

Espectroscopia no infravermelho: uma apresentação para o Ensino Médio

(*Infrared spectroscopy: a presentation for high school students*)

Diego de Oliveira Leite e Rogério Junqueira Prado¹

Instituto de Física, Universidade Federal do Mato Grosso, Cuiabá, MT, Brasil

Recebido em 19/11/2010; Aceito em 17/11/2011; Publicado em 2/6/2012

A teoria da aprendizagem significativa busca, em sua essência, a construção de significados coesos e coerentes na estrutura de conhecimento do indivíduo. Assim sendo, este texto foi elaborado com o intuito de transmitir, aos alunos e professores do Ensino Médio, conteúdos atuais que não são usualmente abordados nas disciplinas de física e química, bem como ligar esses conteúdos a exemplos e conceitos possíveis de serem trabalhados no dia-a-dia da sala de aula. Especificamente, este texto propõe a organização, apresentação e discussão da identificação e caracterização de materiais através da espectroscopia no infravermelho, uma técnica de análise moderna, precisa e muito usada numa grande variedade de aplicações que englobam desde as ciências físicas, químicas e biológicas, passando ainda pela engenharia de materiais e ciência forense. O texto também trabalha conceitos e definições atuais e interessantes, como os de espectro e espectroscopia, de uma maneira mais geral.

Palavras-chave: espectroscopia, espectroscopia no infravermelho, caracterização de materiais.

The theory of significant learning aims, in its essence, the construction of concise and coherent significance in each personal structure of knowledge. Therefore, this text was written with the purpose of diffusing, to high school students and teachers, an actual subject usually not mentioned in physics and chemistry classes, as well as the linking of this subject to examples and concepts possible to be developed in the classroom. Specifically, this text proposes the organization, presentation and discussion of the identification and characterization of materials through infrared spectroscopy, a modern and precise characterization technique, largely used in a great variety of applications in physical, chemical, medical, biological, materials and forensic sciences, technology and engineering. This paper also develops actual and important concepts and definitions, as spectra and spectroscopy, in a general way.

Keywords: spectroscopy, infrared spectroscopy, characterization of materials.

1. Comentários gerais

A espectroscopia no infravermelho é um tema complexo, e que não deve ser trabalhado mesmo com uma turma do último ano do Ensino Médio sem um bom embasamento e preparação do professor. Considerando a especificidade e profundidade conceitual, o professor deve estar seguro da maturidade e do interesse dos alunos (e de si mesmo) para abordar o tema em suas aulas. Por isso, a segunda parte deste artigo possui caráter introdutório e motivacional, abordando a importância das técnicas espectroscópicas de uma maneira geral. A identificação de materiais numa escala microscópica, um dos pontos centrais de qualquer espectroscopia, é ilustrada através de uma comparação com um quebra-cabeça. Nesta parte trabalhamos com espectroscopia num contexto mais geral e, como cada espectroscopia

possui características e possibilidades de análise distintas, algumas das possibilidades ali citadas (dentro deste contexto mais geral) podem não coincidir com as possibilidades específicas da técnica de espectroscopia no infravermelho, que serão abordadas detalhadamente na quarta parte deste texto.

A terceira parte do artigo trata dos conceitos de espectro de radiações eletromagnéticas, ondas eletromagnéticas, espectros característicos dos elementos e interação entre radiação e matéria. O texto é rico em exemplos e foi construído com uma linguagem que mescla termos provavelmente já conhecidos pelo aluno [1], como os termos raios X e microondas, com termos novos, como a própria palavra espectroscopia. O leitor pode (e deve) recorrer ao glossário no final do texto para dar significado aos termos novos e recordar o significado de termos já trabalhados anteriormente. Os

¹E-mail: rjprado@ufmt.br.

gráficos são apresentados ainda nesta terceira parte, juntamente com o conceito de absorvância.

A última parte do texto descreve as principais características da espectroscopia no infravermelho. A interação entre ondas eletromagnéticas na região do infravermelho e arranjos atômicos é apresentada através de analogias com blocos, molas e ondas em cordas e outros objetos, de modo que o aluno e/ou o professor pode(m) fazer experimentos em sala utilizando objetos macroscópicos para compreender o modelo teórico do universo atômico. Descrições detalhadas dos experimentos podem ser obtidas nos textos de referência listados ao final do artigo. Algumas curiosidades sobre a forma com que a espectroscopia no infravermelho é utilizada por especialistas estão diluídas no texto de modo a permitir associações entre a teoria e a prática.

2. Para que serve a espectroscopia?

Existem diversas maneiras de identificar um material, da mais rudimentar até a mais tecnologicamente avançada. A história de como Arquimedes poderia ter indicado a falsificação de uma coroa com pesagens sob a água [2], por exemplo, ilustra como identificar um material utilizando o conceito de massa específica, empuxo e o princípio de Arquimedes. Todavia, a nível atômico, ou mesmo microscópico, é impossível fazer medidas de pesos com balanças hidrostáticas. As balanças hidrostáticas funcionam para fazer medidas de objetos da ordem de centímetros. Mas, e para objetos da ordem de angstroms?

Neste caso, é muito mais viável medir a radiação eletromagnética absorvida ou emitida pelo material [3]. No lugar de uma balança hidrostática, utiliza-se um espectrômetro. No lugar de conceitos como o de massa específica, empuxo e princípio de Arquimedes, são usados conceitos como o de espectro, frequência e radiação eletromagnética. Através de medidas do espectro de absorção ou emissão de radiação pela matéria (espectroscopia) é possível elaborar modelos e conhecer as estruturas atômicas que formam os materiais. A partir daí seria possível calcular, entre tantas outras coisas, a massa específica do material num nível microscópico.

