



# ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,  
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

## TÉCNICA FTIR E SUAS APLICAÇÕES EM AMOSTRAS ORGÂNICAS

**Ana Kely Ruffino Souza<sup>1</sup>; Dinorah Machado Vaz de Lima<sup>2</sup>; Simone Laila Andrade Oliveira<sup>3</sup>**

UEMS/GEOF- Dourados-MS, E-mail: annykely03@hotmail.com

<sup>1</sup>Bolsista de Apoio Técnico a Pesquisa do CNPq. <sup>2 e 3</sup> Mestrandas em Recursos Naturais, Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul.

### RESUMO

Espectroscopia é a ciência que estuda a interação da radiação eletromagnética com a matéria. A espectrofotometria no infravermelho apresenta-se como uma poderosa ferramenta na identificação de compostos orgânicos e inorgânicos puros e tem sido usada devido à confiabilidade nos dados gerados em relação à caracterização, identificação e quantificação da estrutura da amostra analisada. Neste contexto a proposta desse trabalho é descrever alguns pressupostos teóricos sobre a atuação do equipamento em amostras orgânicas através de uma revisão na literatura. E dentre os instrumentos utilizados para a espectroscopia infravermelha, o aparelho de FTIR se destaca por sua constituição, seu funcionamento e sua forma de análise em amostras orgânicas. A técnica utiliza pouca quantidade de amostra e apresenta rapidez na aquisição dos espectros fornecendo informações essencialmente qualitativas. A espectroscopia no infravermelho tornou-se relativamente simples e barata, quando comparada a outros métodos espectroscópicos e ainda capaz de oferecer informações importantes para análises qualitativas.

Palavras-chave: espectroscopia no infravermelho; compostos orgânicos; FTIR.

### INTRODUÇÃO

Espectroscopia é a ciência que estuda a interação da radiação eletromagnética com a matéria (SKOOG *et al.*, 2002). As medidas espectroscópicas são baseadas na medida da quantidade de radiação produzida ou absorvida pelas moléculas ou átomos presentes

na amostra de interesse. De acordo com a região do espectro eletromagnético envolvido nas medidas podemos classificar os métodos espectroscópicos como: raios  $\gamma$ ; raios x; ultravioleta (UV); visível (VIS); infravermelho (IV); micro-ondas e rádio frequência (RF) (SKOOG *et al.*, 2010).

A espectrofotometria na faixa do infravermelho apresenta-se como uma poderosa ferramenta na identificação de compostos orgânicos e inorgânicos puros, pois é capaz de identificar diferentes ligações químicas entre átomos pelas deformações rotacionais e vibracionais, as quais absorvem energia em determinada frequência de ressonância, de acordo com as características químicas dos átomos envolvidos. (SKOOG *et al.*, 2010).

A região espectral do infravermelho compreende radiação com números de onda no intervalo de aproximadamente  $12.800$  a  $10\text{ cm}^{-1}$  ou comprimentos de onda de  $0,78$  a  $100\mu\text{m}$  (SKOOG *et al.*, 2002).

A espectroscopia no infravermelho tem sido usada devido à confiabilidade nos dados gerados em relação à caracterização, identificação e quantificação da estrutura da amostra analisada. Além disso, uma das suas características é permitir análises utilizando amostras em diferentes estados físicos como sólidos, líquidos e gasosos (SHAI, 2012). Assim, o objetivo do trabalho é descrever alguns pressupostos teóricos sobre o FTIR em amostras orgânicas.

## **MATERIAL E MÉTODOS**

Nesse trabalho foi realizada uma revisão literária a respeito do FTIR em compostos orgânicos com o objetivo de contribuir para o entendimento do mesmo.

## **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

### **ESPECTROMETRIA DE ABSORÇÃO NO INFRAVERMELHO MÉDIO**

Quando uma amostra orgânica é exposta a uma radiação que pode ser absorvida, ocorre um movimento vibracional ou rotacional. Para ocorrer esse movimento é necessário que haja variação no momento de dipolo, e conseqüentemente, o campo elétrico alternado da radiação vai interagir com as moléculas (SKOOG *et al.*, 2002).

As posições relativas dos átomos em uma molécula variam continuamente como conseqüência de inúmeros tipos de vibrações e rotações em torno das ligações da

molécula. As vibrações caem nas categorias de estiramentos e de deformações angulares. Quando no eixo de uma ligação entre dois átomos ocorre uma variação contínua na distância interatômica, então significa que há uma vibração de estiramento na molécula, porém se a variação for no ângulo entre duas ligações, então há uma vibração de deformação angular, que se caracteriza em quatro tipos: tesoura (scissoring), balanço (rocking), sacudida (wagging) e torção (twisting) (SKOOG *et al.*, 2002).

#### INFRAVERMELHO TRANSFORMADA DE FOURIER.

Foi a partir da década de 80 que houve uma considerável mudança nos instrumentos para estudos na região do infravermelho médio. Os instrumentos mais antigos são do tipo dispersivo, baseado em redes de difração e a região do infravermelho médio é usada principalmente para análise orgânica qualitativa e determinação de estrutura baseada em espectros de absorção (SKOOG *et al.*, 2002).

