


# Princípios da espectroscopia molecular: Hardware

**DESENVOLVENDO**  
UMA CIÊNCIA MELHOR

AGILENT E VOCÊ



A Agilent tem um compromisso com a comunidade educacional e está disposta a conceder acesso ao material de propriedade da empresa.

---

Este conjunto de slides foi criado pela Agilent apenas para finalidades de ensino.

Caso deseje usar as imagens, esquemas ou desenhos para qualquer outra finalidade, primeiro entre em contato com a Agilent.

# Índice

## Introdução

- [Classificação](#)

## Espectroscopia molecular

- [Geral](#)
- [Espectroscopia UV-VIS](#)
  - [Configuração geral](#)
  - [Fonte de radiação](#)
  - [Elementos dispersivos](#)
  - [Detectores](#)
  - [Sistema](#)
  - [Análise qualitativa e quantitativa](#)
  - [Aplicações](#)
  - [Exemplos](#)
  - [Recursos](#)

- [Espectroscopia de fluorescência](#)
  - [Configuração geral](#)
  - [Fonte de radiação](#)
  - [Sistema](#)
  - [Aplicações](#)
  - [Exemplos](#)
  - [Recursos](#)
- [Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier](#)
  - [Configuração geral](#)
  - [Interferograma](#)
  - [Análise qualitativa e quantitativa](#)
  - [Sistema](#)
  - [Aplicações](#)
  - [Exemplos](#)
  - [Recursos](#)
- [Informações adicionais](#)



# Introdução

## Classificações

A espectroscopia é uma área ampla, com muitas subdisciplinas que podem ser classificadas pelo tipo de material que está sendo analisado. Esta apresentação se concentrará na espectroscopia molecular.

### ÁTOMOS

Espectroscopia atômica

- AAS
- MP-AES
- ICP-OES
- ICP-MS

### MOLÉCULAS

Espectroscopia molecular

- UV-VIS
- UV-VIS-NIR
- FTIR
- Fluorescência

### CRISTAIS

- Cristalografia de raio-X

### NÚCLEOS

- Ressonância magnética nuclear

# Espectroscopia molecular

## Geral

A combinação de átomos em moléculas cria estados energéticos únicos e, portanto, espectros únicos das transições entre estados.

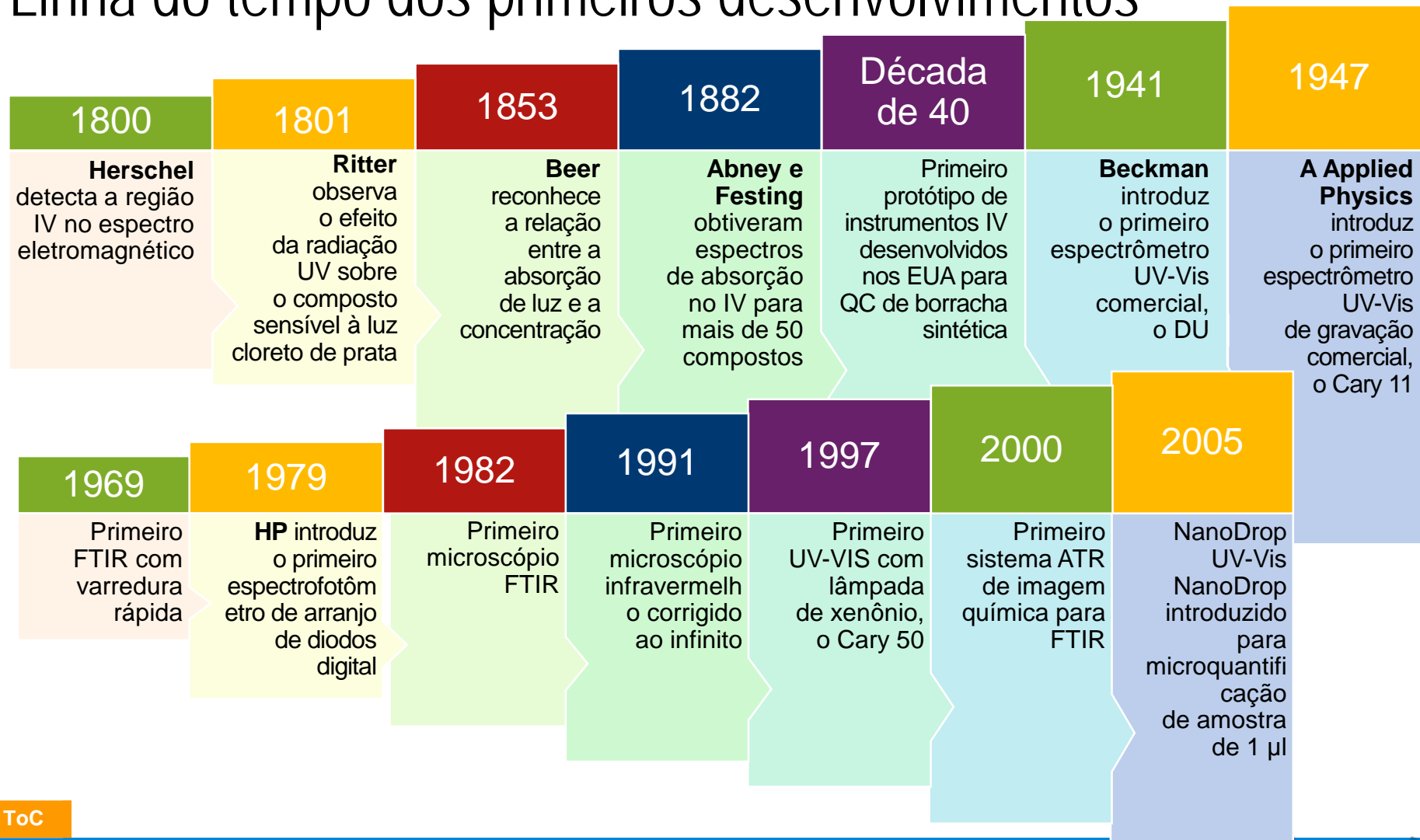
Espectros moleculares podem ser obtidos devido a:

- Estados de spin eletrônico
- Rotações moleculares
- Vibração molecular
- Estados eletrônicos

Espectroscopia molecular	
	Por aplicação
UV-Vis	Estuda as interações entre a energia eletromagnética no ultravioleta, visível e infravermelho próximo e a matéria.
	Estuda as interações entre matéria e energia eletromagnética no infravermelho
Fluorescência	Estuda a emissão de energia eletromagnética, após a interação entre matéria e energia eletromagnética tipicamente ultravioleta e visível

# Introdução

## Linha do tempo dos primeiros desenvolvimentos

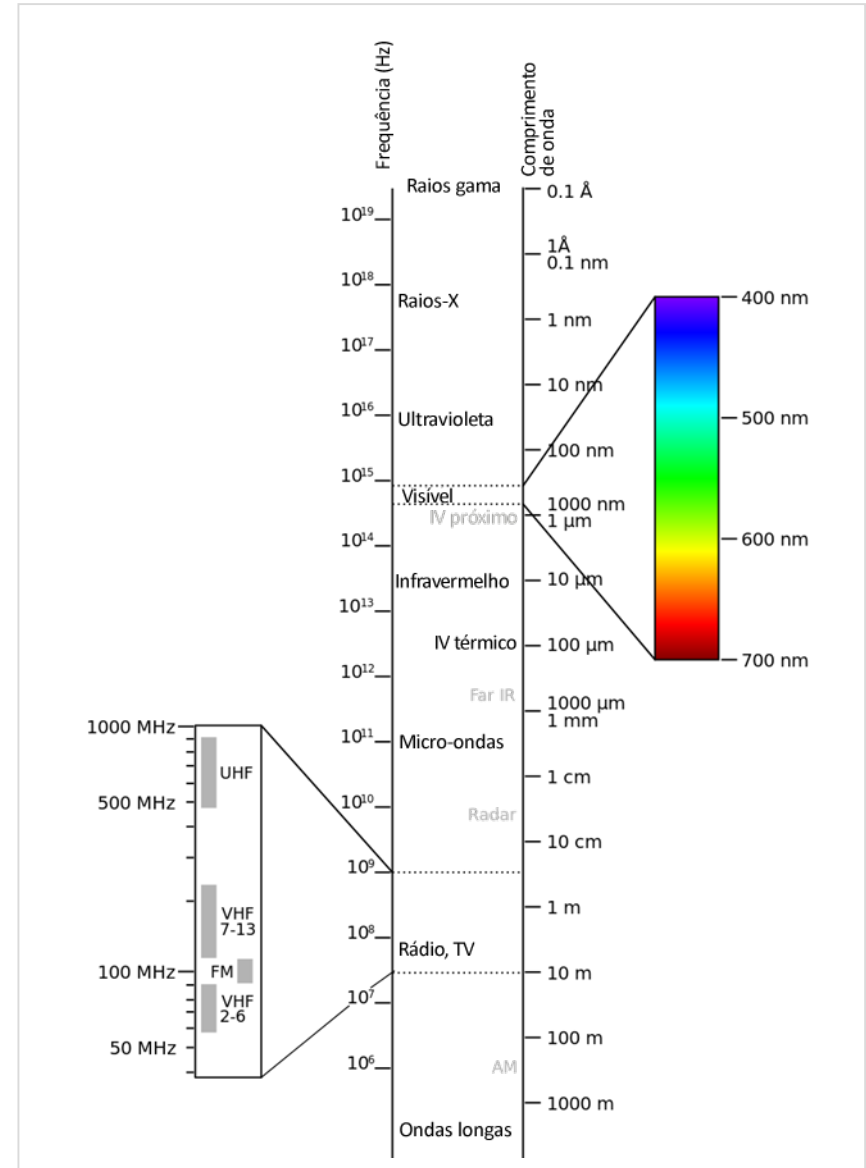


# Espectroscopia UV-Vis Geral

O **espectro eletromagnético** abrange muitas ordens de magnitude em frequência e comprimento de onda. A luz visível representa apenas uma fração muito pequena do espectro eletromagnético.

- Ultravioleta: 190 a 400 nm
- Visível: 400 a 800 nm
- Infravermelho: 800 a 100.000 nm

*"Espectro eletromagnético"  
por Victor Blacus*



Fonte: [Wikipedia](#)

# Espectroscopia UV-Vis

## Geral

Um espectrofotômetro mede a quantidade de luz transmitida através de uma amostra ou refletida por ela.

Todos os verdadeiros espectrofotômetros de pesquisa podem medir a porcentagem de luz transmitida ou refletida em todos os comprimentos de onda de cerca de 190 nm (ultravioleta médio) até pelo menos 900 nm (infravermelho próximo) com resolução de sub-2 nm.

Para trabalho de solução, a porcentagem de luz transmitida é expressa como absorbância, que é diretamente proporcional à concentração.