As várias técnicas espectroscópicas existentes podem ser utilizadas para uma série de finalidades como, por exemplo, identificar substâncias presentes na cena de um crime, que pode ser algo crucial para a identificação do culpado; determinar a concentração de substâncias em alimentos e medicamentos, permitindo avanços no controle de qualidade desses produtos; melhor compreender as propriedades microscópicas responsáveis por características macroscópicas, algo fundamental para o desenvolvimento, produção e utilização de novos materiais; procurar e descobrir elementos e substâncias que constituem a matéria de estrelas e planetas [4-6].

Particularmente, as técnicas espectroscópicas podem ser utilizadas para a caracterização de materiais. Isso significa que com elas é possível obter informações sobre os tipos de ligações entre átomos, a vizinhança atômica desses átomos e ligações, a presença e a concentração de substâncias em amostras, etc. Na escala atômica e molecular, a caracterização de materiais tem um significado especial, pois trata das pequenas peças que formam todas as coisas (os átomos) e como elas estão arrançadas entre si.

Aqui é instrutivo fazer uma analogia entre os arranjos atômicos e as peças de um quebra-cabeça. A cor azulada de uma peça de quebra-cabeça nos dá a pista de que ela pertence ao céu, à água ou a qualquer objeto azulado. Pequenos detalhes da peça, que são basicamente outras tonalidades de cores, nos darão mais dicas sobre sua posição no quebra-cabeça. De forma semelhante, observando as “cores” ou frequências características do espectro de absorção e/ou emissão de cada material, obtemos pistas sobre as espécies atômicas ali presentes, suas respectivas concentrações e/ou de como estão ligados entre si. Mas, sem técnicas apropriadas e a olho nu não somos capazes de fazer tais observações, e é aí que entra a espectroscopia, uma das maneiras pelas quais podemos fazer observações do que acontece numa escala muito pequena, permitindo que o ser humano exercite seu espírito investigativo e/ou criador para conhecer a realidade nanoscópica de qualquer objeto, material ou arranjo atômico de maneira profunda. Temos então que a espectroscopia é, sim, uma aplicação do conhecimento científico que permite gerar mais conhecimento.

3. Espectros de radiação e a interação entre radiação e matéria

O espectro de radiação eletromagnética (Fig. 1) é o conjunto de ondas eletromagnéticas de todas as frequências possíveis. Ondas eletromagnéticas são ondas caracterizadas pela oscilação de campos elétricos e magnéticos. Pode-se dizer que as diversas faixas do espectro eletromagnético são diferenciadas, no vácuo, apenas por suas frequências (ou comprimentos de onda). A relação entre a velocidade (c), o comprimento de onda (λ) e a frequência (f) das ondas eletromagnéticas que se propagam no vácuo é dada por

$$c = \lambda \cdot f. \quad (1)$$

Um tipo de onda eletromagnética com a qual estamos muito acostumados é a luz visível, que, como sabemos, não é composta apenas por um comprimento de onda, mas por comprimentos de onda que estão numa faixa entre 400 e 730 nanômetros (nm) aproximadamente. As cores são geradas através da percepção fisiológica diferente dada a cada comprimento de onda na região do visível [7]. Por exemplo, a luz de 400 nm

é violeta, enquanto a luz de 730 nm é vermelha. Em meios materiais, as ondas eletromagnéticas passam a se diferenciar também por sua velocidade de propagação e, conseqüentemente, pelos desvios sofridos por refração ao passar de um meio para outro como, por exemplo, do ar para o vidro, ou quando refletido internamente

e refratado por gotas de chuva, gerando o arco-íris [7]. A realização de experimentos de dispersão da luz com prismas ou com redes de difração (um CD, por exemplo) é extremamente importante para a compreensão de características e fenômenos da luz visível, bem como para a construção da ideia de espectro.

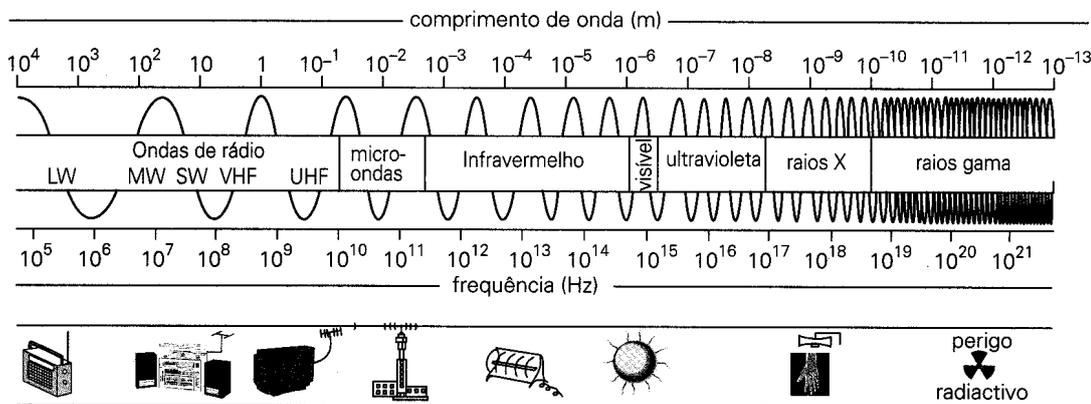


Figura 1 - Espectro eletromagnético. Fonte: Ref. [10].

