espectroFTIR

RELATÓRIO DE ANÁLISE ESPECTROSCÓPICA (FTIR)

RESUMO

Este relatório apresenta a análise por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) da amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo), realizada pelo espectroFTIR a partir de dados numéricos do espectro. As bandas de absorção foram detectadas por proeminência e atribuídas a grupos funcionais por faixas gerais da literatura. Foram detectadas 8 bandas, de 879 a 3318 cm^{-1}. 8 foram avaliadas quanto à confiança (8 altas, 0 médias e 0 baixas). O conjunto de bandas é compatível com a classe álcoois alifáticos (ν O–H largo, ν C–H alifático nítido e ν C–O em ~1000–1090 cm^{-1}, poucas bandas C–O). Não houve comparação com espectros de referência. A adequação dos dados foi classificada como boa.

Palavras-chave: FTIR. Espectroscopia no infravermelho. Atribuição de bandas. Qualidade do espectro. Álcoois alifáticos.

1 INTRODUÇÃO

O presente relatório apresenta os resultados da análise por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) da amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo). O objetivo é descrever as bandas de absorção observadas, sugerir suas atribuições vibracionais a grupos funcionais e classes de compostos e, quando há espectros de referência, medir a semelhança entre a amostra e esses padrões.

A análise foi realizada de forma automatizada pelo espectroFTIR 2026.10 (ARIS ea9e2970), a partir de dados numéricos do espectro, em 13 de novembro de 2026. A seção 2 descreve a amostra, o equipamento e o tratamento dos dados; a seção 3 reúne os resultados e a discussão; e a seção 4 traz a conclusão. A rastreabilidade do processamento consta no Apêndice A.

2 MATERIAL E MÉTODOS

2.1 Identificação da amostra

O Quadro 1 identifica a amostra e o arquivo analisado, com a origem de cada informação.

Campo	Informação	Origem
Amostra / item	Etanol desnaturado, líquido (exemplo)	Usuário
Demanda / projeto	não informado	Usuário
Data da análise	05/10/2026	Usuário
Arquivo do espectro	Branco_EtOH.csv	Arquivo

Quadro 1 – Identificação da amostra

Fonte: dados informados pelo usuário e lidos do arquivo enviado; espectroFTIR (2026).

Origem: Usuário = informado por você, sem verificação da plataforma; Arquivo = lido do arquivo enviado; Algoritmo = calculado pelo espectroFTIR.

2.2 Equipamento e condições de aquisição

As condições de aquisição do espectro constam no Quadro 2.

Campo	Informação	Origem
Equipamento	Espectrômetro Espectrofotômetro FTIR	Usuário
Técnica de amostragem	ATR com cristal de diamante	Usuário
Faixa espectral	4000 a 650 cm^{-1}	Usuário
Varreduras / resolução	16 varreduras / 4 cm^{-1}	Usuário
Software de aquisição	não informado	Usuário
Qualificação do instrumento (OVP)	Não informada	Usuário

Quadro 2 – Equipamento e condições de aquisição

Fonte: dados informados pelo usuário.

2.3 Tratamento dos dados e detecção das bandas

O espectro foi avaliado a partir dos dados numéricos exportados. As bandas de absorção foram detectadas automaticamente, por rotina computacional, por proeminência, com limiar mínimo de 3,0% da altura do gráfico e piso adaptativo de 6 vezes o ruído estimado no próprio espectro (0,11%), com distância mínima de 12 cm^{-1} entre bandas.

A atribuição vibracional usa faixas gerais de grupos funcionais da literatura (PAVIA et al., 2010), reunidas no banco de dados interno do software (ESPECTROFTIR, 2026a), com tolerância de posição de ±4 cm^{-1} (parâmetro do software, a ser confrontado com a exatidão de número de onda do instrumento utilizado). A intensidade relativa à banda mais proeminente do espectro (muito forte > 90%; forte 70–90%; média 40–70%; fraca a média 25–40%; fraca 10–25%; muito fraca < 10%).

2.4 Adequação dos dados

A adequação dos dados espectrais foi classificada como boa. O Quadro 3 reúne os itens avaliados.

Item	Avaliação	Origem
Origem dos dados	dados numéricos do espectro	Arquivo
Faixa espectral	648 a 3998 cm^{-1}; regiões cobertas: 4000–2500, 2500–1800, 1800–1500, 1500–650	Arquivo
Passo de amostragem	2,06 cm^{-1}	Arquivo
Ruído (estimativa)	0,11% da altura do espectro (MAD do resíduo da média móvel)	Algoritmo
Grandeza espectral	transmitância, informada pelo usuário	Usuário
Pré-processamento	média móvel de 3 pontos aplicada somente à detecção das bandas; o traço original é preservado; sem correção de linha de base nem normalização no espectro exibido	Algoritmo
Resolução instrumental (informada)	4 cm^{-1} (declarada pelo usuário, não verificada)	Usuário
Bandas próximas ao limiar de detecção	~805 cm^{-1} (entre 60% e 100% do limiar de detecção; não entram nas tabelas de bandas; conferir no espectro)	Algoritmo
Linha de base (estimativa)	nível ≈ 6,9% da altura em 2600–2000 cm^{-1}; diferença de ≈ 0,9% entre 4000–3800 e 2600–2000 cm^{-1}; sem correção de linha de base	Algoritmo
Saturação / corte do sinal	sem sinais evidentes	Algoritmo
Amplitude absoluta	banda mais funda com 57,8 %T (absorbância ≈ 0,375): forte (a partir de 15 %T)	Algoritmo
Inclinação da linha de base, absoluta	8,0 %T entre 4000 e 600 cm^{-1}, cerca de 0,1 vez a banda mais funda: baixa	Algoritmo