# Espectroscopia UV-Vis

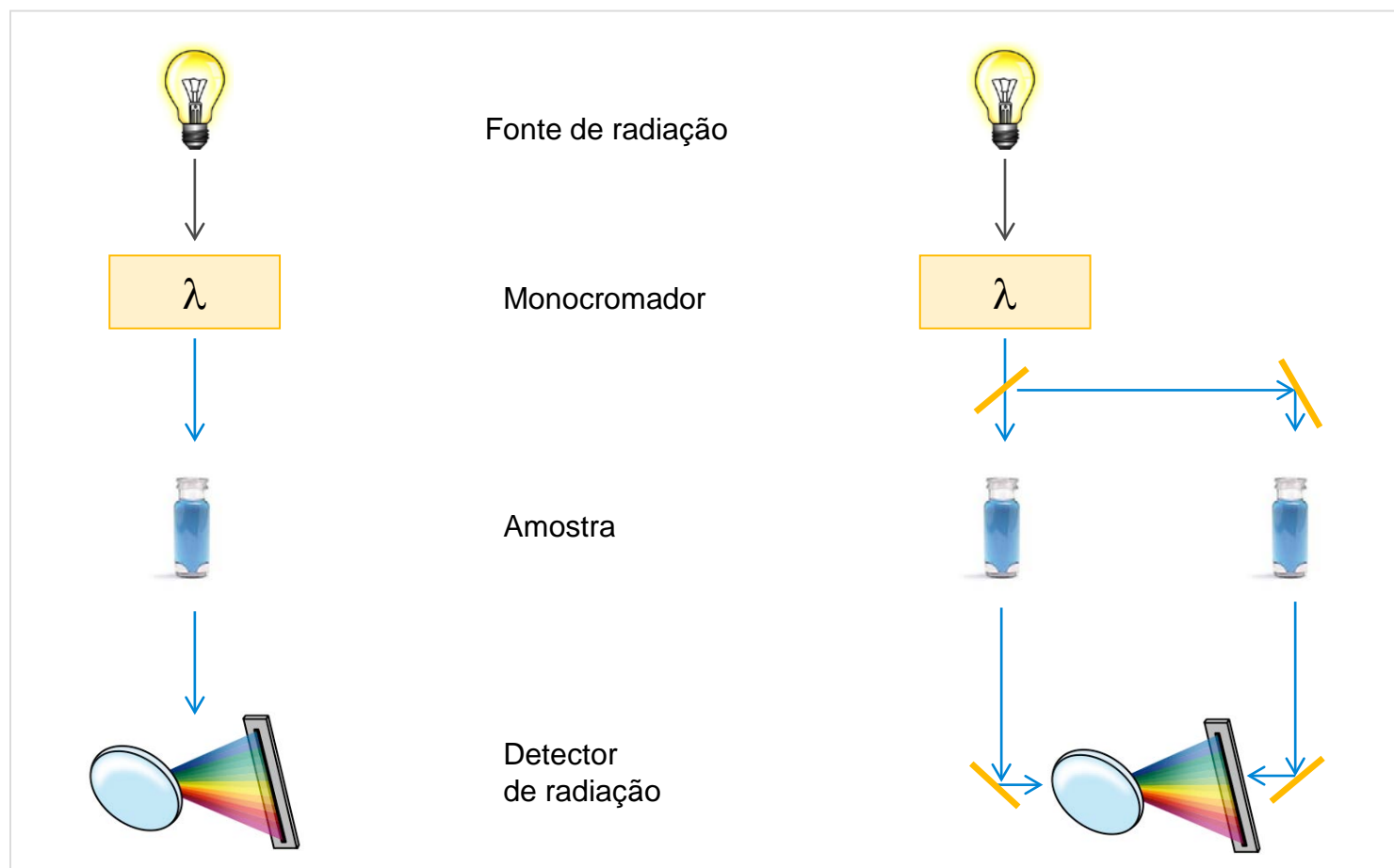
## Configuração geral



- A lâmpada (fonte) emite luz através de uma gama de comprimentos de onda
- O monocromador (dispositivo de dispersão) seleciona um comprimento de onda
- O analito absorve a luz (área de amostra)
- A luz transmitida é medida (detector)
- A concentração é determinada por comparação com padrões

# Espectroscopia UV-Vis

## Configuração geral: Espectrômetro de feixe simples vs. duplo



*A abordagem de feixe duplo permite a correção de variações na intensidade da luz.*

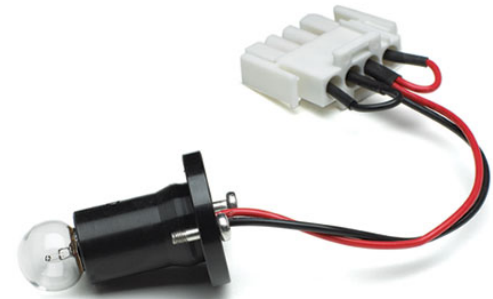
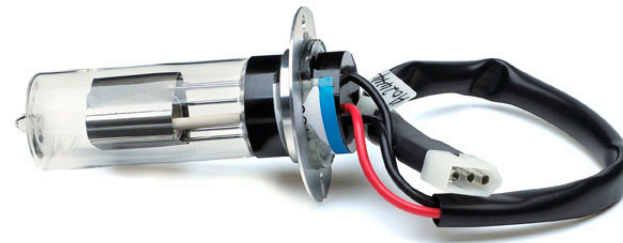
# Espectroscopia UV-Vis

## Fonte de radiação

A fonte de radiação ideal produziria uma intensidade constante ao longo de todos os comprimentos de onda com baixo ruído e estabilidade em longo prazo.

Fontes normalmente utilizadas em espectrofotômetros UV-Vis:

- **Lâmpada de arco de deutério** → intensidade útil na região ultravioleta
- **Lâmpada de tungstênio-halogênio** → boa intensidade ao longo de parte do espectro ultravioleta e toda a gama visível
- **Lâmpada de xenônio** → boa continuidade sobre todas as regiões ultravioletas e visíveis



*Fonte de deutério (acima) e lâmpada de tungstênio-halogênio (abaixo) usadas com sistemas ultravioletas*

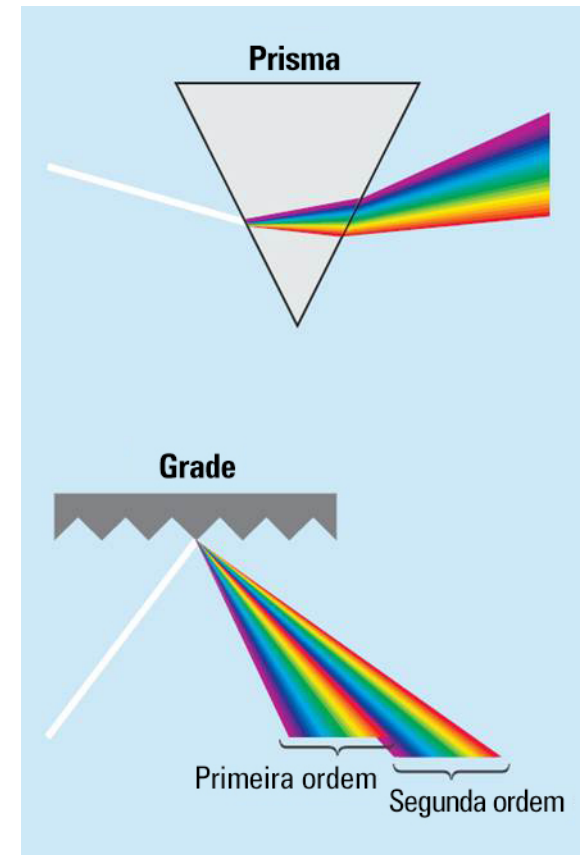
# Espectroscopia UV-Vis

## Elementos dispersivos

Os elementos dispersivos dispersam comprimentos de onda da luz em diferentes ângulos. Quando combinados com uma fenda de saída apropriada, esses dispositivos podem ser usados para selecionar um determinado comprimento de onda (ou, mais precisamente, uma faixa de frequência estreita) de luz de uma fonte contínua.

Existem dois tipos de dispositivos:

- **Prismas**  
Geram um arco-íris de luz solar; a desvantagem é que o ângulo de dispersão é sensível à temperatura
- **Grade holográfica**  
Não são sensíveis à temperatura; a luz que cai na grade é refletida em ângulos diferentes, dependendo do comprimento de onda.



*Esquema de dispositivos de dispersão. Os espectrômetros mais modernos utilizam a dispersão por grade.*

Fonte: [Princípios da espectroscopia UV-visível](#)

# Espectroscopia UV-Vis

## Detectores

Um detector converte um sinal luminoso em um sinal elétrico. Idealmente, ele deve proporcionar uma resposta linear ao longo de uma vasta faixa com baixo ruído e alta sensibilidade.

### Detector de tubo fotomultiplicador

Combina uma conversão de sinal com vários estágios de amplificação no interior do tubo; é feita a varredura de toda a faixa de comprimentos de onda.

### Detector de fotodiodo

A luz que cai no material semiconductor permite que os elétrons fluam por ele, esgotando assim a carga em um capacitor conectado em todo o material. A quantidade de carga necessária para recarregar o capacitor é proporcional à intensidade da luz; toda a faixa de comprimento de onda é medida em uma leitura.

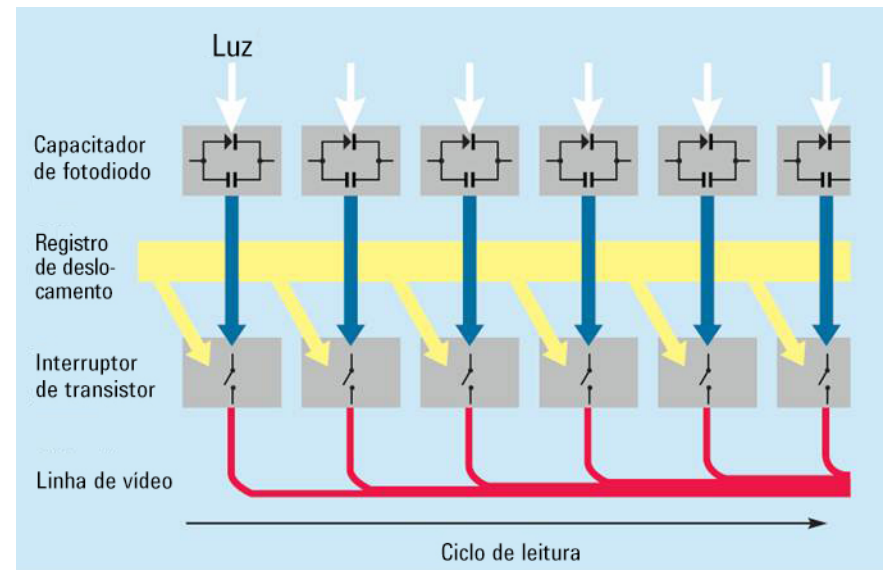
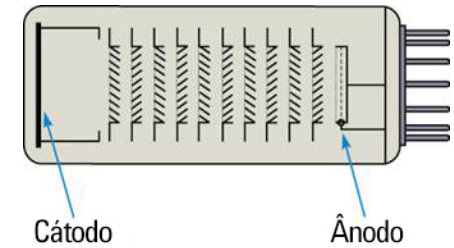
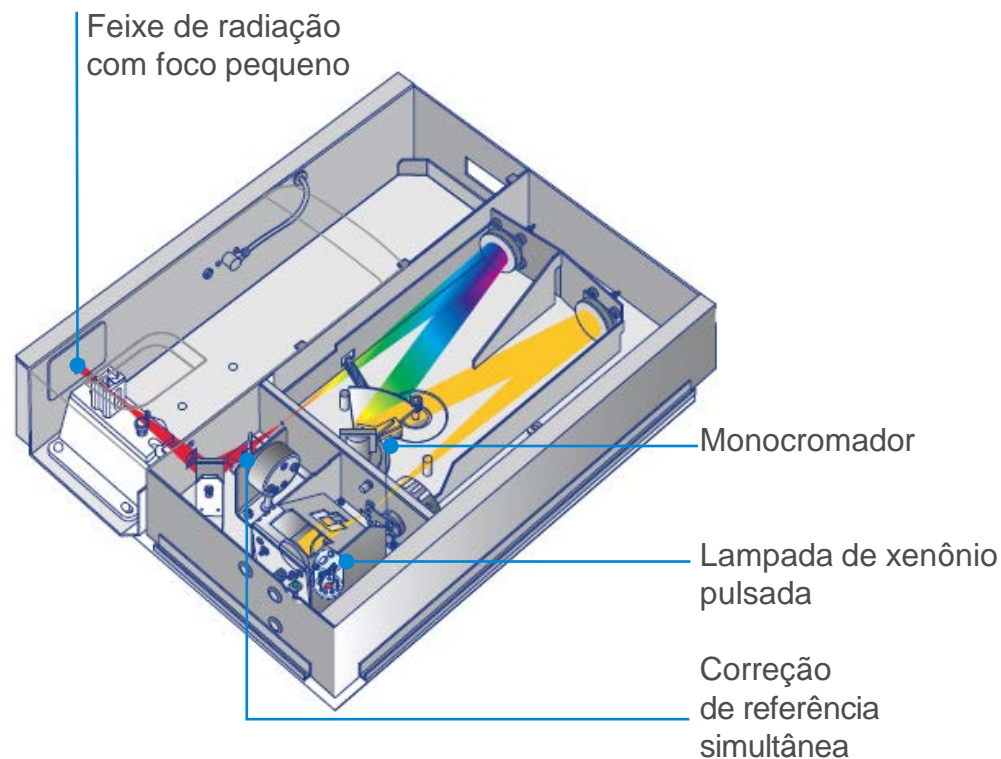


Diagrama esquemático do detector de tubo fotomultiplicador (acima) e do arranjo de fotodiodos (abaixo).

# Espectroscopia UV-Vis Sistema

## Aplicações principais

- Monitoramento de cinética
- Caracterização de compostos desconhecidos ou recém-sintetizados
- Avaliação de pureza de DNA
- Quantificação de DNA e proteínas
- Análise de nutrientes na água, em alimentos e na agricultura



# Espectroscopia UV-Vis

## Análise qualitativa e quantitativa

Espectros UV-visível geralmente mostram apenas algumas bandas de absorbância amplas. A maior parte da absorção por compostos orgânicos resulta da presença de ligações pi (ou seja, insaturadas). Um cromóforo é um grupo molecular que geralmente contém uma ligação pi. Quando inserido em um hidrocarboneto saturado (que não exibe nenhum espectro de absorção UV-visível), ele produz um composto com absorção entre 185 e 1000 nm.