Os outros tipos de onda eletromagnética apresentados na Fig. 1 não podem ser vistos diretamente pelo olho humano, mas podem ser detectados com dispositivos apropriados [3]. A radiação no infravermelho é um exemplo de radiação invisível ao olho humano, que é caracterizada por comprimentos de onda entre 730 e 1.000.000 nm. Ela pode ser detectada com um experimento semelhante ao que Herschel realizou no ano de 1800 (Fig. 2), cujo objetivo era o de identificar quais cores do espectro visível da luz solar continham o calor [8]. O experimento consiste na colocação de termômetros de mercúrio pintados de preto em posições distintas do espectro da luz solar para observação das temperaturas em cada região do espectro. Nesse tipo de experimento, observa-se que a temperatura aumenta conforme os termômetros são movidos na direção do vermelho. Aumenta ainda mais quando os termômetros são movidos além da parte vermelha do espectro. Os termômetros registram a maior temperatura na região invisível ao lado do vermelho, isto é, na região do infravermelho [8, 9].

Observe que a Fig. 1 apresenta objetos associados a cada tipo de onda eletromagnética. Por exemplo, um rádio para ondas de rádio, o Sol para a luz visível e para a radiação ultravioleta, um aquecedor para a radiação no infravermelho, uma radiografia para os raios X, o símbolo da radioatividade para raios gama, etc. Essa representação indica que os diferentes tipos de onda eletromagnética estão relacionados a efeitos e aplicações distintos. Por exemplo, raios X servem para a obtenção

de imagem dos ossos, demais tecidos e órgãos de uma pessoa sem ter que dissecá-la, enquanto microondas servem para aquecer alimentos ou fazer pipocas. A partir da Fig. 1, ainda é possível inferir que raios X possuem frequências mais altas do que microondas, e isso nos fornece uma pista a respeito do por que dos diferentes efeitos causados pelos dois tipos de onda. Uma resposta mais detalhada, todavia, deve levar em conta como cada tipo de onda é produzido e como cada tipo de onda eletromagnética interage com a matéria.

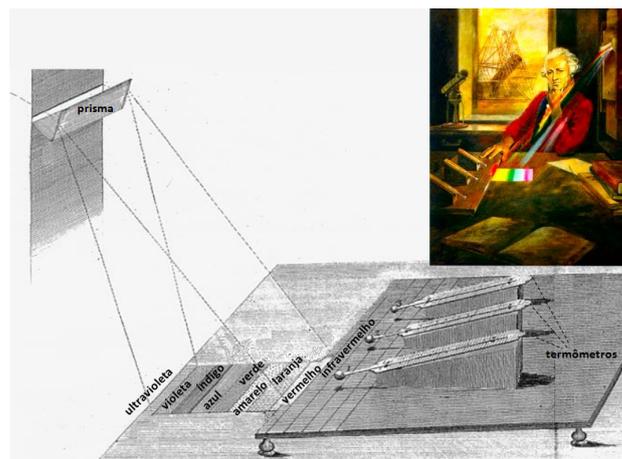


Figura 2 - Experimento de Herschel. Figura adaptada. Fonte: Refs. [3, 11].

As ondas eletromagnéticas são geradas a partir do movimento de cargas elétricas aceleradas ou durante transições (eletrônicas, nucleares, vibracionais) entre

dois níveis de energia quantizados, e isso remete ao universo atômico. Alguns elétrons de cada átomo estão fortemente ligados ao núcleo, enquanto outros estão praticamente livres para circular pelo material. Quanto mais elétrons “livres” um material possuir, maior será a capacidade desse material em refletir a luz, justamente porque esses elétrons estão livres para vibrar e interagir com a luz (onda eletromagnética) incidente. Os metais possuem grande quantidade desses elétrons e, em geral, refletem bem a luz. Lembre que os espelhos são feitos não apenas com vidro, mas também com uma fina camada de prata. Também, a vibração controlada de elétrons em antenas transmissoras gera ondas de rádio que, por sua vez, produzem novas vibrações de elétrons idênticas à original em uma antena receptora. Essas vibrações são automaticamente transformadas em sinais elétricos, que são ampliados e, em seguida, em som.

Assim, da mesma maneira que cargas elétricas oscilantes podem gerar radiação eletromagnética, radiação eletromagnética também pode fazer com que cargas elétricas oscilem. Diz-se então que ondas eletromagnéticas podem ser absorvidas pelo material, cedendo energia a ele. A carga elétrica oscilante não precisa ser necessariamente o elétron, distribuições de carga bem mais complexas podem também vibrar quando expostas a uma radiação eletromagnética, como no caso de uma molécula, ligação química ou arranjo atômico qualquer que possua dipolo elétrico (Fig. 3).

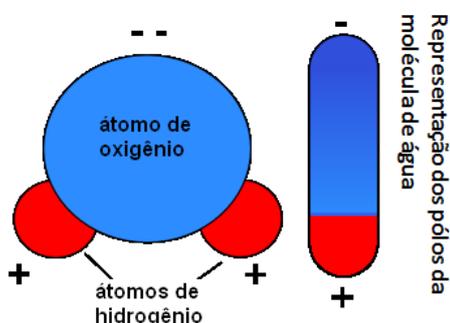


Figura 3 - Representação do dipolo elétrico da molécula de água. Figura adaptada. Fonte: Ref. [12].

Ao observar a luz emitida por uma lâmpada de neônio, que atravessa primeiramente uma fenda muito pequena e em seguida atravessa um prisma ou uma rede de difração², vemos que o espectro da luz emitida pelo neônio não é igual ao espectro da luz emitida pelo Sol (Fig. 4, A) ou por uma lâmpada incandescente. O espectro da luz emitida por uma lâmpada de neônio tem apenas algumas poucas cores (Fig. 4, B). Isso significa que o neônio (ou qualquer outro gás com átomos de um só elemento), ao ser transpassado

por uma corrente elétrica ou aquecido até atingir a incandescência, não emite luz em todas as frequências, mas apenas em frequências características, que são diferentes para cada elemento (Fig. 5). Como o espectro de emissão/absorção de cada elemento possui um padrão único, podemos utilizar os espectros de emissão/absorção de uma substância para identificar e quantificar os diferentes elementos químicos nela presentes, como se fosse uma impressão digital do elemento (Fig. 5).

