

# Ácido 2(benzo[d]oxazol-2-iltio) acético: Um novo precursor para complexo com íons lantanídeos.

Cristiane Kelly de Oliveira<sup>1</sup>(PG), Rodolfo Rodrigues Nunes da Silva(IC), Ivani Malvestiti(PQ) e Severino Alves Júnior(PQ).

Departamento de Química Fundamental CCEN – UFPE, Recife-PE.

E-mail: ckoliveira@gmail.com

Palavras Chave: lantanídeo, luminescência, complexos.

## Introdução

Compostos de coordenação de íons lantanídeos são amplamente estudados por apresentarem linhas espectrais definidas, elevada luminescência e longos tempos de vida de emissão. O desenvolvimento de novos ligantes que intensifiquem a luminescência desses compostos tem atraído a atenção de muitos pesquisadores, uma vez que os mesmos apresentam aplicações como sondas luminescentes, OLED's, sensores biológicos e clínicos, dentre outros<sup>1</sup>.

Neste trabalho, estão descritas as sínteses do ligante, ácido 2(benzo[d]oxazol-2-iltio) acético e dos complexos com os íons trivalentes de európio, térbio e gadolínio, bem como o estudo de suas propriedades espectroscópicas.

## Resultados e Discussão

O ácido 2(benzo[d]oxazol-2-iltio) acético (ABAc), ilustrado na figura 1, foi obtido da reação entre o 2-mercaptobenzoxazol e 2-bromoacetato de etila, seguida de hidrólise. Os dados de RMN <sup>1</sup>H, infravermelho e ponto de fusão são apresentados na tabela 1.

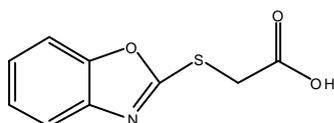


Figura 1. Ácido 2(benzo[d]oxazol-2-iltio) acético (ABAc).

Tabela 1. Dados da caracterização do ligante.

P.F. (°C)	RMN <sup>1</sup> H (ppm)	IV (cm <sup>-1</sup> )
155-160	4,03 (2H)	3.410 (ν <sub>OH</sub> )
	7,34 (2H)	1.700 (ν <sub>C=O</sub> )
	7,5 (1H)	648 (ν <sub>C-S</sub> )
	7,63 (1H)	

Os complexos de fórmula geral [Ln(ABAc)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (figura 2), com Ln = Eu<sup>3+</sup>, Tb<sup>3+</sup> e Gd<sup>3+</sup>, foram obtidos da reação do sal de lantanídeo (0,15 mmol) e do ABAC (0,45 mmol) em solução etanólica contendo NaOH, mantendo-se o pH=6,0. A análise elementar está em boa concordância com a estrutura proposta e a coordenação é confirmada pelo espectro de IV

através do deslocamento do estiramento da carbonila de 1.700 cm<sup>-1</sup> para 1.574 cm<sup>-1</sup>. A diferença de 158 cm<sup>-1</sup> entre os estiramentos ν<sub>as</sub> (COO<sup>-</sup>) e ν<sub>s</sub> (COO<sup>-</sup>) indica que o ligante está coordenado de forma bidentada<sup>2</sup>.



Figura 2. Estrutura dos complexos [Ln(ABAc)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>].

Foram obtidos espectros de excitação e emissão destes complexos. Da análise do espectro de excitação (figura 3a) do complexo de Eu<sup>3+</sup> é possível observar λ<sub>máx</sub> em 396 nm. O espectro de emissão deste complexo (figura 3b) apresenta algumas das transições características do íon európio (<sup>5</sup>D<sub>0</sub> → <sup>7</sup>F<sub>J</sub>, com J = 0, 1, 2, e 4). A presença da transição <sup>5</sup>D<sub>0</sub> → <sup>7</sup>F<sub>0</sub>, apesar de pouco intensa, indica que o sítio em que o íon európio se encontra não apresenta centro de inversão e que o composto deve pertencer a um grupo pontual de baixa simetria do tipo C<sub>s</sub>, C<sub>v</sub> ou C<sub>nv</sub>.

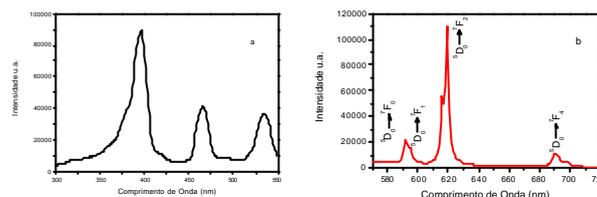


Figura 3. Espectros de excitação (a) e emissão (b) do complexo de [Eu(ABAc)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] excitado em 396 nm a 300 K.

## Conclusões

O ABAC e os complexos foram sintetizados e caracterizados via IV, RMN e análise elementar. Os complexos foram obtidos sob a forma de sólidos brancos estáveis e apresentaram boa luminescência tanto para o complexo com Eu<sup>3+</sup> quanto para Tb<sup>3+</sup>.

## Agradecimentos

CNPq, CAPES e RENAMI.

<sup>1</sup> de Sá, G.F., Malta, O.L., Donegá, C. de M., Simas, A.M., Longo, R.L., Santa-Cruz, P.A., , Silva Jr., E.F., *Coord. Chem. Rev.*, **2000**, *196*, 165.

<sup>2</sup>Zolin, V. F., *J. Alloys Comp.*, **2004**, *380*, 101.