4) e de algumas das transições dos níveis D de energias mais elevadas³.

A presença da transição $^5D_0 @ ^7F_0$ como pico único indica que há pelo menos um sítio de simetria não centrossimétrico⁴.

... apresentam um único pico em torno de 580nm, que corresponde a transição $^5D_0 @ ^7F_0$. Esta transição ocorre apenas quando o íon Eu(III) encontra -se em baixa simetria⁵.

... o desdobramento da transição $^5D_0 @ ^7F_2$ em cinco componentes permite inferir que o complexo misto pertence ao grupo pontual C_n, C_{nv}, C_s ou C_i ⁶.

Os espectros de emissão indicaram uma ocupação não homogênea dos íons Eu III na estrutura da sílica e a existência de ambientes sem centro de inversão⁶.

O composto de $\text{Gd}_2(\text{WO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}$ apresenta alta eficiência quântica de emissão em 393nm ($\eta=64\%$)⁷...

Na etapa seguinte, foram desenvolvidas explicações para os fenômenos citados, utilizando o modelo construído e se respaldando em uma linguagem acessível.

Conclusões

Este trabalho se apresenta como uma alternativa a carência de materiais didáticos sobre o uso da luminescência do Eu^{3+} como ferramenta para a elucidação estrutural.

Agradecimentos

Fapesp, CNPq, CAPES e UNIFEV.

¹Silva, A.C.T., Costa, L.P., *Resumos da 27^a RA da SBQ*, Salvador, Brasil, 2004.

²Escremin, J.V., Ciuffi, K.J., Nassar, E.J., Calefi, P.S., *Resumos do 16^o Encontro da Regional IPWS da SBQ*, Franca, Brasil, 2007.

³Nasti, S., Figueiredo, A.T., Batista, A.A., Leite, E.R., Longo, E., Varela, J.A. e Rosa, I.L.V., *Resumos da 29^a RA da SBQ*, Águas de Lindóia, Brasil, 2006.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

⁴ *Dochi, R. S.; Davolos, M. R.; Massabni, A. C.; Lima de, S. A. M., Resumos da 29ª RA da SBQ, Águas de Lindóia, Brasil, 2006.*

⁵ *Belian, M. F.; Farias de, R. F.; Alves jr., S.; Sá de, G. F., Resumos da 27ª RA da SBQ, Salvador, Brasil, 2004.*

⁶ *Nassor, E. C. O.; Avila, L. R.; Pereira, P. F. S.; Nassar, E. J.; Ciuffi, K. J.; Calefi, P. S.; Mello, C., Resumos da 29ª RA da SBQ, Águas de Lindóia, Brasil, 2006.*

⁷ *Kodaira, C.A.; Brito, H.F.; Malta, O.L. e Serra, O.A, Resumos da 25ª RA da SBQ, Poços de Caldas, Brasil, 2002.*