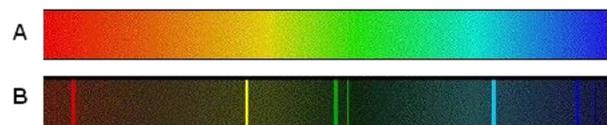


Figura 4 - A) Espectro contínuo. B) Espectro de emissão. Adaptado. Fonte: Ref. [13].

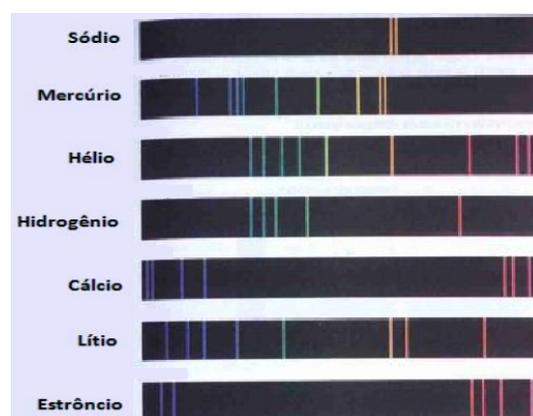


Figura 5 - Espectros de emissão de diversos elementos. Figura adaptada. Fonte: Ref. [14].

O espectro de absorção é obtido quando o espectro contínuo de luz atravessa uma substância. Neste caso, duas coisas podem acontecer em maior ou menor proporção: a luz pode atravessar a substância ou a luz pode ser absorvida pela substância. Os átomos e moléculas tendem a absorver radiações eletromagnéticas nas mesmas frequências em que as emitem, de modo que o espectro de absorção é equivalente ao espectro de emissão. Isso acontece porque na absorção ocorre a transição inversa daquela do espectro de emissão (Fig. 6).

De fato, o espectro de absorção de um elemento é o espectro contínuo incidente subtraído do espectro de emissão do elemento (Fig. 7).

Os espectros acima poderiam ser representados num gráfico em preto e branco sem perda de informação, pois o comprimento de onda não é indicado apenas pela cor, mas também pela posição da linha com relação ao eixo das abscissas. A Fig. 8 é um gráfico do espectro de absorção da Fig. 7C.

²Como a luz passa por uma fenda, a imagem dela num anteparo será a imagem da fenda, que é uma linha. Esse aparato formado por fenda e prisma (ou rede de difração) é um espectroscópio.

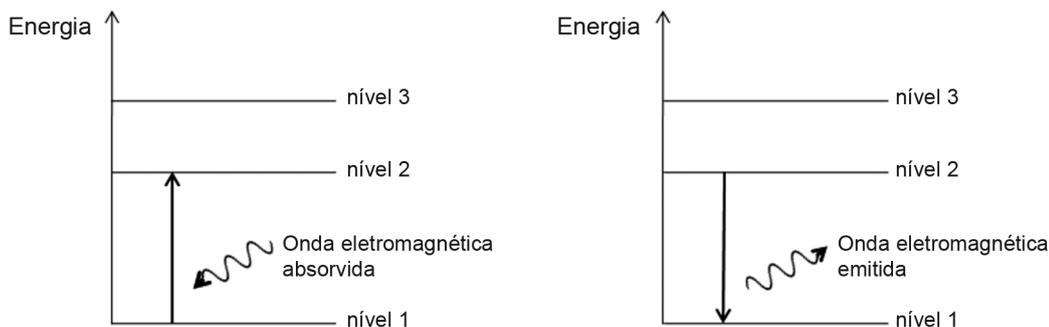


Figura 6 - Diagramas de níveis de energia da matéria ao absorver/emitir uma onda eletromagnética.



Figura 7 - A) Espectro contínuo, produzido por uma fonte que emite luz em todos os comprimentos de onda da faixa a ser analisada, no caso o visível; B) Espectro de emissão do elemento; C) Espectro de absorção do elemento. Figura adaptada. Fonte: Ref. [13].

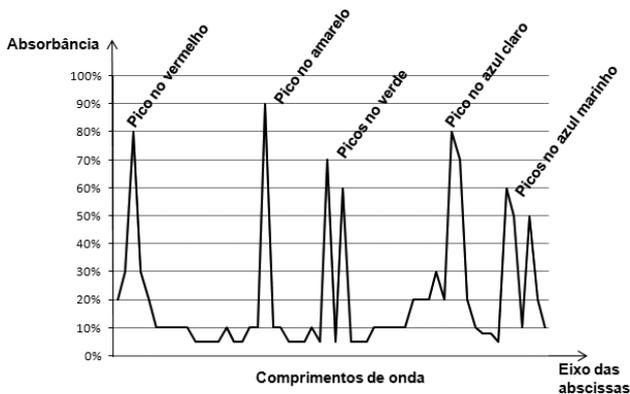


Figura 8 - Espectro de absorção do mesmo elemento da Fig. 7C.

A espectroscopia se desenvolve a partir da simples ideia de que podemos identificar um elemento a partir do seu espectro. Isso pode parecer pouco, mas a identidade é um dos substantivos mais importantes para a humanidade. Não é mera coincidência o fato de o conceito de identidade ser um dos mais fundamentais para a Matemática³ ou o fato da carteira de identidade ser um documento que todo cidadão deve possuir. Os espectros das substâncias nem sempre terão a aparência das Figs. 4, 5 ou 7. Naquelas figuras estão representados espectros de emissão/absorção de luz visível, que são coloridos porque a cor é uma sensação física relacionada com a frequência da onda [15]. Geralmente os espectros obtidos com ondas eletromagnéticas invisíveis

são representados por gráficos em preto e branco, como o da Fig. 9, que representa o espectro de absorção do ácido láctico [5]. Observe as diferentes absorbâncias na Fig. 9, há maior absorção de radiação eletromagnética (picos) para as frequências 1080×10^{11} Hz, 900×10^{11} Hz, 540×10^{11} Hz e 330×10^{11} Hz.