**Cromóforos selecionados e sua absorbância máxima**

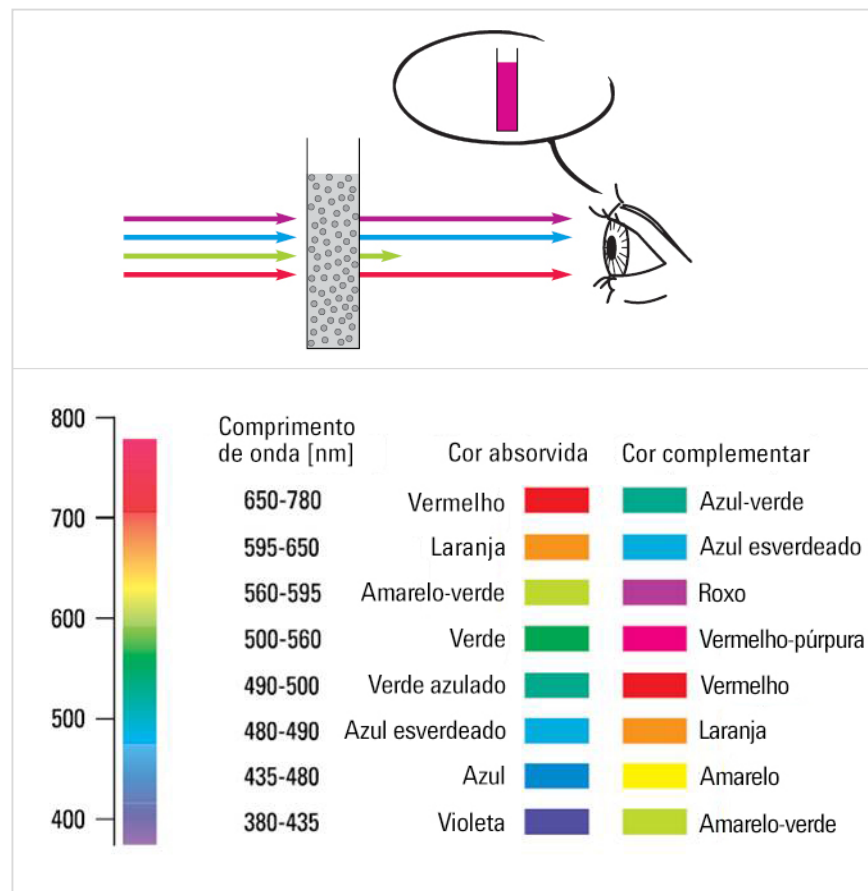
Cromóforo	Fórmula	Exemplo	$\lambda_{\text{máx}}$ (nm)
Carbonila (cetona)	RR'C=O	Acetona	271
Carbonila (aldeído)	RHC=O	Acetaldeído	293
Carboxila	RCOOH	Ácido acético	204
Amida	RCONH <sub>2</sub>	Acetamida	208
Nitro	RNO <sub>2</sub>	Nitrometano	271



# Espectroscopia UV-Vis

## Análise qualitativa e quantitativa

A cor é uma propriedade importante de uma substância. A cor da matéria está relacionada com sua absortividade ou refletividade. O olho humano vê a cor complementar àquela que é absorvida.



*Transmissão e cor (acima)  
Absorbância e cores complementares (abaixo)*

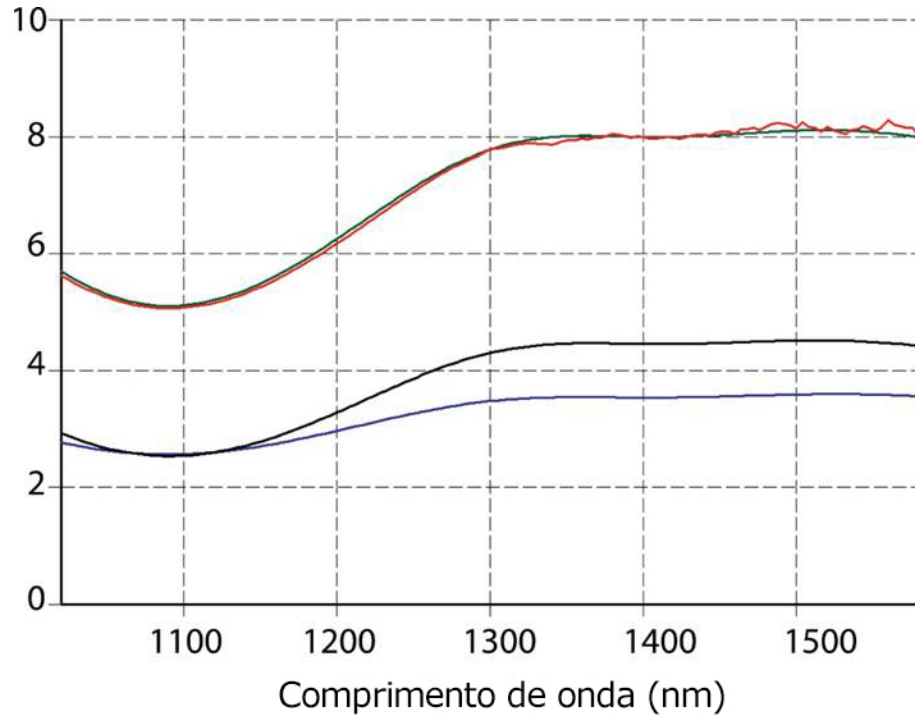
# Espectroscopia UV-Vis

## Aplicações

MERCADO	APLICAÇÕES
Material	<p>Materiais em massa</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Componentes ópticos: filtros, lentes, espelhos, divisores de feixe, polarizadores, vidro</li><li>• Filmes finos, revestimentos antirreflexo e ópticos, materiais nanocompósitos, tintas, células solares</li><li>• Óculos de segurança</li><li>• Celulose e papel</li><li>• Material de camuflagem</li><li>• Óculos de sol</li><li>• Tecidos/têxteis</li></ul>
Produtos químicos	<ul style="list-style-type: none"><li>• QA/QC em matérias-primas e produtos acabados na fabricação</li><li>• Identificação química ou estudo de processos químicos: laboratórios de química sintética, pesquisa fotoquímica, caracterização de nanopartículas, pesquisa em química de superfície</li><li>• Química analítica</li><li>• Medições de cores: Tintas e produtos têxteis (correspondência de cores, QA/QC em tecidos, medições de SPF)</li></ul>
Biotecnologia e farmacêutico	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ensaio de ligação de drogas</li><li>• Reações enzimáticas</li><li>• Análise de amostras biológicas turvas, tecidos, homogenatos celulares</li><li>• Medições de íon intracelular</li><li>• Determinação de proteína e ácido nucleico (RNA/DNA)</li><li>• Medições de desnaturação/renaturalização de DNA e proteína</li></ul>

# Espectroscopia UV-Vis

## Medição da absorbância do filtro de vidro Schott



Espectros do filtro UG11 1 (azul), filtro UG11 2 (preto) e o espectro dos filtros UG11 1 e UG 11 2 juntos (vermelho). O espectro verde é o resultado previsto com base na adição de espectro azul e preto.

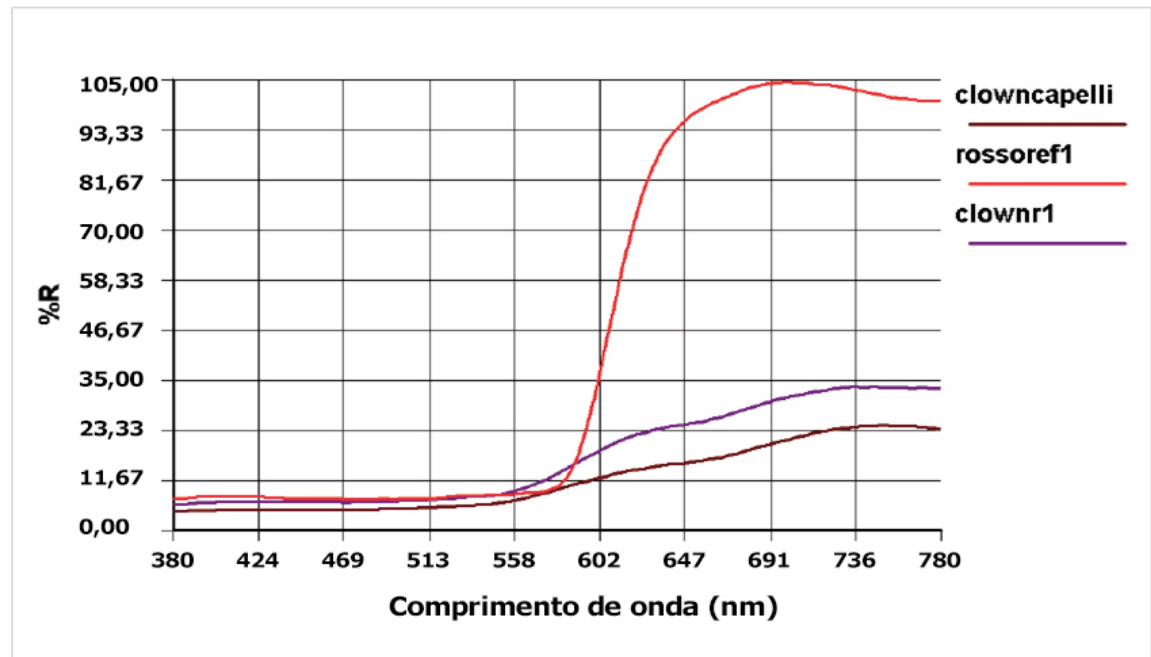
*Dois filtros foram medidos separadamente e numericamente somados (previstos). Estes resultados são idênticos aos dois filtros medidos juntos (medidos).*

# Espectroscopia UV-Vis

## Medição da cor de uma tinta sobre tela



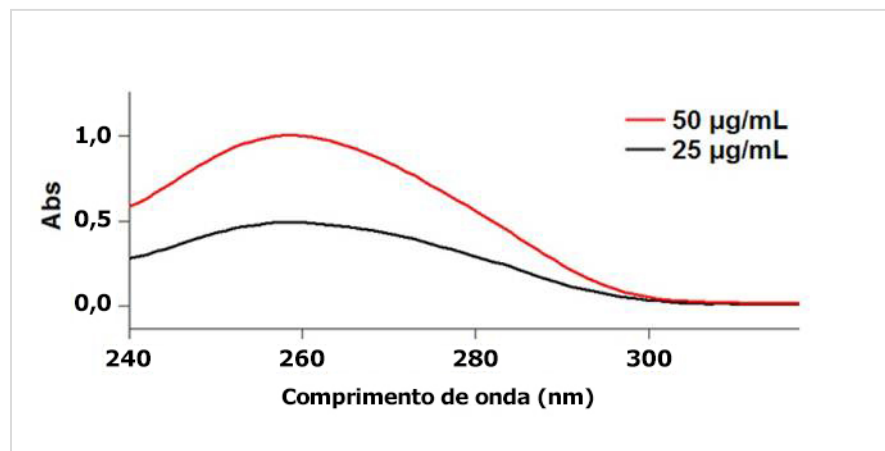
*Espectros mostrando que as amostras clownnr1 e clowncapelli são feitas de materiais semelhantes.*



Fonte: [Medição da cor de uma tinta sobre tela diretamente com reflectância difusa externa usando o espectrofotômetro UV-Vis Cary 60 da Agilent](#)

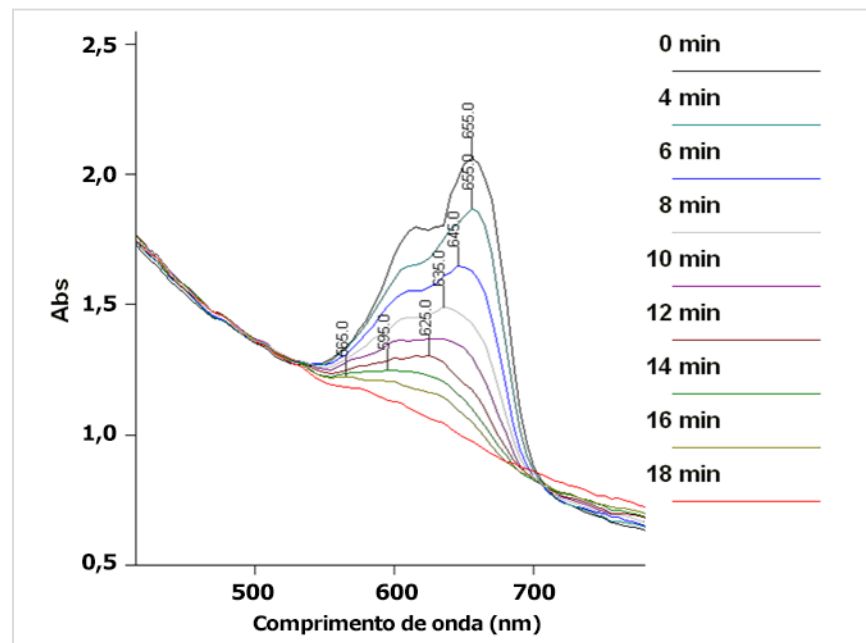
# Espectroscopia UV-Vis

## Análise de pureza e análise cinética



Varreduras de amostras de 150 µL de DNA a 4° C em duas concentrações mostrando o pico de absorbância característica em 260 nm. Observe a absorbância de 1,0 unidades de absorbância para DNA de 50 µg/mL em comparação à absorbância de 0,5 unidades de absorbância para DNA de 25 µg/mL, demonstrando adesão à lei de Beer-Lambert.

