

Modelagem e estudo dos parâmetros de intensidades de um novo complexo de európio com anidrido benzenoselenínico.

Ana Paula Souza (PG)*, Severino Alves Júnior (PQ) e Oscar Loureiro Malta (PQ)
 anasouza.quimica@yahoo.com.br

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901, Recife-PE.

Palavras Chave: Európio, intensidades f-f, modelo Sparkle

Introdução

O estudo das intensidades f-f em complexos de lantanídeos é baseado na teoria de Judd-Ofelt publicada em 1962 [1-2]. O fato do íon európio apresentar seu nível emissor não degenerado possibilita seu uso como sonda luminescente, nos dando informações sobre o seu ambiente químico. O conhecimento da geometria do complexo permite-nos calcular os parâmetros de intensidades f-f. Quando não é possível obter a estrutura cristalográfica do mesmo, utilizam-se modelos fundamentados em métodos de química quântica. Dentre estes destacamos o modelo Sparkle desenvolvido na UFPE [3]. No cálculo da posição dos estados tripleto e singletos dos ligantes que formam o complexo usamos o modelo INDO/S-CI (*Intermediate Neglect of Differential Overlap/Spectroscopic-Configuration Interaction*) implementado no programa ZINDO [4].

Resultados e Discussão

O complexo foi sintetizado e apresentou as transições características do íon európio. A geometria otimizada pelo modelo Sparkle (Fig. 2) classificou o complexo como pertencente ao grupo de simetria C_1 , corroborando com a presença da transição $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$ no espectro de emissão. A relativa concordância entre o espectro de absorção teórico e experimental indica que a geometria otimizada está coerente.

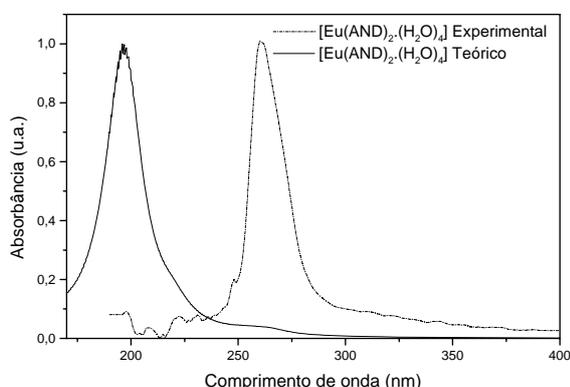


Fig. 1. Espectros de absorção teórico e experimental do $[Eu(AND)_2.(H_2O)_4]Cl_3.(H_2O)_4$.

A Tabela 1 mostra os valores dos parâmetros de intensidades teóricos e experimentais, este resultado indica que o íon európio está em um ambiente químico pouco polarizável quando comparado aos complexos com ligantes β -dicetonas[].

Tabela 1. Parâmetros de intensidades experimentais e teóricos em unidades de 10^{-20} cm^2 .

Complexo	Ω_2 exp.	Ω_4 exp.	Ω_2 teor.	Ω_4 + teor.
$[Eu(AND)_2.(H_2O)_4]Cl_3.(H_2O)_4$	4,7	4,3	4,7	3,6

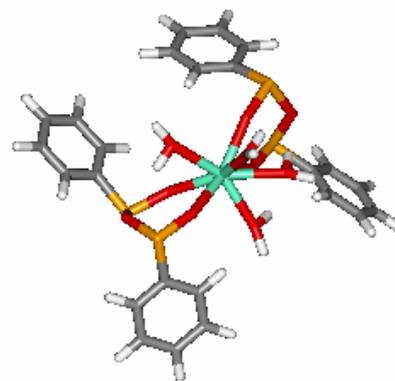


Fig. 2. Geometria otimizada do complexo $[Eu(AND)_2.(H_2O)_4]Cl_3.(H_2O)_4$.

Conclusões

Os compostos com grupos selenóxidos mostraram-se uma nova classe de ligantes que podem atuar como eficientes "antenas" na síntese de complexos de lantanídeos. A concordância entre o espectro de absorção e os parâmetros de intensidades teóricos e experimentais confirma a geometria proposta.

Agradecimentos

CNPq, RENAMI.

- Judd, B. R. *Physical Review* 127, 750-761, 1962.
- Ofelt, G. S. *Journal of Chemical Physics* 37, 511-520, 1962.
- Freire, R. O. (2007). Tese de Doutorado. Departamento de Química Fundamental da Universidade Federal de Pernambuco.
- Zerner, M. C. *ZINDO manual*, University of Florida, Gainesville, F. L. 32611, QTP, 1990.