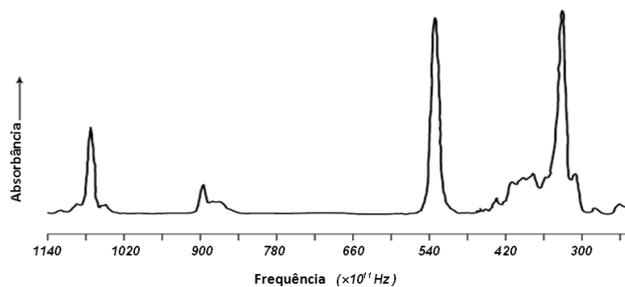


Figura 9 - Espectro de absorção do ácido láctico no infravermelho. A ordenada indica a absorbância, que está relacionada à quantidade de radiação incidente absorvida pela amostra. Figura adaptada. Fonte: Ref. [5, p. 24].

4. A espectroscopia no infravermelho

Imagine que você tenha uma pequena amostra, por exemplo, uma gota de óleo e, por algum motivo especial, queira saber sua composição e estrutura (qual ou quais os elementos que a constituem e como os átomos desses elementos estão ligados). Antes de colocar fogo na amostra para tentar produzir um espectro de emissão, que tal fazer incidir um feixe de luz infravermelha sobre ela para determinar quais frequências atravessam e quais frequências são absorvidas pela amostra? Caso ateuasse fogo na gota de óleo, você a destruiria e perderia a chance de obter mais informações sobre sua constituição com outras técnicas espectroscópicas, utilizando ondas eletromagnéticas das várias frequências indicadas na Fig. 1. Se esse experimento, por algum motivo qualquer, desse erro ou fosse inconclusivo, não seria possível reproduzi-lo novamente, pois sua única gota de óleo teria sido destruída. Este é um exemplo que ilustra a vantagem de se obter um espectro de absorção e de que é preciso cuidado quando se inves-

³Uma equação nada mais é do que uma relação de igualdade, isto é, uma relação de identidade.

tiga qualquer substância, principalmente se a quantidade disponível desse material for limitada.

A espectroscopia no infravermelho produz espectros de absorção (e/ou transmissão) conforme sugerido no exemplo da gota de óleo: fazendo um feixe de luz na região do infravermelho incidir sobre a substância e determinando as frequências absorvidas por ela. Nunca é demais enfatizar que se mede diretamente o quanto de cada comprimento de onda (ou frequência) da radiação eletromagnética incidente é absorvido (ou transmitido). Além de líquidos, como a gota de óleo, a espectroscopia no infravermelho pode ser utilizada para examinar gases como, por exemplo, a atmosfera de planetas (Fig. 10).

A forma de pensar o processo de absorção da radiação eletromagnética pela matéria é uma característica essencial da espectroscopia no infravermelho. A compreensão deste processo exige imaginação, analogias e a elaboração de modelos. Por exemplo, imaginamos a matéria como um arranjo de átomos que pode vibrar de algumas maneiras diferentes. Os átomos ligam-se entre si por forças de origem eletromagnética que são similares às forças de molas que ligam dois objetos macroscópicos. Uma mola pode ser deformada e solta, fazendo com que dois objetos por ela conectados vibrem. Experiências com blocos e molas são acessíveis e é possível fazer medidas diretas das massas dos blocos, da constante elástica da mola e da frequência de vibração. A frequência (f) dessa vibração depende basicamente das massas (m_1 e m_2) dos dois blocos e da constante elástica da mola (k) de acordo com a relação

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}}. \quad (2)$$

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{5,0 \times 10^2 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-2} (20 \times 10^{-27} \text{ kg} + 1,6 \times 10^{-27} \text{ kg})}{20 \times 10^{-27} \text{ kg} \cdot 1,6 \times 10^{-27} \text{ kg}}}$$

$$f \cong 9,3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} \cong 9,3 \times 10^{13} \text{ Hz}.$$

Uma outra grandeza muito utilizada em espectroscopia é o número de onda ($\bar{\nu}$), que nada mais é do que o inverso do comprimento de onda (ou a frequência da onda dividida pela velocidade da luz no vácuo), geralmente indicado em unidades de cm^{-1}

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{f}{c} \quad (3)$$

Se convertermos a frequência obtida acima para número de onda, vemos que ligações simples entre carbono e hidrogênio (C-H) vibram com frequência aproximada de $9,3 \times 10^{13}$ Hz, ou com número de onda de aproximadamente 3100 cm^{-1} . Note, por exemplo, o

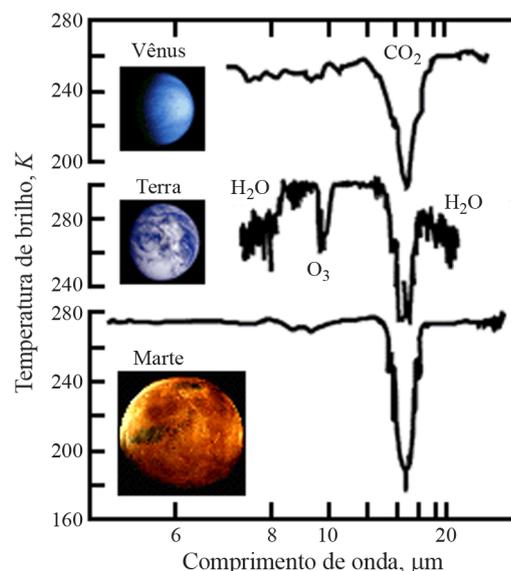


Figura 10 - Espectros de transmitância no infravermelho das atmosferas de Vênus, da Terra e de Marte. Picos no gráfico indicam a presença de substâncias, como gás carbônico, ozônio e água na atmosfera da Terra. Os espectros de Vênus e Marte indicam a presença de gás carbônico nas atmosferas daqueles planetas. Fonte: Ref. [16].