Fonte: [Medição da pureza de volumes baixos de DNA a 4 °C usando o espectrofotômetro UV-Vis Cary 60 da Agilent com microsonda de fibra óptica](#)



Varredura cinética de azul de metileno, usando fibra ótica in situ, sob a exposição de uma lâmpada de UV de alta intensidade (lâmpada Oriell 500 W Hg[Xe]) por 20 minutos dentro da faixa de 400 a 800 nm. Os rótulos refletem comprimentos de onda de absorbância máxima.

Fonte: [Medições simples e automatizadas das propriedades fotocatalíticas de espécies colorimétricas usando o espectrofotômetro UV-Vis Cary 60 da Agilent com fibra óptica.](#)

# Espectroscopia UV-Vis

## Recursos

A relação linear simples entre absorvância e concentração e a relativa facilidade de medição de luz UV-visível fizeram da espectroscopia UV-visível a base para milhares de métodos analíticos quantitativos.

### Espectroscopia UV-Vis

#### Vantagens

- Ampla aplicação para análises qualitativas e quantitativas
- Pode ser usado para muitos tipos de moléculas e íons orgânicos e inorgânicos
- Facilidade de uso
- Rápida
- Pouca manutenção
- Medição não destrutiva

#### Limitações

- Limites maiores (piores) de detecção do que fluorescência
- A sobreposição de bandas de absorção pode interferir
- Pode ser difícil para compostos sensíveis à luz se for usada uma fonte D2 e Q1 (não aplicável se for usada uma fonte de xenônio)



# Espectroscopia de fluorescência

## Geral

Fluorescência é a emissão de fótons após a excitação por fótons de maior energia.

Espectrômetros de fluorescência oferecem alta sensibilidade (picomolar), já que estão detectando um sinal contra um fundo escuro, ao contrário de espectrofotômetros.

Instrumentos de nível de pesquisa usam monocromadores de varredura para excitação e emissão.

Muitos sistemas de fluorescência também podem medir fosforescência e luminescência.



# Espectroscopia de fluorescência

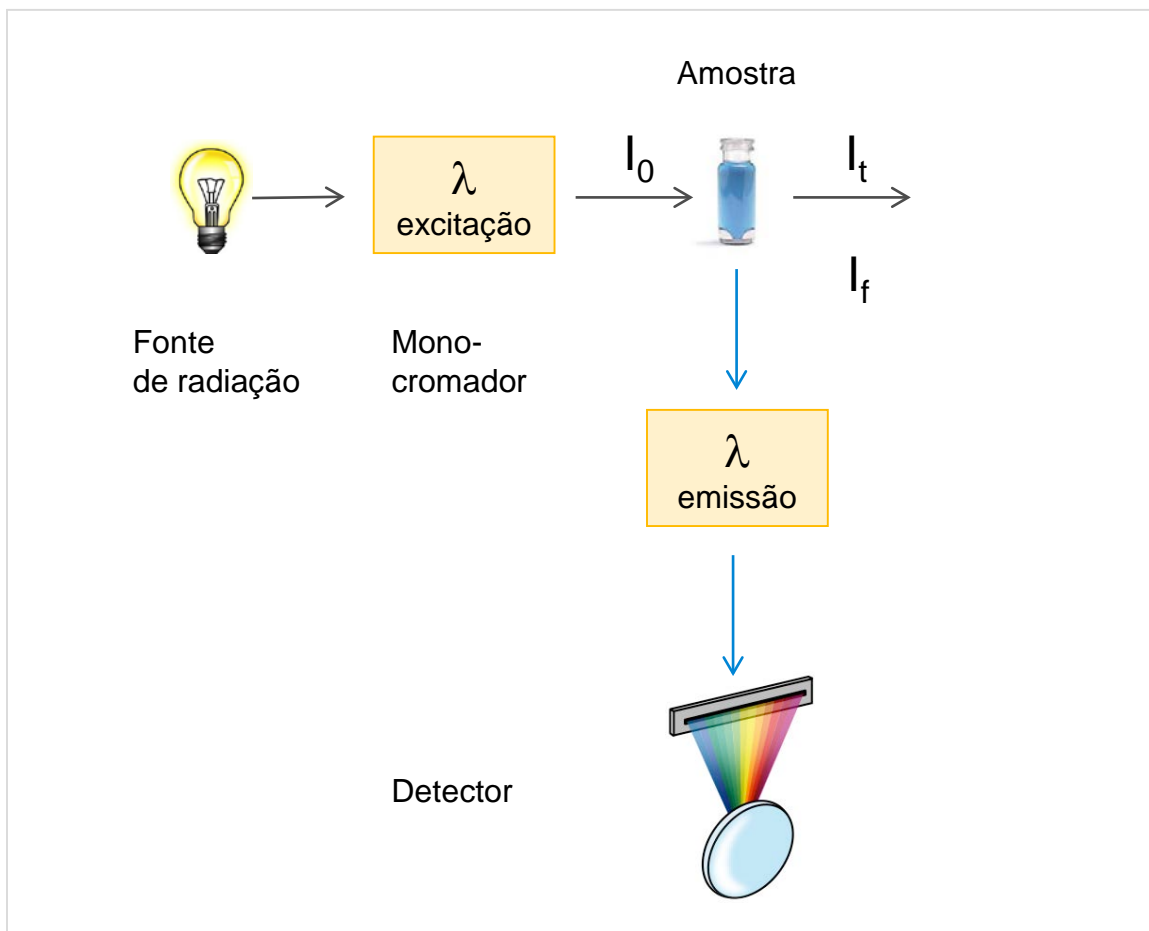
## Configuração geral



- A lâmpada (fonte) emite luz através de uma faixa de comprimentos de onda
- O monocromador seleciona o comprimento de onda de excitação
- A área de amostra mantém a amostra, o analito absorve a luz
- Luz emitida em um comprimento de onda mais longo
- O monocromador seleciona o comprimento de onda de emissão
- A luz transmitida é medida (detector)

# Espectroscopia de fluorescência

## Configuração geral



*Observação: O detector não está em linha direta com a fonte de radiação para minimizar o risco de a luz incidente transmitida ou refletida atingir o detector.*

# Espectroscopia de fluorescência

## Fonte de radiação

### Várias fontes de radiação são usadas em espectrofotômetros de fluorescência:

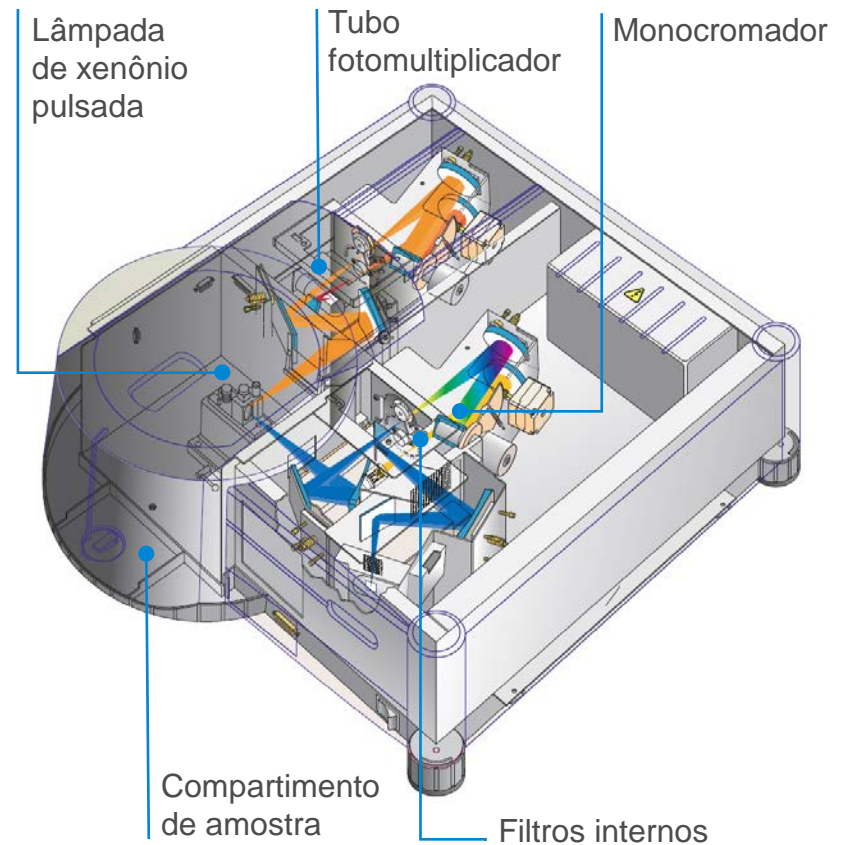
- **Lâmpada de xenônio:** espectro de emissão contínua com intensidade quase constante de 300 a 800 nm
- **Lâmpada de vapor de mercúrio:** uma lâmpada de linha, ou seja, emite luz perto de comprimentos de onda de pico
- **Lasers:** limitados em seleção de comprimento de onda; não podem ser alterados

# Espectroscopia de fluorescência

## Sistema

### Aplicações principais

- Estabilidade térmica de biocatalisadores
- Caracterização de selos biológicos para imagens ao vivo de células
- Misturas de hidrocarbonetos em óleos de petróleo
- Oligomerização para caracterização de receptores acoplados às proteínas G (GPCR)



# Espectroscopia de fluorescência

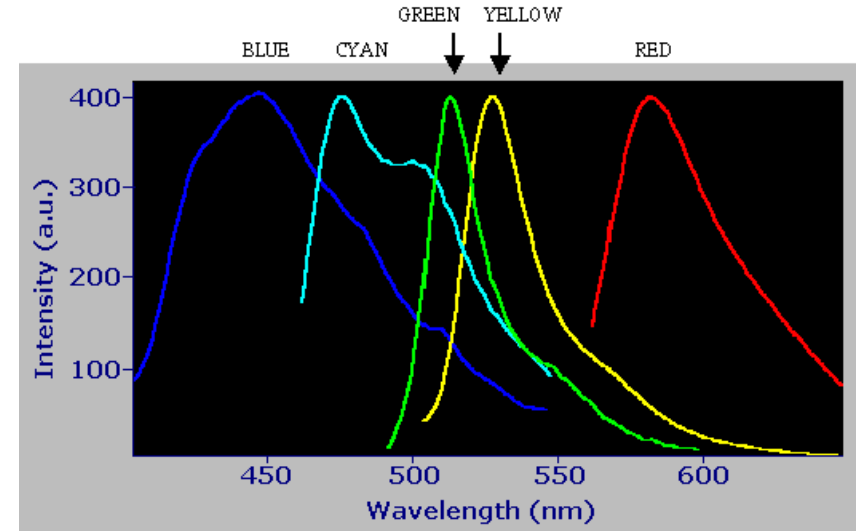
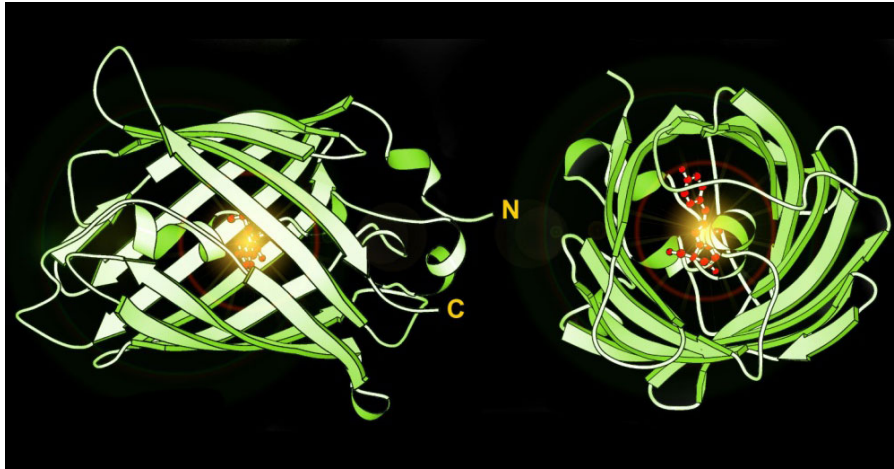
## Aplicações

