

Estudo da Luminescência do Composto $\text{Eu}(\text{C}_6\text{H}_2\text{N}_3\text{O}_7)_3 \cdot 3\text{C}_7\text{H}_{13}\text{NO}$ como uma Forma de Elucidar a Micro Simetria ao Redor do Íon Eu^{3+} .

Elias Meira da Silva (UFES) (PQ), Clebson de Jesus Macrino* (UFES) (PG), Milton Koiti Morigaki (UFES) (PQ).

*clebson_macrino@hotmail.com

Palavras chave: lantanídeos, luminescência, picratos.

Introdução

O interesse em se obter complexos formados por moléculas orgânicas e íons lantanídeos, vem aumentando consideravelmente, pelo fato destes compostos poderem atuar como excelentes dispositivos moleculares conversores de luz (DMCLs), absorvendo radiação no ultravioleta e emitindo no visível, o que apresenta ampla aplicabilidade.

A partir de espectros de emissão do íon Eu^{3+} é possível obter uma relação entre estrutura-espectro, permitindo chegar com base na teoria de grupo na micro simetria em torno do íon.

Resultados e Discussão

Por meio das transições provenientes do nível excitado, $^5\text{D}_0$, para os níveis $^7\text{F}_J$ ($J = 0, 1, 2$), observou-se o número de linhas de emissão (Tabela 1) do composto $\text{Eu}(\text{C}_6\text{H}_2\text{N}_3\text{O}_7)_3 \cdot 3\text{C}_7\text{H}_{13}\text{NO}$, o qual foi sintetizado segundo MACRINO³.

Tabela 1. Transições $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_{0,1,2}$ atribuídas ao composto $\text{Eu}(\text{C}_6\text{H}_2\text{N}_3\text{O}_7)_3 \cdot 3\text{C}_7\text{H}_{13}\text{NO}$.

Transição	Região Prevista (nm)	Posição da Banda Observada (nm)
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$	578-580	578,5
		589,0
		595,0
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$	585-600	612,0
		614,0
		615,5
$^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$	610-630	617,5
		622,0

A transição $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$ pode-se ser usada para investigar o sítio de simetria em torno do íon Eu^{3+} . Quando a simetria ao redor do íon metálico é alta ou há a presença de um centro de inversão, a transição $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$ é proibida. A $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$ é uma transição que é relativamente insensível ao campo ligante. E a $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ é uma transição hipersensível e sua intensidade é muito sensível ao campo ligante, quando sua intensidade é maior que a transição $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$, indica ausência de centro de inversão ao redor do íon metálico.

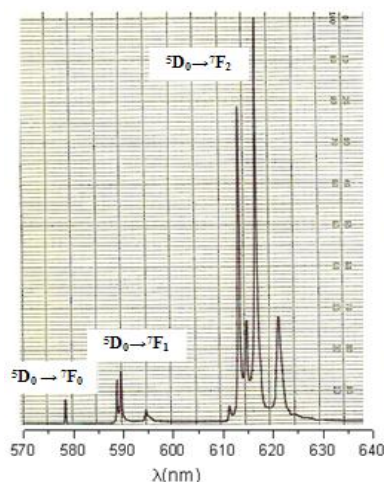


Figura 1. Espectro de emissão do $\text{Eu}(\text{C}_6\text{H}_2\text{N}_3\text{O}_7)_3 \cdot 3\text{C}_7\text{H}_{13}\text{NO}$ à 77K com $\lambda_{\text{exc.}} = 405\text{nm}$.

Foi observada no espectro de emissão (Figura 1) a presença da banda correspondente a transição $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$. Segundo PORCHER & CARO¹, a presença desta implica que, provavelmente, o composto apresenta micro simetria do tipo C_n , C_s ou C_{nv} . A transição hipersensível, $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ é mais intensa do que a $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$, indicando que o composto possui baixa simetria e não possui centro de inversão. De acordo com as correlações de FORSBERG¹, levando em consideração o número de bandas e suas intensidades. Sugere-se que o íon Eu^{3+} está envolvido por um campo ligante que conduz a uma simetria mais próxima do C_{3v} .

Conclusões

As bandas de transição $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_{0,1,2}$ apresentadas para o espectro de emissão para o complexo estudado, permitiu sugerir que o íon Eu^{3+} está envolvido por um campo ligante que conduz a uma micro simetria mais próxima do C_{3v} .

Agradecimentos

Ao Departamento de Química/UFES.

¹ CARVALHO, C.A.A.; Tese de Doutorado, Instituto de Química-USP, São Paulo, 1992.

² SILVA, E. M.; Dissertação de Mestrado, Instituto de Química-USP, São Paulo, 1991.

³ MACRINO, C.J.; Monografia, Departamento de Química-UFES, Vitória, 2010.