Os átomos também vibram com uma frequência que depende basicamente das massas dos átomos e das forças elétricas que os ligam, obedecendo com boa precisão à mesma equação acima para o caso de moléculas diatômicas [17]. Neste caso, a constante k é um fator relacionado à força da ligação interatômica. Como exemplo, podemos calcular a frequência de vibração da ligação simples entre átomos de carbono e hidrogênio (C-H) considerando $k = 500 \text{ N.m}^{-1} = 500 \text{ kg.s}^{-2}$, $m_{\text{carbono}} = 20 \times 10^{-27} \text{ kg}$ e $m_{\text{hidrogênio}} = 1,6 \times 10^{-27} \text{ kg}$

pico em aproximadamente $9,0 \times 10^{13}$ Hz na Fig. 9, ou o pico intenso próximo de 2900 cm^{-1} na Fig. 11. Eles são devido às vibrações C-H nos respectivos materiais. As diferenças entre a frequência (ou número de onda) determinada(o) pelas fórmulas acima e o valor experimental não são devidas, somente, às limitações do modelo aqui utilizado, mas também à vizinhança atômica das ligações C-H encontradas nos compostos analisados, pois os átomos vizinhos à ligação C-H também interferem na intensidade dessa ligação, e conseqüentemente no valor da constante k . Assim, o cálculo apresentado anteriormente é aproximado, e meramente ilustrativo.

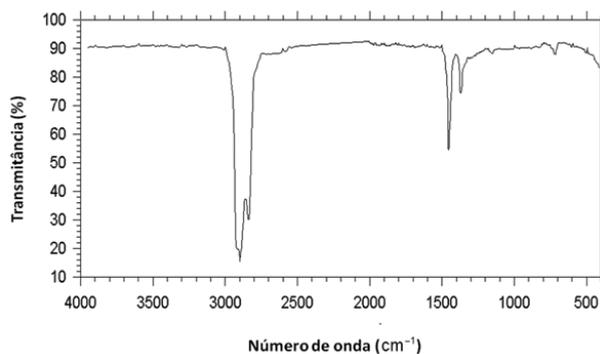


Figura 11 - Espectro do óleo Nujol. Adaptado. Fonte: Ref. [19].

O mais importante é observar que a frequência de vibração deve aumentar com o aumento da constante k (relacionada à força da ligação química) e com a diminuição das massas dos átomos do sistema. Assim, as vibrações das ligações O-H e C-H ocorrem, respectivamente, em frequências maiores do que as vibrações das ligações C-O e C-C porque a massa atômica do hidrogênio é menor do que a massa atômica do carbono.

Deve ser lembrado que, pelo menos com relação aos compostos de carbono, os átomos podem estar ligados por ligações simples, duplas ou triplas. Neste caso, o aumento do número de ligações implica em maiores valores para k e, conseqüentemente, maiores valores para as frequências de vibração. Por exemplo, as vibrações das ligações triplas entre átomos de carbono ($C\equiv C$) ocorrem em frequências aproximadamente três vezes maiores do que a obtida para as vibrações das ligações simples (C-C), enquanto que ligações duplas ($C=C$), por sua vez, vibram com frequências (aproximadamente) duas vezes maiores do que as obtidas para as ligações simples (C-C) [18].

A grande vantagem de descrever a matéria como algo formado por partículas (átomos) que vibram é a associação de frequências naturais de oscilação à mesma, de modo que a matéria passa a ter características comuns às ondas, facilitando a descrição da interação en-

tre radiação e matéria. Aproveitando a ideia de que os átomos vibram, comparemos uma de suas características com algo macroscópico. Pense no som de uma única corda de violão que é posta a vibrar. Sem alterar o comprimento da corda que pode vibrar, exceto por alguns pontos dela que ficarão parados, é possível fazê-la vibrar com frequências distintas e obter sons distintos. Isso só ocorre se os pontos que ficam parados enquanto a corda vibra forem equidistantes, isto é, se a corda for dividida em partes iguais, por exemplo, em duas, três ou quatro partes iguais. A divisão em partes iguais implica na divisão da corda por números inteiros (1, 2, 3, 4, etc). A corda terá então seus modos vibracionais que corresponderão a sons particulares, isto é, um espectro característico de sons (notas musicais) da corda. Apesar de ser bastante diferente de uma corda, diz-se que o conjunto de átomos de uma substância também tem seus modos naturais de vibração característicos, que podem ser determinados observando-se o espectro da substância no infravermelho.

Talvez o leitor esteja se perguntando o que a descrição feita aqui sobre a estrutura atômica tem a ver com as frequências da radiação eletromagnética que são ou não absorvidas pela matéria. Tomemos então mais um exemplo do mundo macroscópico. Se uma onda sonora incide sobre um objeto cuja frequência natural de vibração é igual à frequência da onda sonora, então esse objeto passa a vibrar com a mesma frequência da onda sonora. Esse fenômeno, chamado de ressonância, pode ser usado, por exemplo, para afinar instrumentos musicais. Não se pode dizer que isso é o mesmo que ocorre quando a luz infravermelha incide sobre um material, mas é algo muito parecido. A semelhança reside no fato de que a frequência da luz incidente no material tem que ter valores específicos para produzir algum efeito, que é ser absorvida e fazer com que os arranjos atômicos vibrem com maior amplitude. Quando isso ocorre, a luz infravermelha é absorvida pelo material, e também dizemos que há ressonância, assim como representado na Fig. 12.