MERCADO	APLICAÇÕES
Produtos químicos	<ul style="list-style-type: none"><li>• Pesquisa fotoquímica</li><li>• Caracterização de nanopartículas</li><li>• Pesquisa em química de superfície</li><li>• Química analítica</li></ul>
Farmacêutico e biotecnologia	<ul style="list-style-type: none"><li>• Pesquisa bioquímica e biofísica</li><li>• Estudos estruturais e de quantificação de proteína: Interações de proteína com proteína, estudos de membrana</li><li>• Enzimologia: Cinética enzimática utilizando um substrato fluorescente</li><li>• Biologia molecular: Quantificação de DNA e RNA</li></ul>



# Espectroscopia de fluorescência

## Expressão citosólica de proteína verde fluorescente

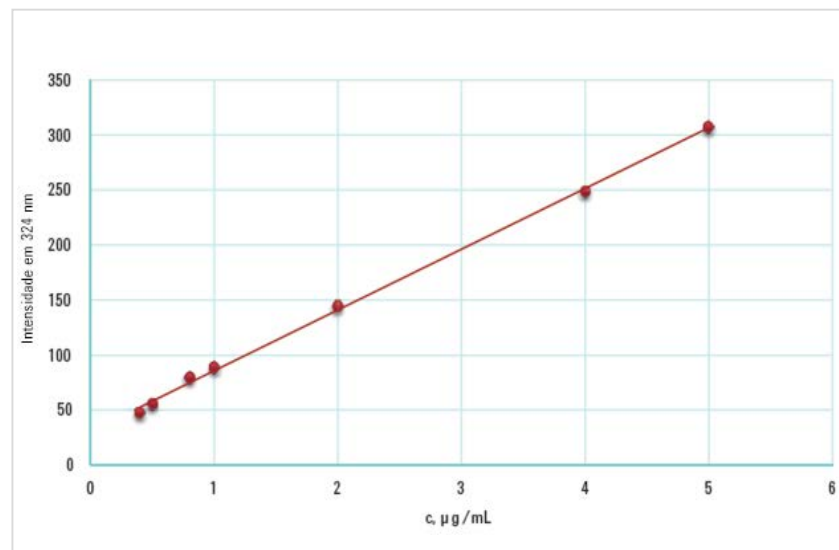
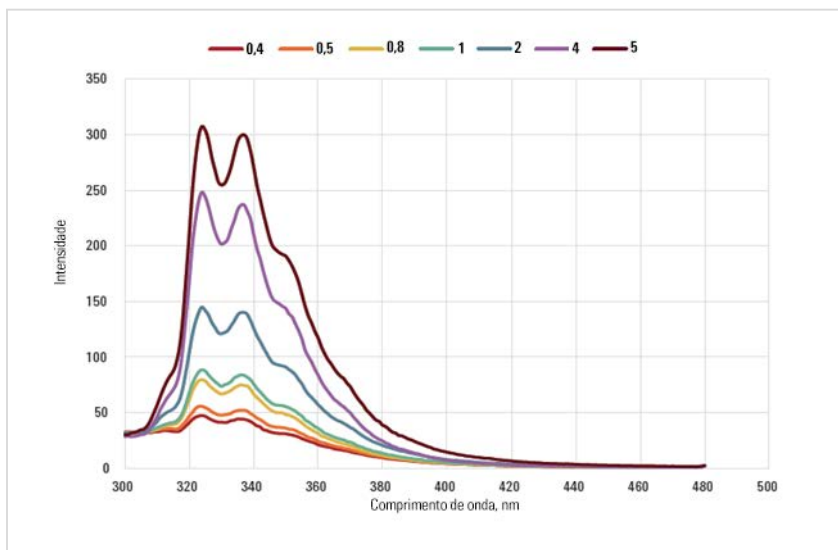


Representação esquemática da proteína verde fluorescente. Esquerda: Fluoróforo tripeptídeo em vermelho. Direita: Intensidade vs. emissão para todo o espectro de proteínas fluorescentes.

Fonte: [Expressão citosólica de Proteína Fluorescente Verde \(GFP\) e seus derivados na levedura Saccharomyces cerevisiae: detecção in vivo utilizando o Cary Eclipse da Agilent](#)

# Espectroscopia de fluorescência

## Quantificação de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos ou óleos de petróleo de petróleo



*Espectros de fluorescência do naftaleno, Comprimento de onda de ex. 250 nm, fenda Ex. 10 nm, fenda Em. 5 nm (esquerda); curva de calibração (os pontos para a mesma concentração são uma média) para a determinação fluorométrica de naftaleno em 324 nm, comprimento de onda de Ex. de 250 nm, fenda de Ex. 10 nm, fenda de Em. 5 nm.*

Fonte: [Quantificação de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos complexos ou óleos de petróleo em água com espectrofotômetro de fluorescência Cary Eclipse de acordo com astm d 5412-93 \(2000\)](#)

# Espectroscopia de fluorescência

## Recursos

Em baixas concentrações, a intensidade de fluorescência geralmente será proporcional à concentração do fluoróforo.

Efeitos de quenching podem influenciar o resultado.

O quenching descreve a diminuição da intensidade da fluorescência de uma dada substância e pode ser resultado de vários processos, como reações de estado excitado ou quenching de colisão.

### Espectroscopia de fluorescência

#### Vantagens

- Extremamente sensível para compostos aromáticos e insaturados
- Pode ser aplicada a outros compostos com derivatização ou marcação
- Facilidade de uso
- Pouca manutenção

#### Limitações

- Limitada a determinados tipos de compostos
- As misturas podem exigir limpeza
- Possibilidade de quenching



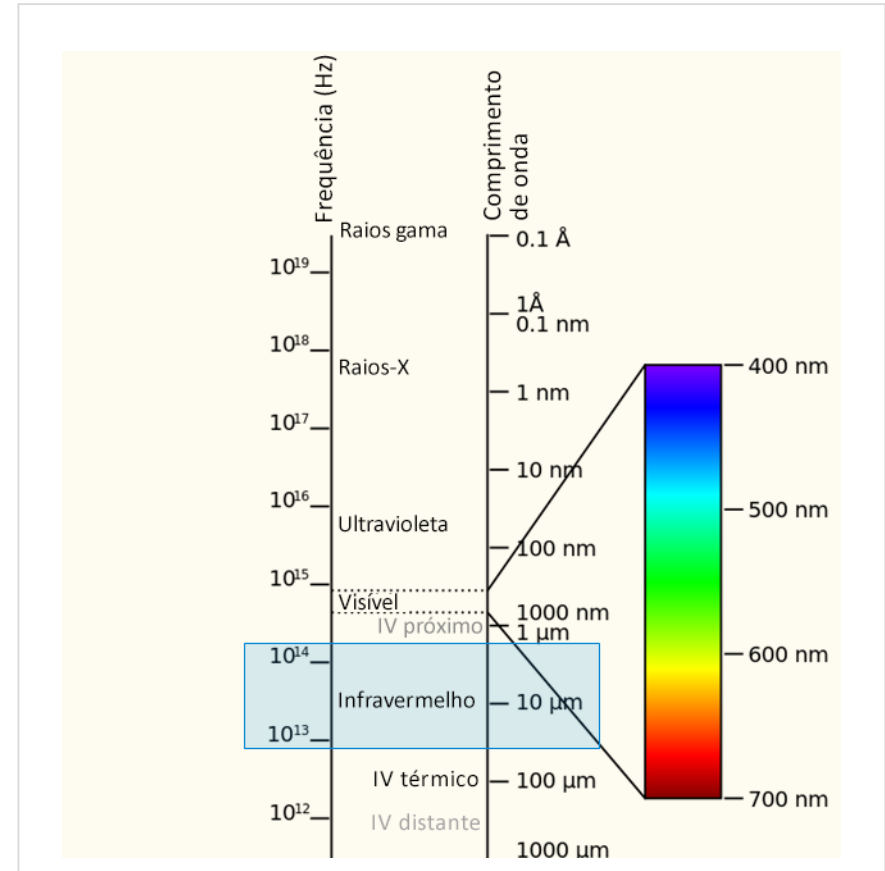
# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier Geral

A radiação infravermelha tem um comprimento de onda maior e uma frequência menor do que a luz visível.

O espectro no infravermelho é dividido em radiação no infravermelho próximo, médio e distante. A região normalmente mais usada é o infravermelho médio (frequência: 4000 e 400  $\text{cm}^{-1}$ ).

A espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) é uma técnica que obtém um espectro no infravermelho de absorção, emissão, fotocondutividade ou espalhamento Raman de um sólido, um líquido ou um gás.

Um espectrômetro FTIR coleta simultaneamente dados de alta resolução espectral em uma ampla faixa espectral.

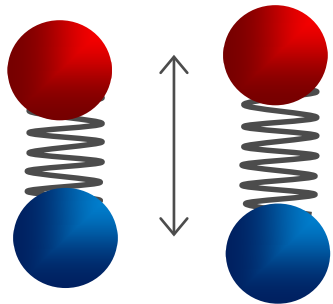


"Espectro eletromagnético" por Victor Blacus

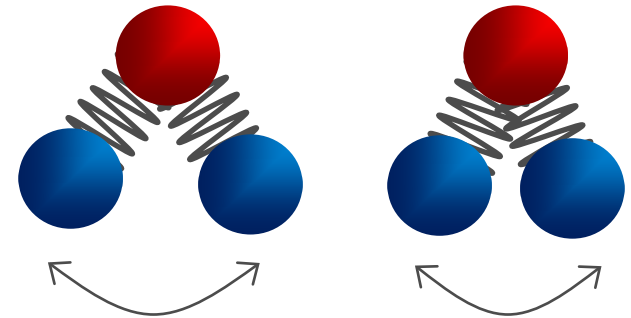
Fonte: [Wikipedia](#)

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier Geral

A luz infravermelha absorvida pode causar vibrações moleculares.  
A espectroscopia no infravermelho mede a mudança da amplitude.

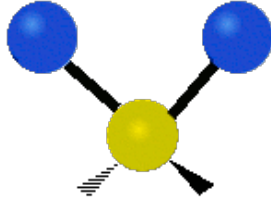
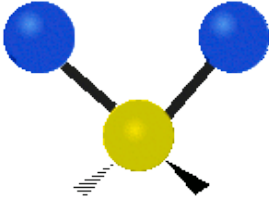
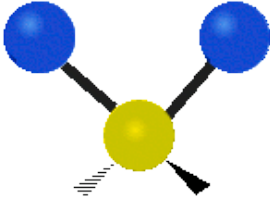
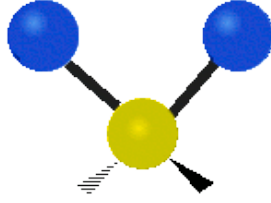
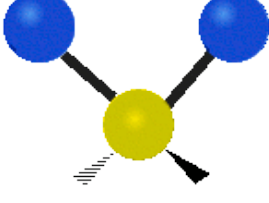
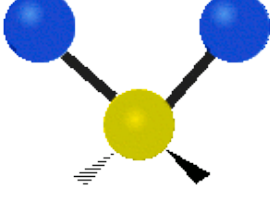


$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

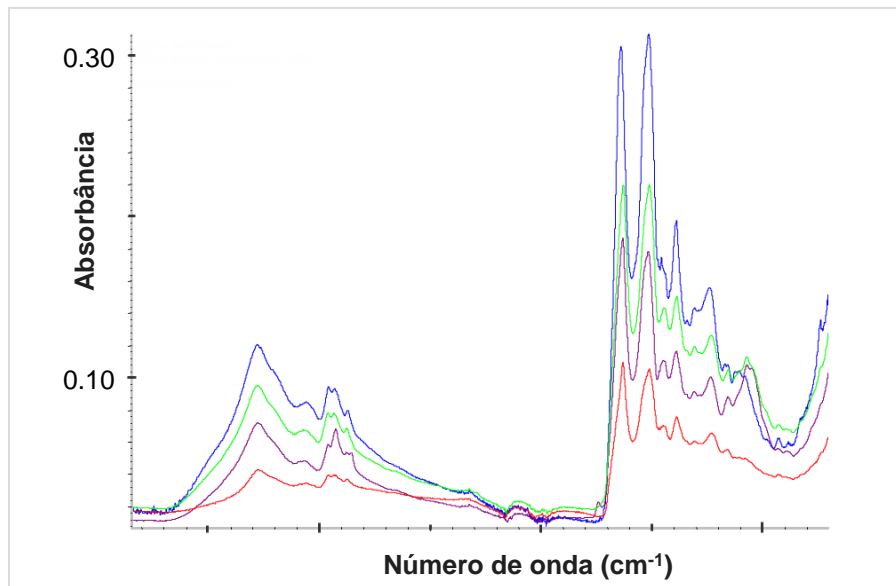
# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier Geral

