

Estudo dos Parâmetros de Intensidade 4f-4f de Novos Materiais do tipo $\text{Eu}(\beta\text{-dicetona})_3\cdot 2\text{L}$ (L= DMSO, FSO e PTSO).

Uine L.Oliveira¹(IC), Jorge F. S. de Menezes^{1*}, (PQ), Severino A.Júnior² (PQ), Hermi F.de Brito³ (PQ).
*e-mail: fsmenez@hotmail.com.

¹Universidade Federal do Recôncavo da Bahia/CFP - Rua das Arapongas, s/n, Loteamento Parque dos Pássaros - Katyara - Amargosa/BA; CEP 45300-000. ²Departamento de Química Fundamental CCEN – UFPE, Cidade Universitária, Recife- PE. CEP 50740-540. ³Universidade de São Paulo-IQ-USP - Av.Prof.Lineu Prestes 748;São Paulo-SP; CEP 05513-970.

Palavras Chave: Lantanídeos, Parâmetros de intensidade, β -dicetonas, európio, sulfóxidos.

Introdução

Uma das características marcantes dos íons lantanídeos¹ são as linhas espectrais de emissão finas e intensas². Sendo assim, o estudo tanto teórico quanto experimental dos parâmetros de intensidade de Judd-Ofelt (Ω_λ) de tais transições torna-se um fator importante na caracterização e no *design* de compostos que tenham potenciais aplicações em sistemas luminescentes^{1,2}. Nesse sentido, o presente trabalho concentrou-se na síntese e caracterização espectroscópica de novos materiais do tipo $\text{Eu}(\text{TTA})_3\cdot 2\text{L}$, onde L= **DMSO**-dimetilsulfóxido **FSO**-fenilsulfóxido, **PTSO**-p-toluisulfóxido e a β -dicetona do tipo: 4,4,4-trifluoro-1,2-tienil-1,3-diona (**TTA**).

Resultados e Discussão

Os novos materiais obtidos são solúveis em: tolueno, clorofórmio, dimetilsulfóxido, acetonitrila, etc. apresentam-se na forma de pó. Os espectros de IV indicam que com a formação dos complexos há um deslocamento das frequências de estiramento, S=O, para regiões de menor frequência em relação ao ligante livre, mostrando que a coordenação do íon lantanídeo ocorre via oxigênio do grupo sulfóxido. A otimização de geometria dos complexos (**figura 1**) foi feita usando o modelo "Sparkle".

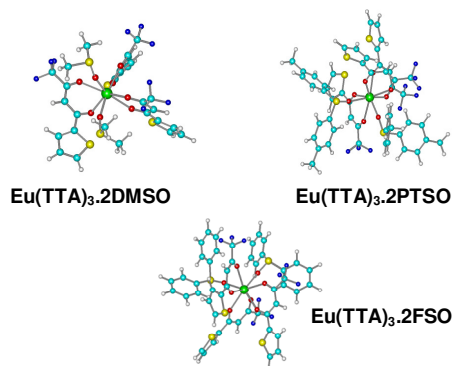


Figura 1: Geometrias obtidas via Sparkle.

Os valores de Ω_2 e Ω_4 obtidos (**tabela 1**) sugerem uma alta rigidez e um ambiente de alto grau de covalência em torno do íon Európio³.

Tabela 1: Parâmetros de Intensidade.

Compostos	$\Omega_{2(\text{exp})}$	$\Omega_{2(\text{teo})}$	$\Omega_{4(\text{exp})}$	$\Omega_{4(\text{teo})}$
Eu(TTA) ₃ ·2DMSO	35.2	22	6.8	5.3
Eu(TTA) ₃ ·2PTSO	30.5	25	11.4	8
Eu(TTA) ₃ ·2FSO	31.6	22	8.7	5.3

* Ω_λ ($\lambda=2$ e 4) estão em unidades de 10^{-20} cm^2

Em compostos com simetrias muito baixas, como neste caso, é de se esperar que o parâmetro Ω_4 seja menor que Ω_2 , pois nesses casos a dependência desses parâmetros com a distância metal-ligante é o fator determinante, e Ω_4 depende do inverso da distância elevada a potências bem mais altas que Ω_2 .

Conclusões

Os modelos teóricos aplicados aos novos sistemas sintetizados apresentam resultados plenamente satisfatórios quando comparados aos experimentais. Os valores de Ω_2 e Ω_4 concordam bem com os resultados experimentais com erros abaixo de 0,8% para o Ω_2 , constituindo-se assim, em um método eficaz para projetar os chamados DMCL's (dispositivos moleculares conversores de luz).

Agradecimentos

Aos órgãos de fomento CNPq, FAPESP e FAPESB.

¹Andrade, A. V. M., Costa Jr., N. B., Simas, A. M., Longo, R. L., Malta, O. L., Sá, G. F., *Quím. Nov.*, **1998**, 21 (1), 51-59.

²Malta, O. L., Carlos, L. D., *Quím. Nov.*, **2006**, 26 (6), 889-895.

³Donega, C. M., Alves Junior, S., Sá, G.F. *Journal. of Alloys. and Compound*, **1997**, 250, 422-426.