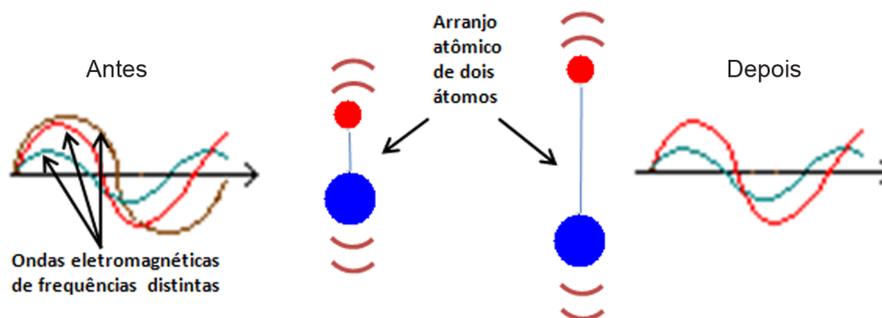


Figura 12 - Representação da interação entre ondas eletromagnéticas e matéria. Neste esquema, ondas eletromagnéticas de três frequências distintas atingem um arranjo atômico de dois átomos. Apenas a onda eletromagnética cuja frequência está representada pela cor marrom é absorvida pelo arranjo atômico, que passa a vibrar com maior amplitude. Figura adaptada. Fonte: [20].

Cada molécula possui suas próprias frequências naturais de vibração, absorvendo ondas eletromagnéticas de frequências específicas e gerando um espectro de absorção característico, justamente quando ocorre a ressonância entre a frequência da radiação infravermelha incidente e as frequências naturais de vibração do material. Assim sendo, é muito fácil distinguir e/ou identificar o espectro de moléculas diferentes como, por exemplo, a água (H_2O), o gás carbônico (CO_2) e a glicose ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$).

A Fig. 11 mostra o espectro de um óleo mineral conhecido como Nujol, nome comercial de uma longa cadeia de alcano. No eixo das ordenadas, a grandeza medida é a porcentagem de luz incidente que atravessa uma determinada quantidade do óleo, a transmitância. No eixo das abscissas, a grandeza medida é o número de onda.

Se obtivéssemos o espectro de transmitância de outros hidrocarbonetos, observaríamos algumas absorções em regiões similares (mas não exatamente nas mesmas posições ou com a mesma intensidade), isto é, os gráficos seriam parecidos, com picos entre 2800 e 3300 cm^{-1} e picos entre 1000 e 1700 cm^{-1} . Essas absorções características são conhecidas como frequências de grupo e fornecem um dos métodos mais seguros para se obter informações estruturais a partir da análise vibracional. De modo simples, o método se baseia na ideia de que pequenos grupos de átomos vibram com certa independência no material [21]. Assim, por exemplo, a forte absorção em 2925 e 2855 cm^{-1} (aproximadamente $8,8 \times 10^{13}\text{ Hz}$) corresponde a vibrações de ligações C-H e a média absorção em 1462 cm^{-1} (aproximadamente $4,4 \times 10^{13}\text{ Hz}$) corresponde a vibrações de ligações C-C.

Mas, por que utilizar a luz no infravermelho se não somos capazes de enxergá-la? Nós não somos, mas existem materiais que são apropriadamente sensíveis a ela. E esses materiais podem ser utilizados num circuito elétrico de tal modo que, quando recebem radiação no infravermelho, enviam sinais elétricos para um computador. O computador com o software adequado produz um gráfico inteligível para que possamos interpretar os sinais emitidos pelo sensor. A luz no infravermelho possui frequências e energias relativamente baixas, que não são suficientes para arrancar ou mudar a configuração de elétrons em moléculas. A baixa energia das radiações no infravermelho modifica apenas as vibrações ou rotações das moléculas.

Outras técnicas espectroscópicas, que utilizam radiações eletromagnéticas em outras faixas de frequência, também podem examinar a matéria. Raios X, por exemplo, podem fornecer informações sobre a composição química e estrutura amorfa (desordenada) ou cristalina (ordenada) dos materiais, enquanto que as radiações visível e ultravioleta podem alterar as configurações eletrônicas de substâncias, permitindo também a obtenção de espectros e, conseqüentemente,

informações. Radiações de frequências mais baixas, como ondas de rádio, não são capazes de alterar a vibração de moléculas, mas podem atuar sobre o núcleo atômico, permitindo a obtenção de informações a seu respeito (este é o princípio da técnica de Imagem por Ressonância Magnética, muito utilizada em medicina). Isso significa que olhar a matéria com os diversos tipos de ondas eletromagnéticas nos permite literalmente observá-la de maneira mais completa, obtendo informações que jamais poderiam ser conseguidas apenas com nossos sentidos comuns e imaginação.



Figura 13 - Espectrômetro para obtenção de espectros no infravermelho instalado no Instituto de Física/UFMT.

A partir da espectroscopia no infravermelho, outros temas podem interessar aos alunos e professores, como a ciência forense, os raios X, a estrutura da matéria, etc. Finalmente, considerando a quantidade de informações e as possibilidades de desdobramento deste texto, seja com a realização de experimentos, leituras extras, visitas a exposições e centros tecnocientíficos, pesquisa de material bibliográfico e outras atividades, sugerimos a leitura e utilização do mapa conceitual (disponível em <http://www.sbfisica.org.br/rbef/indice1.php?vol=34&num=2>), cuja função é sintetizar e organizar as principais ideias aqui apresentadas, complementando o trabalho do professor, ou subsidiando uma melhor compreensão do aluno.