Estiramento simétrico	Estiramento assimétrico	Tesoura
		
Rotação	Balanço	Torção
		

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Geral

- Ligações ativas no IV produzem bandas
- Essas ligações vibram em frequências específicas
- Pequenas variações na altura e na posição da banda permitem a diferenciação
- O espectro IV pode servir como a impressão digital de um composto



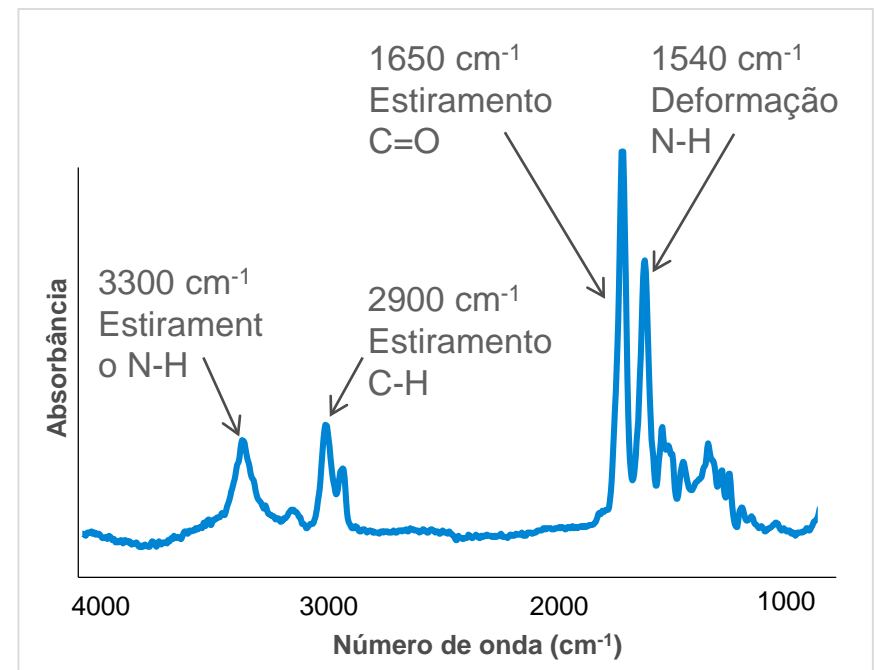
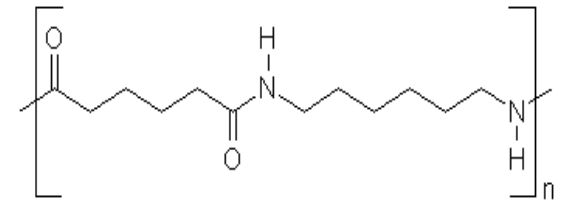
≈



# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier Geral

Número de onda em que diferentes ligações (geralmente conhecidas como "grupos funcionais") absorvem indicam a força da ligação. Ligações mais fortes absorvem em maiores números de ondas.

Cada grupo funcional absorve em sua própria frequência característica, tornando possível elucidar a estrutura química de um material a partir de seu espectro no infravermelho.



# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier Geral

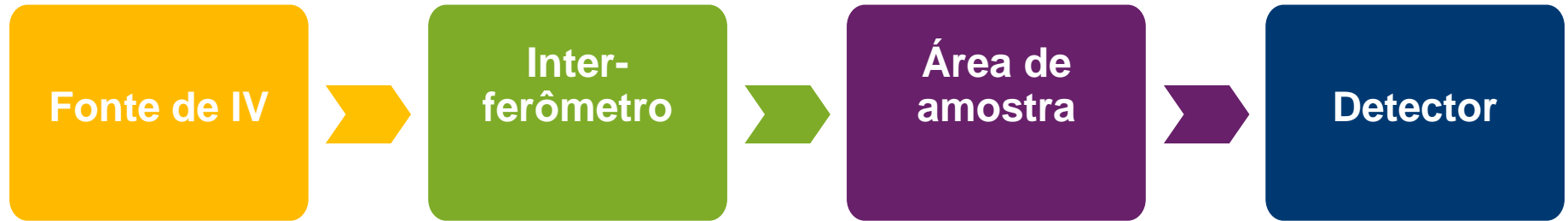
## Comprimentos de onda e ligações moleculares

Ligação	Tipo de vibração	Número de onda Intervalo (cm <sup>-1</sup> )
C-H	Alcano (estiramento)	3000 – 2850
	-CH <sub>3</sub> (deformação)	1450 & 1375
	-CH <sub>2</sub> (deformação)	1465
	Alceno Estiramento	3100 – 3000
	Aromático (deformação fora do plano)	1000 – 650
C=O	Alcino (estiramento)	3150 – 3050
	Alceno (deformação fora do plano)	900 – 600
	Aldeído (estiramento)	~ 3300 2900 – 2700
C=C	Alceno Aromático	1680 – 1600 1600 & 1475
C≡C	Alcino	2250 - 2100
C=O	Aldeído	1740 – 1720
	Cetona	1725 – 1705
	Ácido carboxílico	1725 – 1700
	Éster	1750 – 1730
	Amida	1680 – 1630
Anidrido	1810 – 1760	

Ligação	Tipo de vibração	Número de onda Intervalo (cm <sup>-1</sup> )
C-O	Alcoóis, ésteres, éteres, ácidos carboxílicos, anidridos	1300 – 1000
O-H	Álcoois, fenóis Livre Ligação de hidrogênio Ácidos carboxílicos	3650 – 3600 3400 – 3200 3400 – 2400
N-H	Primário e secundário aminas e amidas (estiramento) (ligação)	3500 – 3100 1640 – 1550
C-N C=N	Aminas Iminas e oximas	1350 – 1000 1690 – 1640

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Configuração geral



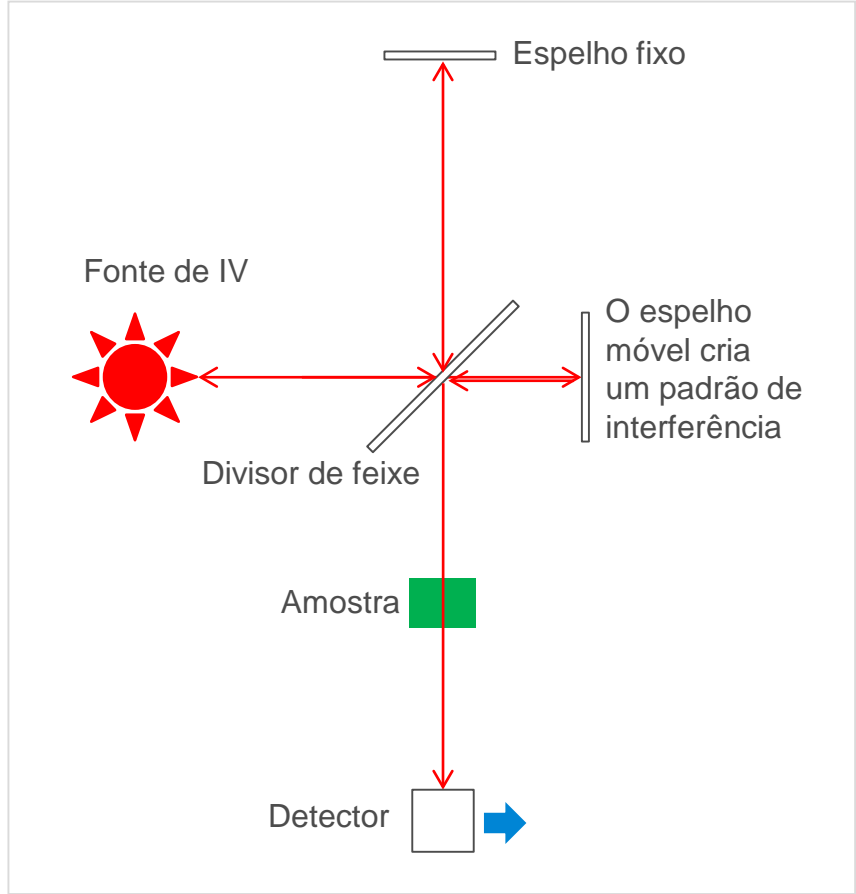
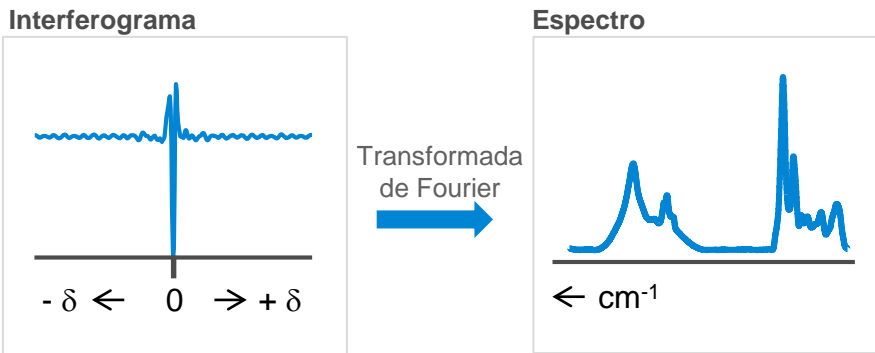
- A fonte IV gera um feixe infravermelho (fonte de radiação de banda larga)
- O interferômetro (configurações de espelho) cria um padrão de interferência
- A área de amostra mantém a amostra, o feixe infravermelho atravessa a amostra
- O detector gera um interferograma
- O computador converte o interferograma em espectro

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Interferograma

Um interferograma é um gráfico da intensidade de infravermelho vs. a posição do espelho móvel.

O algoritmo da transformada de Fourier converte um interferograma em um espectro ao separar as frequências individuais de absorbância e criar um gráfico de intensidade vs. número de onda.

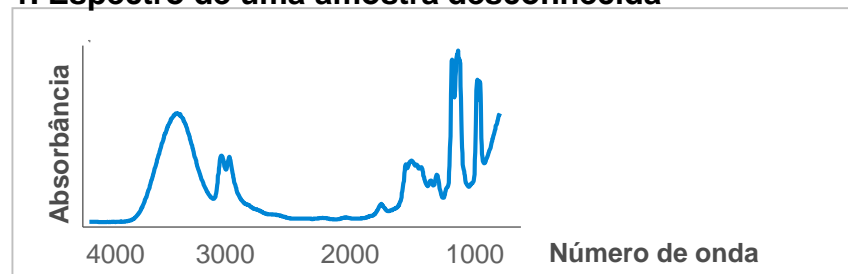


# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

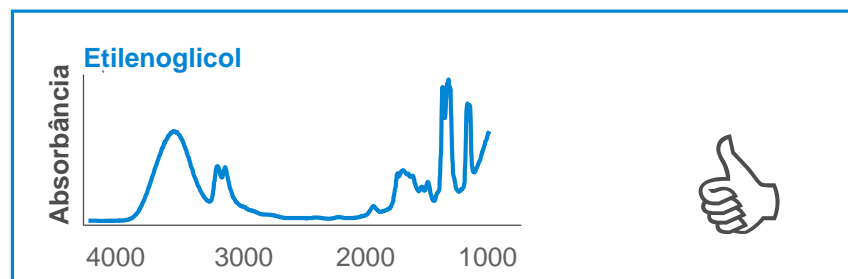
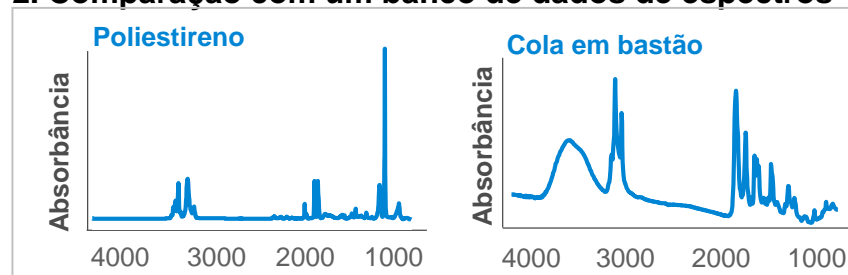
## Análise qualitativa

- Os compostos podem ser identificados pelo seu espectro no infravermelho único
- Os espectros no infravermelho fornecem informações sobre a estrutura molecular (por exemplo, a presença de um grupo ciano)
- Os computadores podem procurar em bancos de dados no infravermelho para identificar compostos

