



Espectroscopia experimental e teórica do ácido acético

¹Luciano do Santos Almeida

1-Mestrando Ciência e Engenharia de Materiais

e-mail: lucianoalmeida@unipampa.edu.br

²Dr. Eduardo Ceretta Moreira

2- Docente da Universidade Federal do Pampa

Bagé-Rio Grande do Sul

³Henrique Castro Silva Junior

3- Doutorando Departamento de Química Inorgânica

Universidade Federal Fluminense

Espectroscopia descreve as correlações entre ondas eletromagnéticas e moléculas de um material. Em outras palavras, é a ciência que trata das interações dos mais diversos tipos de radiação com a matéria e outras formas de energia, incluindo ondas acústicas e feixes de partículas como íons e elétrons. O emprego desta técnica proporciona um instrumento eficaz e qualificado para determinar as estruturas atômicas e moleculares da matéria, representando a “identidade” molecular de uma substância qualquer. A aplicação de técnicas espectroscópicas abrange uma série de propósitos como nas esferas biomédicas, ambiental, física, química, mineralogia, análises forenses entre outros. Dentre os métodos espectroscópicos destacamos o UV-vis, que se fundamenta pela absorção da radiação eletromagnética nas regiões visível e ultravioleta do espectro e Raman, que consiste na análise da luz dispersada pelo material, quando este sofre irradiação por uma luz monocromática. Na perspectiva de tais técnicas e com o significativo avanço tecnológico, os trabalhos experimentais contam com suporte adicional de cálculos teóricos que possibilitam a comparação e previsão dos dados teóricos e experimentais. Nesse contexto, a química computacional se utiliza das leis da física clássica (mecânica molecular) para aproximar as propriedades e estruturas moleculares e a mecânica quântica na razão das estruturas eletrônicas, empregando métodos teóricos a fim de resolver aproximadamente a equação de Schrödinger. A aplicação de técnicas espectroscópicas experimentais pode ser incrementada com o emprego de cálculos teóricos no qual constitui um instrumento altamente qualificado e confiável. Sob essa ótica, o presente estudo propôs a correlação entre os espectros vibracionais experimentais e teóricos das técnicas de absorção Uv-vis, e espectroscopia Raman do ácido acético. Esta molécula foi escolhida pois apresenta estrutura molecular simples, não requer tempos de cálculos teóricos muito longos e apresentam sinal de absorção e espectro Raman, sendo assim um bom exemplo para demonstrar a potencialidade da interpretação dos resultados experimentais por meio dos cálculos teóricos. Neste trabalho foi utilizado o reagente analítico ácido acético grau espectroscópico, 99,5%, CH₃COOH, peso molecular 60,05 g/mol CAS 64-19-7. A parte experimental foi realizada no Laboratório de Espectroscopia da Universidade Federal do Pampa, Campus Bagé, utilizando os instrumentos UV-1800 da Shimadzu, detector de fotodiodo de silício, fonte deutério-tungstênio halogênio, feixe tipo dobro, comprimento de onda mínimo 190 nm e máximo 1.100nm, para espectros Uv-vis. Os espectros Raman foram obtidos através do espectrômetro Bruker MultiRam, com detector de germânio resfriado a nitrogênio líquido a faixa de excitação de 1064 nm, Faixa de varredura 600 a 4000 cm⁻¹, resolução de 4 cm⁻¹, potencia do laser Nd: YAG de 300mW. Os cálculos teóricos foram

conduzidos a partir do software ORCA 4.2.1, utilizando método DFT, com funcional B3LYP e como função de base Def2-Tzvp. A análise do ultravioleta, do ácido acético, em seu espectro experimental, exibiu pico de absorbância na faixa de 203 nm que provavelmente remete a ligação C=O, em decorrência das ligações entre o ácido acético e moléculas de água envolvendo hidrogênios. Os cálculos teóricos apresentaram absorbância na faixa de 74 e 215 nm. A faixa de 215 nm se harmoniza satisfatoriamente com o pico 203nm do espectro experimental, contudo, o espectro apresentando o valor de 74 nm, denotou discutível disparidade, recomendando para trabalhos futuros uma possível substituição na função de base para um cálculo mais apurado. Com base nos dados apresentados dos espectros Raman experimental e teórico, foi possível obter um total de 21 contribuições “mais expressivas” sendo 11 bandas no experimental e 10 no teórico. A comparação dos espectros teórico e experimental resultou em uma equivalência em 9 contribuições. De acordo com a análise dos resultados, os cálculos teóricos elucidaram as contribuições espectrais obtidos nos experimentos. Desse modo, foi possível demonstrar que resultados experimentais podem ser interpretados de uma forma mais dinâmica, com uma maior profundidade nos aspectos físico-químicos, resultando em análises com maior assertividade.

Agradecimentos: Universidade Federal do Pampa, Campus Bagé-RS

Palavras-chave: Espectroscopia Uv-vis; Raman; Cálculos teóricos.