Glossário

Absorbância: quantidade relacionada à porcentagem da luz incidente absorvida ou transmitida por uma substância.

Angström: unidade de medida de comprimento cujo símbolo é Å ($1\text{ Å} = 10^{-10}\text{ m} = 0,000000001$ metro).

Aprendizagem significativa: é a aprendizagem que ocorre quando uma nova informação adquire significados para o aprendiz através de uma espécie de ancoragem na sua estrutura de conhecimentos, com determinado grau de clareza, estabilidade e diferenciação.

Balança hidrostática: balança que permite a pesagem sob líquidos e com a qual é possível medir a massa específica de um objeto através do princípio de Arquimedes.

Comprimento de onda: distância entre cristas, vales ou partes idênticas sucessivas de uma onda.

Dipolo elétrico: molécula, ligação química ou arranjo atômico que possui dois pólos de cargas opostas.

Empírico: baseado na experiência.

Empuxo: é a força vertical resultante para cima que um fluido exerce sobre um objeto imerso nele.

Espectro de absorção: espectro contínuo, como o gerado pela luz branca, interrompido por linhas ou bandas escuras resultantes da absorção dessas frequências por determinada substância.

Espectro de emissão: distribuição de comprimentos de onda da luz emitida por uma fonte luminosa.

Espectro eletromagnético: conjunto de ondas eletromagnéticas de todas as frequências possíveis.

Espectro: distribuição de comprimentos de onda (ou frequências ou números de onda) de radiação.

Espectrômetro: um instrumento óptico que separa a radiação em suas componentes de frequência ou comprimentos de onda. Essa separação costuma ser em linhas espectrais ou em gráficos cuja intensidade da radiação é indicada na ordenada e o número de onda na abscissa.

Espectroscopia: conjunto de técnicas de análise qualitativa baseado na observação de espectros de substâncias.

Espectroscópio: instrumento óptico que separa a luz em suas componentes de frequência ou comprimentos de onda, na forma de linhas espectrais, permitindo sua simples visualização.

Frequência natural de vibração: frequência com a qual um objeto elástico vibra espontaneamente após ser perturbado.

Frequência: número de vibrações por intervalo de tempo.

Massa específica: é a massa por unidade de volume de uma substância. Em geral, qualquer quantidade por unidade de volume.

Meio material: Neste contexto, pode ser definido simplesmente como um meio que não seja o vácuo: sólidos, líquidos e gases.

Moléculas diatômicas: moléculas com dois átomos (O_2 , H_2 etc).

Nanometro: unidade de medida cujo símbolo é nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). Equivale a dez vezes um angström.

Número de onda: o inverso do comprimento de onda, que significa o número de comprimentos de onda por unidade de comprimento.

Onda: é a propagação de perturbação oscilante que transporta energia.

Quantizados: com saltos, descontínuos, discretos.

Radiação eletromagnética: transporte de energia através de ondas eletromagnéticas.

Radiação: transporte de energia por meio de ondas eletromagnéticas e/ou partículas elementares (que incluem as radiações ejetadas por núcleos atômicos).

Rede de difração: série de fendas ou sulcos paralelos muito próximos entre si, usada para decompor as cores da luz por meio de interferência.

Refração: mudança na velocidade de propagação da luz na interface entre dois meios transparentes, que acarreta o desvio do feixe de luz quando a incidência deste não for perpendicular à interface.

Transmitância: porcentagem da luz incidente que atravessa a substância.

Referências

- [1] M.A. Moreira, *Aprendizagem Significativa: A Teoria de David Ausubel* (Editora Moraes, São Paulo, 1982).
- [2] <http://www.periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/viewFile/6769/6238>.
- [3] <http://www.las.inpe.br/~cesar/Infrared/detector/detectores.pdf>.
- [4] J.M. Chalmers and P.R. Griffiths, *Handbook of Vibrational Spectroscopy* (John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2002).
- [5] B. Stuart, *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications* (John Wiley & Sons, Nova Iorque, 2004).
- [6] http://www.spq.pt/boletim/docs/BoletimSPQ_088_073_09.pdf.
- [7] P.G. Hewitt, *Física Conceitual* (Bookman, Porto Alegre, 2002), 9ª ed.
- [8] <http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/snef/xviii/sys/resumos/T0367-1.pdf>.
- [9] R. Raghavachari, *Near Infrared Application in Biotechnology* (Marcel Dekker, New York, 2001).
- [10] <http://profs.ccems.pt/PauloPortugal/CHYMICA/REM/REM.html>.
- [11] <http://www.brynmawr.edu/Acads/Chem/mmerzsto/Infrared.jpg>.
- [12] http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/05/H20_molecule_scheme_of_dipole.png.
- [13] <http://portaldoprofessor.mec.gov.br/storage/discovirtual/galerias/imagem/0000000677/0000006730.jpg>.
- [14] <http://tadeununessouza.blog.terra.com.br/category/atividades-do-3%C2%BA-ano-de-fisica-ens-medio>.
- [15] <http://www.sbfisica.org.br/fne/Vol18/Num1/v08n01a06.pdf>.
- [16] http://www.oal.ul.pt/observatorio/vol16/n7/vol16n09_2.html.
- [17] H.M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica - V. 2* (Edgard Blücher, São Paulo, 1981), 3ª ed.
- [18] T.D.W. Claridge e L.M. Harwood, *Introduction to Organic Spectroscopy* (Oxford University Press Inc., New York, 2005).
- [19] <http://www.umsl.edu/~orglab/documents/irspectra/IRSPEC2.html>.
- [20] <http://seara.ufc.br/especiais/fisica/raman/raman3.htm>.
- [21] A.K. Brisdon, *Inorganic Spectroscopy Methods* (Oxford University Press Inc., New York, 2004).