### 1. Espectro de uma amostra desconhecida



### 2. Comparação com um banco de dados de espectros

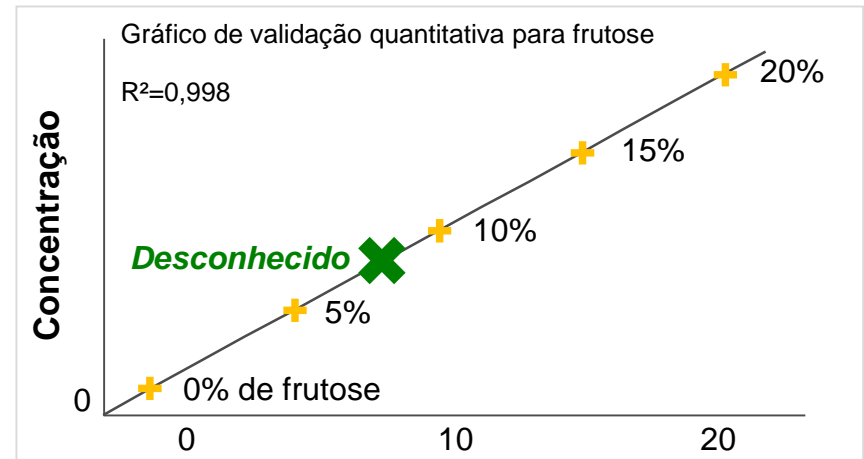
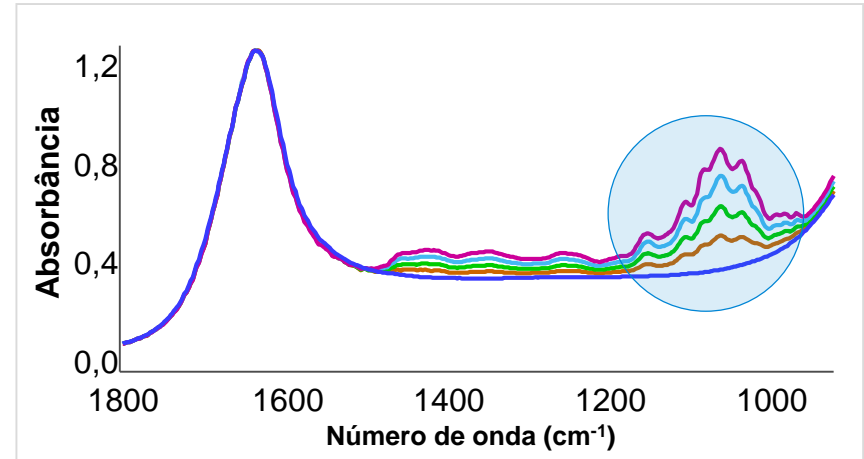


# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Análise quantitativa

### Quantificação

- A lei de Beer-Lambert pode ser aplicada na espectroscopia FTIR
- Compare a amostra com a curva de calibração de absorbância vs. a concentração de um padrão
- Aplicável a misturas – quantificação simultânea



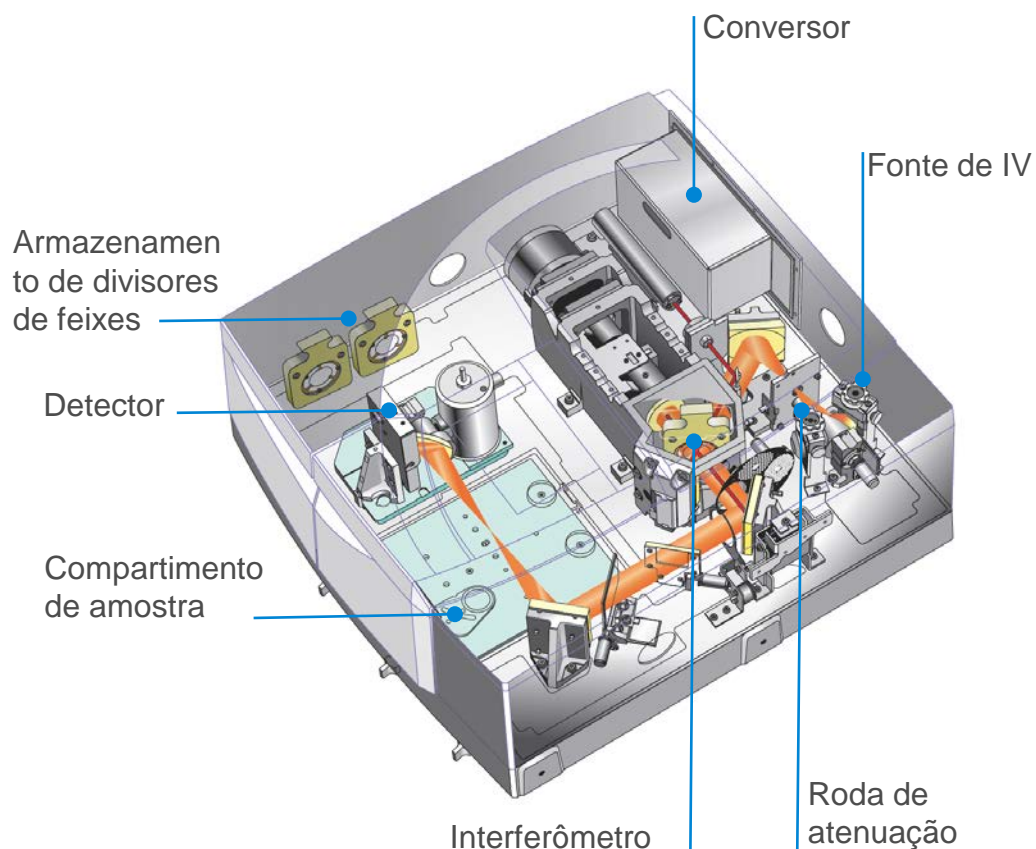
Curva de calibração de frutose de 0-20%

Fonte: Material de treinamento interno da Agilent

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier Sistema

## Aplicações principais

- Imagem biomédica (tecido)
- Imagem química
- Controle de processo (biodiesel)
- Pesquisa de material/polímero/ controle
- Aplicações forenses (teor de álcool no sangue)



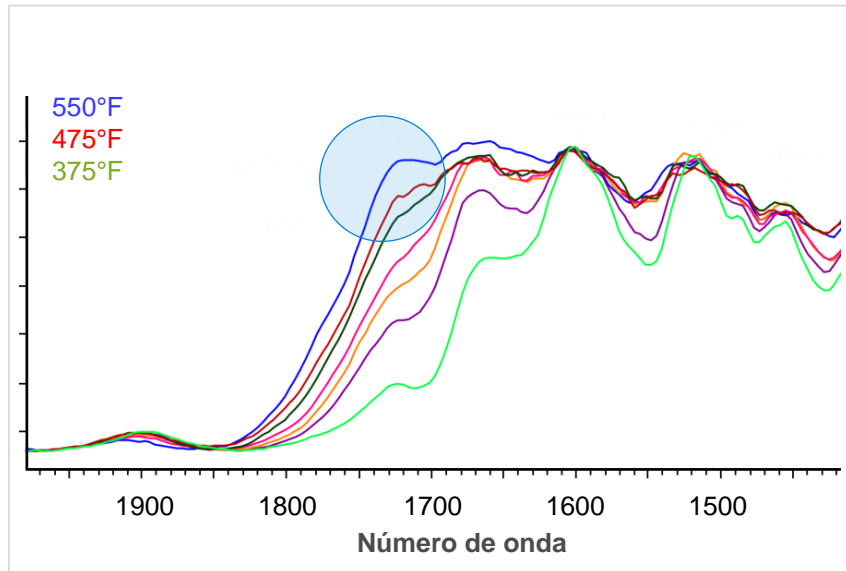
# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Aplicações

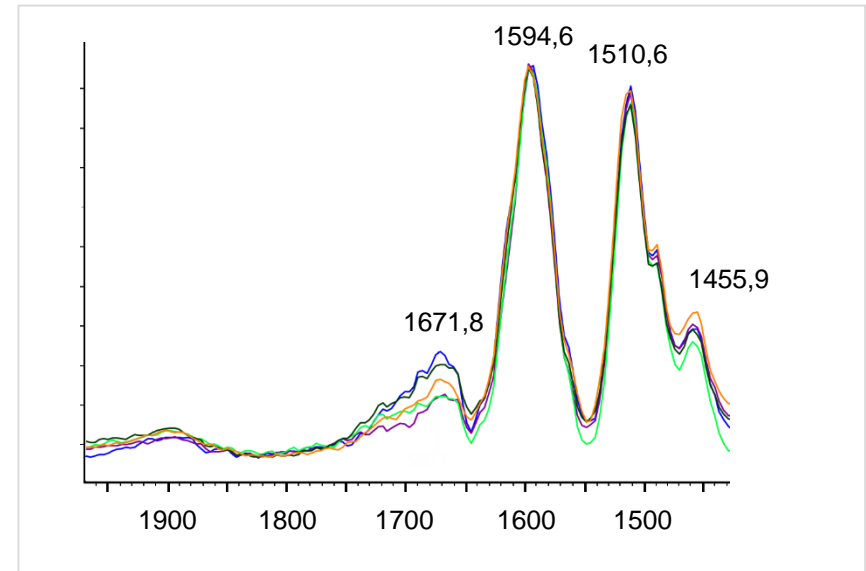
MERCADO	APLICAÇÕES
Materiais	<ul style="list-style-type: none"><li>• Dano de calor e UV em compósitos, cura de compósitos</li><li>• Identificação de superfícies de revestimento, limpeza e preparação de superfícies, desgaste do revestimento e intempéries</li><li>• Controle de qualidade, conservação histórica e de arte, pesquisa de material</li></ul>
Energia e produtos químicos	<ul style="list-style-type: none"><li>• Controle de qualidade da entrada de matérias-primas líquidas e produtos acabados, incluindo produtos químicos orgânicos, surfactantes, lubrificantes e óleos comestíveis</li></ul>
Alimentos	<ul style="list-style-type: none"><li>• Controle da qualidade da entrada de matérias-primas e de produtos acabados</li></ul>

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Determinação de danos a compósitos



Material de compósito de fita não acabado de epóxi 1 termicamente danificado. Os cupons de compósito são expostos a uma faixa de temperaturas por 1 hora. A banda de absorção em 1722  $\text{cm}^{-1}$  (círculo vermelho) decorre da vibração do estiramento da carbonila associado à oxidação da resina e indica sobre-exposição térmica.



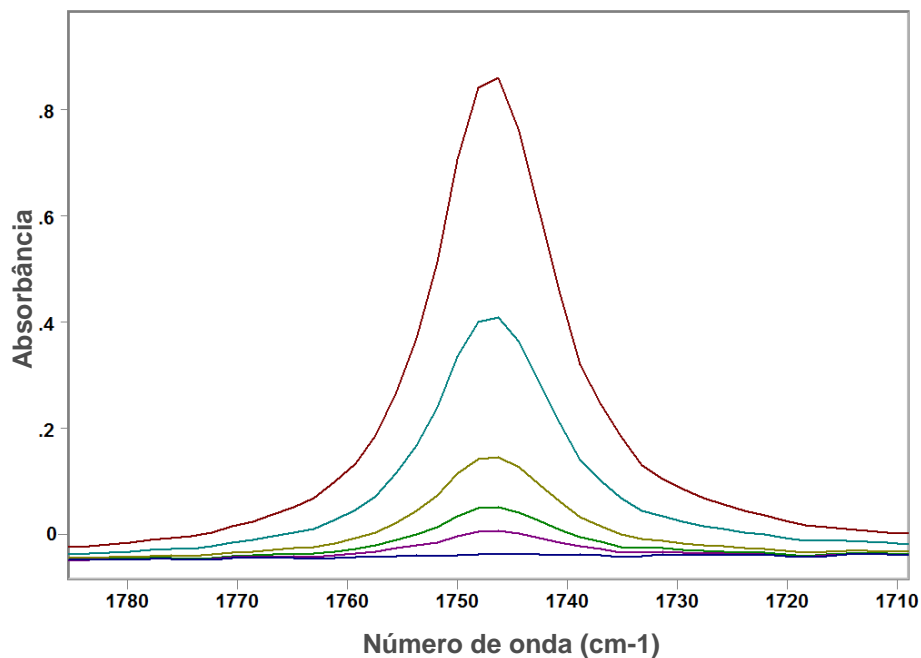
Material de compósito de fita acabado de epóxi 1 termicamente danificado. Os cupons de compósito são expostos a uma faixa de temperaturas por 1 hora. A vibração em 1722  $\text{cm}^{-1}$  está ausente no ambiente anaeróbio.

A diminuição da absorbância a 1672  $\text{cm}^{-1}$  fornece uma boa correlação negativa à exposição da temperatura.