Nos dias atuais, dentre os instrumentos utilizados para espectroscopia infravermelha destacamos o espectrofotômetro com transformada de Fourier (FTIR). Transformada de Fourier é um processo matemático pelo qual o interferograma é analisado em seus componentes de frequências com suas amplitudes correspondentes (CIENFUEGOS e VAITSMAN, 2000).

#### ESTRUTURA E FUNCIONAMENTO DE UM ESPECTRÔMETRO FTIR

São três componentes básicos de um espectrômetro: a fonte de radiação no infravermelho médio; um interferômetro de Michelson, formado por dois espelhos, sendo um fixo e outro móvel; e um divisor de feixe, composto de um cristal de KBr (CIENFUEGOS e VAITSMAN, 2000).

Um feixe de radiação é incidido no interferômetro de Michelson e ao passar pelo espelho semi-prateado (divisor de feixe) divide-se, percorrendo dois caminhos distintos e perpendiculares entre si, ou seja, 50% da radiação é transmitida e 50% é refletida. Ambos retornam ao divisor de feixes se recombinando com um perfil do batimento, formando interferências construtivas e destrutivas, sendo estas direcionadas à célula de ATR. Conforme a posição do espelho móvel, se tem como máxima interferência construtiva uma determinada frequência, tal que no intervalo de espaço percorrido pelo espelho, as frequências entre 650 e 4000  $\text{cm}^{-1}$  assumem o máximo de interferência pelo menos uma vez. Após o feixe incidir na amostra é direcionado a um detector fotossensível

que irá captar o sinal luminoso, transformando-o em um interferograma, que por sua vez, passará pela Transformada de Fourier, convertendo o interferograma em um espectro de absorção óptica infravermelha, sendo do tipo intensidade de absorção (ou absorbância) em função do número de onda (relacionado à energia vibracional da molécula) (FIGUEIREDO, 2009; IZIDA, 2007).

## AMOSTRAS ORGÂNICAS

A aquisição dos espectros depende do tipo de amostra que se quer analisar, por exemplo, amostras líquidas precisam ser depositadas em células específicas que possuem alta transmissão na faixa do infravermelho médio, o que não é facilmente encontrado (FIGUEIREDO, 2009).

No caso de pó, existe a necessidade da amostra ser preparada com KBr para se obter uma boa transmissão da amostra, neste caso, o acessório de reflectância total atenuada (ATR) pode ser o mais indicado, assim como a fotoacústica, ambas células acopladas ao espectrofotômetro FTIR (FIGUEIREDO, 2009).

## DISCUSSÕES

Os espectros, em geral, fornecem informações essencialmente qualitativas. (BAES e BLOOM, 1989). Com o desenvolvimento da técnica transformada de Fourier (FTIR), obteve-se maior velocidade na leitura dos espectros de infravermelho, permitindo a obtenção de um somatório de muitos espectros, melhorando a definição dos sinais e a exatidão da análise. A informação provida pela análise comparativa entre espectros é de maior valia que a análise de um espectro isoladamente (PICCOLO, 1988). Paralelamente, com o desenvolvimento da técnica, observou-se a redução no custo do equipamento.

## CONCLUSÕES

O FTIR é um instrumento com ampla gama de utilizações no mercado, desde setores industriais, farmacêuticos, até mesmo agrícolas, tendo alto potencial na identificação e na caracterização de diversos compostos. É uma técnica que utiliza pouca quantidade e diferentes tipos de amostra, apresenta também rapidez na aquisição dos espectros fornecendo informações essencialmente qualitativas.

## AGRADECIMENTOS

Ao CNPq, pela bolsa concedida e ao Grupo de Espectroscopia Óptica e Fototérmica (GEOF) pelo apoio.

## REFERÊNCIAS

BAES, A.U.; BLOOM, P.R. Diffuse reflectance and transmission Fourier transform infrared (DRIFT) spectroscopy of humic and fulvic acids. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, 53:695-700, 1989.

CIENFUEGOS, F.; VAITSMAN, D. **Análise Instrumental**. Editora Interciência Ltda, Rio de Janeiro – RJ, 2000.

FIGUEIREDO, M.S. **Estudo das Propriedades Ópticas e Termo-Ópticas do Biodiesel e suas Misturas**. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada) - Universidade Federal de Mato Grosso do Sul. Campo Grande-MS. 2009.

IZIDA, T. **Distinção de Espécies e Castas de Formigas com a Técnica FTIR-PAS**. Monografia (Graduação de Licenciatura em Física) – Universidade Estadual do Mato Grosso do Sul. Dourados-MS. 2007.

PICCOLO, A. Characterization of soil humic extracts obtained by some organic and inorganic solvents and purified by HCl-HF treatment. **Soil Sci.**, 146:418-426, 1988.

SHAI, Y. ATR-FTIR studies in pore forming and membrane induced fusion peptides. **Biochimica et Biophysica Acta**, v.4c, p. 1-8. 2010.

SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R. **Fundamentos de química analítica**. 8.ed. São Paulo – SP: Cengage Learning, cap. 24 e 26. 2010.

SKOOG, D.A.; HOLLER, F.J.; NIEMAN, T.A. **Princípios de Análise Instrumental**. 5ª edição. Porto Alegre: Bookman, 2002.