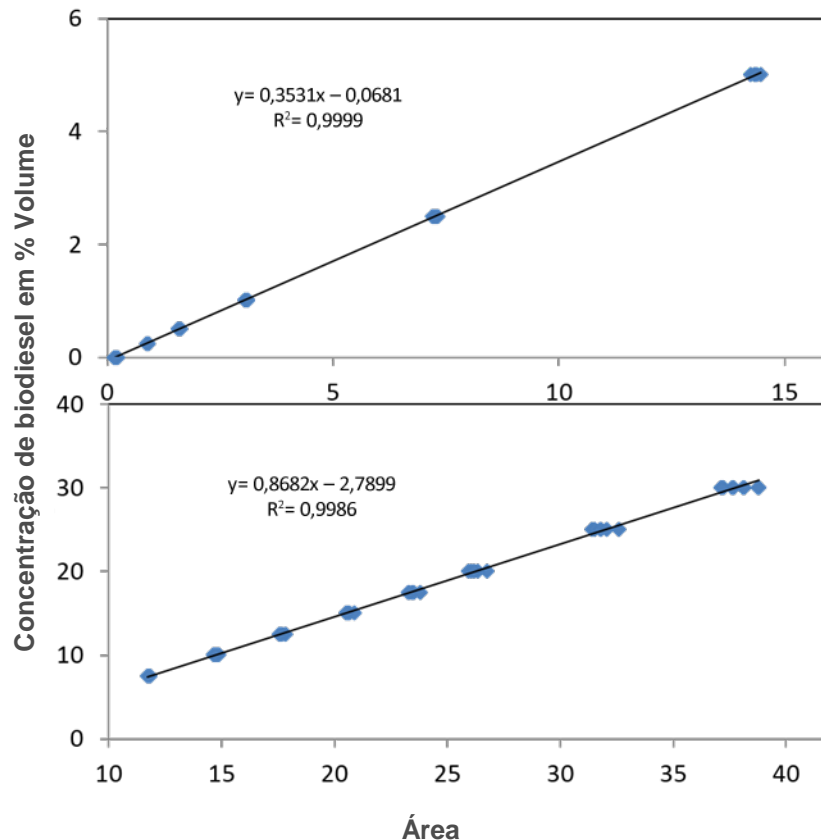
Fonte: [Avaliação não destrutiva de dano térmico do compósito com o novo FTIR 4300 portátil da Agilent](#)

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Medição da concentração de biodiesel em combustível diesel com cetano elevado



Os espectros no infravermelho sobrepostos de diesel e calibração para diferentes concentrações de biodiesel na região de absorvância do diesel com cetano elevado 1713 a 1784 cm<sup>-1</sup> utilizados na calibração para a concentração na faixa de 0 a 6%.



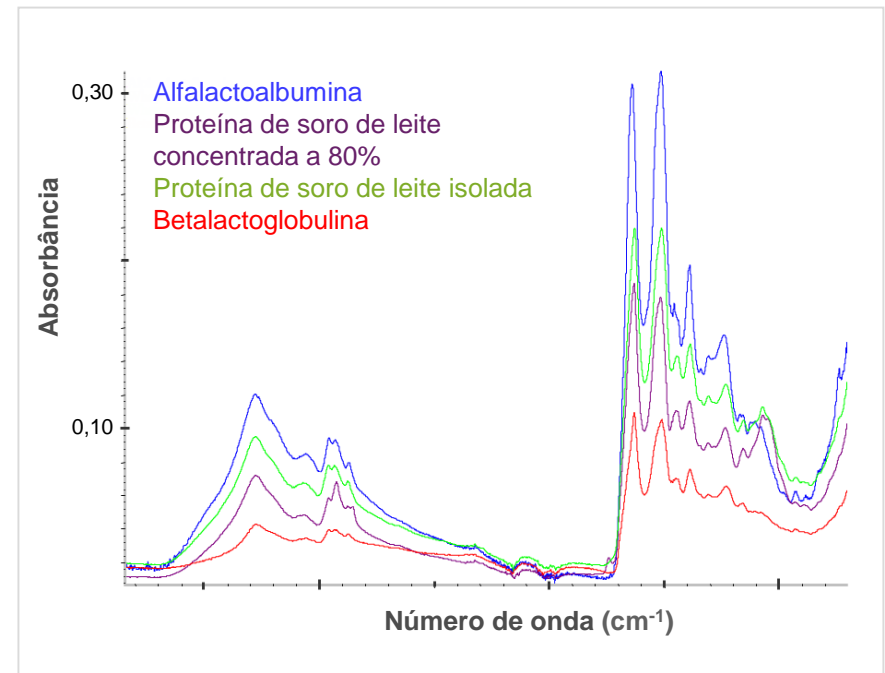
Fonte: [ASTM D7806-12 para biodiesel em óleo de combustível diesel à base de petróleo](#)

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Controle de qualidade de laticínios em pó

### A aquisição espectral foi realizada da seguinte forma:

- Colocação de uma pequena quantidade de proteína em pó sobre a superfície de ATR de diamante.
- Pressão das amostras contra o cristal de diamante usando a prensa incorporada. (Uma embreagem deslizante na prensa evita excesso de aperto.)
- Coleta de 64 espectros coadicionados (tempo de aquisição de ~30 segundos a uma resolução de  $4\text{ cm}^{-1}$ ) entre  $4000$  e  $650\text{ cm}^{-1}$ .



*Espectros no infravermelhos de laticínios em pó selecionados registrados no analisador ATR-FTIR Cary 630*

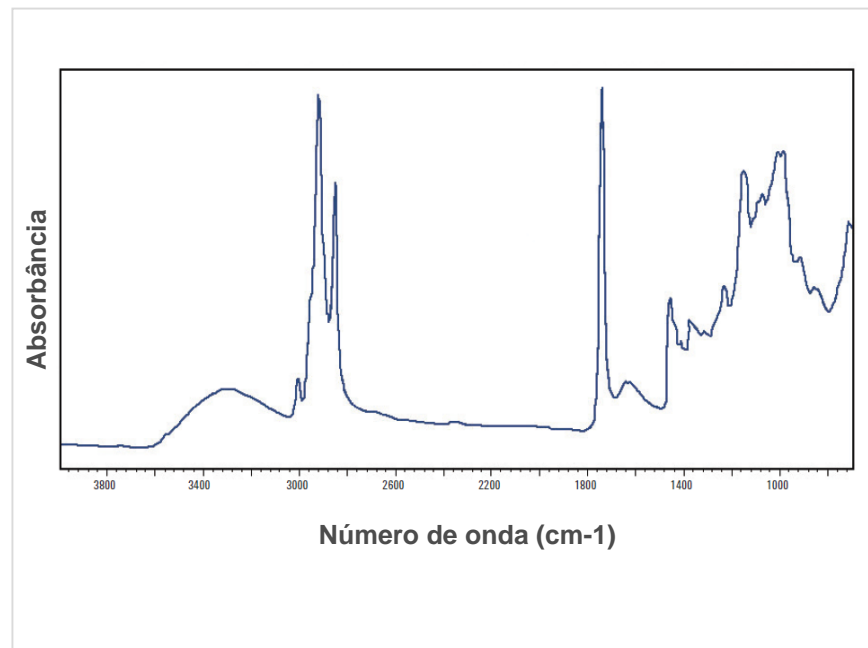
Fonte: [QA/QC de laticínios em pó usando o analisador ATR-FTIR Cary 630 da Agilent](#)

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Medição de acrilamida em batatas fritas

Sensor	Tipo de batata frita	Fatores	SE ( $\mu\text{g/L}$ )	r	
MIR Cary 630 portátil	<sup>a</sup> Regular	Calibração	7	65	0,95
		Val. cruzado	7	74	0,93
		Previsão*	7	75	0,90
	<sup>b</sup> Temperada	Calibração	7	59	0,96
		Val. cruzado	7	75	0,92
	<sup>c</sup> Doce	Calibração	7	74	0,99
Val. cruzado		7	98	0,98	

<sup>a</sup> "Regular" refere-se a batatas fritas que contêm apenas batatas, óleos vegetais e sal.  
<sup>b</sup> "Temperada" refere-se a batatas fritas que contêm ingredientes adicionais.  
<sup>c</sup> "Doce" refere-se a batatas fritas de batata-doce.  
\*previsões de variáveis independentes feitas apenas em batatas fritas regulares.



Resultados e espectro de bolo de batata frita regular medido pelo analisador FTIR portátil equipado com tecnologia de amostra de ATR de diamante de reflexão simples.

Fonte: [Compêndio de espectroscopia molecular - Garantia da qualidade, produção e segurança de alimentos](#)

# Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier

## Recursos

A espectroscopia no infravermelho é uma técnica poderosa e versátil que pode ser usada para analisar gases, líquidos e sólidos.

Ela muitas vezes é usada para identificar estruturas, porque grupos funcionais dão origem a bandas características em termos de intensidade e posição (frequência).

É uma técnica simples e confiável, amplamente utilizada em pesquisas no setor.

### Espectroscopia de fluorescência

#### Vantagens

- Simples de executar
- Análise rápida e precisa
- Pode lidar com muitos tipos de amostras, de tamanhos diferentes
- Pode ser qualitativa e quantitativa
- Muitas vezes, requer pouco ou nenhum preparo de amostra
- Não destrutiva

#### Limitações

- A molécula deve reagir à radiação infravermelha
- Informações elementares mínimas



# Abreviações

Abreviação	Definição
A	absorbância
b	caminho óptico (cm)
c	speed of light ( $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ )
$\epsilon$	coeficiente de extinção ou absorvidade molar ( $\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$ )
E	oscilação do campo elétrico
$E$	energia
FTIR	Infravermelho por transformada de Fourier
h	Constante de Planck ( $6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}$ )
I	radiação transmitida
$I_0$	radiação incidente
$\lambda$	comprimento de onda
T	transmitância
UV-VIS	ultravioleta – visível
$\nu$	frequência ( $\text{s}^{-1}$ )

# Saiba mais

Para obter mais informações sobre os produtos Agilent, acesse [www.agilent.com](http://www.agilent.com) ou [www.agilent.com/chem/academia](http://www.agilent.com/chem/academia)

Você tem dúvidas sobre esta apresentação ou deseja dar sugestões?

Entre em contato [chem\\_vendas@agilent.com](mailto:chem_vendas@agilent.com)

Início da história	“The Early History of Spectroscopy” de Nicholas C. Thomas, <i>J Chem Edu</i> , Vol 68, 6, agosto de 1991	
Introdução	<a href="#">Fundamentos da espectroscopia UV-visível</a>	5980-1397EN
Aplicação	<a href="#">Medição de densidades ópticas acima de 10 Abs no espectrofotômetro de medição universal (UMS) Cary 7000 da Agilent</a>	5991-2528EN
Aplicação	<a href="#">Medição da cor de uma tinta sobre tela diretamente com reflectância difusa externa usando o espectrofotômetro UV-Vis Cary 60 da Agilent</a>	5991-3783EN
Aplicação	<a href="#">Medições simples e automatizadas das propriedades fotocatalíticas de espécies colorimétricas usando o espectrofotômetro UV-Vis Cary 60 da Agilent com fibra óptica</a>	5990-7864EN
Aplicação	<a href="#">Expressão citosólica de Proteína Fluorescente Verde (GFP) e seus derivados na levedura <i>Saccharomyces cerevisiae</i>: detecção in vivo utilizando o Cary Eclipse da Agilent</a>	SI-A-1831
Aplicação	<a href="#">Quantificação de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos complexos ou óleos de petróleo em água com espectrofotômetro de fluorescência Cary Eclipse de acordo com astm d 5412-93 (2000)</a>	5991-3166EN
Aplicação	<a href="#">Avaliação não destrutiva de dano térmico em compósito com o novo FTIR 4300 portátil da Agilent</a>	5991-4037EN
Aplicação	<a href="#">ASTM D7806-12 para biodiesel em óleo diesel à base de petróleo</a>	5991-5591EN
Aplicação	<a href="#">QA/QC de laticínios em pó usando o analisador ATR-FTIR Cary 630 da Agilent</a>	5991-0784EN
Aplicação	<a href="#">Compêndio de espectroscopia molecular - Garantir qualidade, produção e segurança dos alimentos</a>	5991-3818EN
Web	<a href="#">CHROMacademy</a> – acesso gratuito para alunos e funcionários da universidade a cursos on-line (material em inglês)	
Vídeos e imagens	<a href="http://www.agilent.com/chem/teachingresources">www.agilent.com/chem/teachingresources</a>	





# OBRIGADO

Número de publicação: 5991-6592PTBR

 ToC

Apenas para finalidades de ensino

March 7, 2016

50



**Agilent Technologies**

**ACADEMIC  
& INSTITUTIONAL  
RESEARCH**