Item	Avaliação	Origem
Ruído por região	3600–3000 cm^{-1}: 0,015 a 0,028 %T (região limpa)	Algoritmo
Zonas de baixa confiança	nenhuma	Algoritmo
CO_2 e vapor d'água	sem bandas claras de CO_2; sem linhas de vapor d'água	Algoritmo
Confiança das bandas	8 altas, 0 médias e 0 baixas (profundidade a partir da linha de base; critério provisório)	Algoritmo

Quadro 3 – Adequação dos dados espectrais

Fonte: espectroFTIR (2026b).

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Espectro

A Figura 1 mostra o espectro enviado, com linhas verticais nos picos detectados e as faixas de grupos funcionais. Foram detectadas 8 bandas, de 879 a 3318 cm^{-1}. A Figura 2 repete o espectro com as bandas numeradas (os números da Tabela 3) e as zonas de baixa confiança sombreadas; a Figura 3 amplia a região de impressão digital.

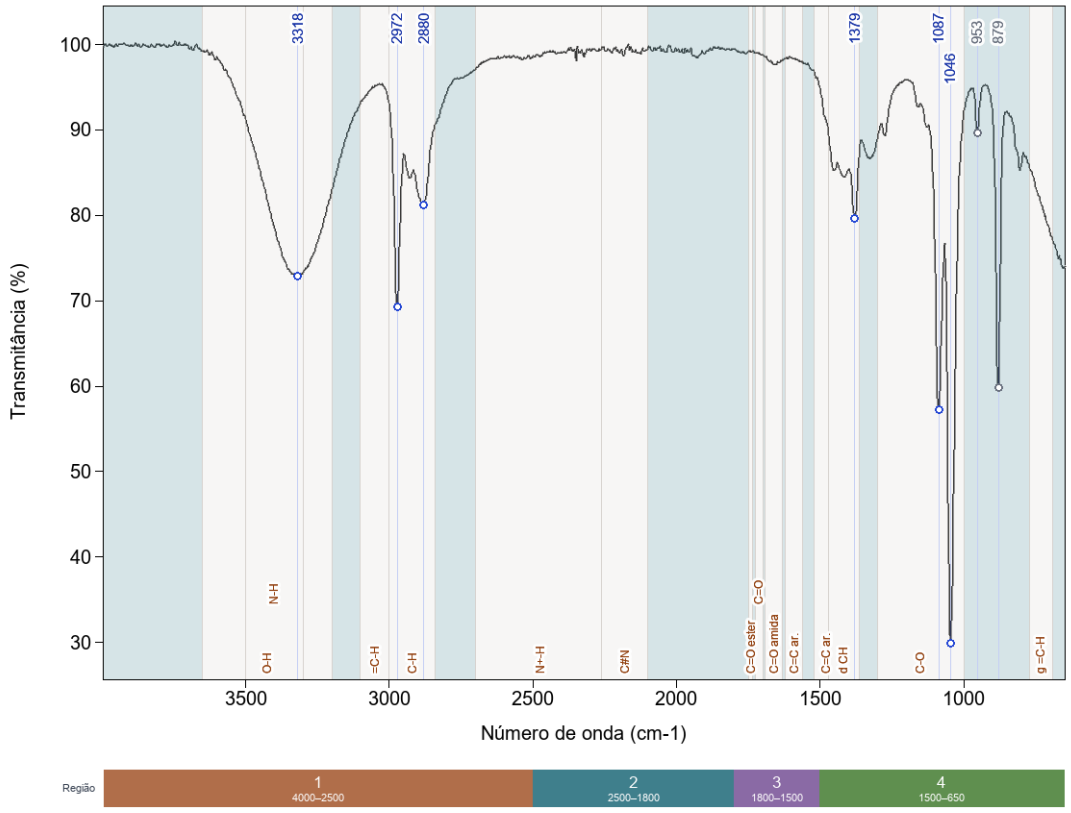


Figura 1 – Espectro FTIR com linhas verticais nos picos detectados e faixas de grupos funcionais; a faixa inferior numera as regiões 1 a 4 da Tabela 2; rótulos em cinza indicam bandas sem faixa correspondente na tabela geral

Fonte: espectroFTIR (2026b), a partir do espectro da amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo).

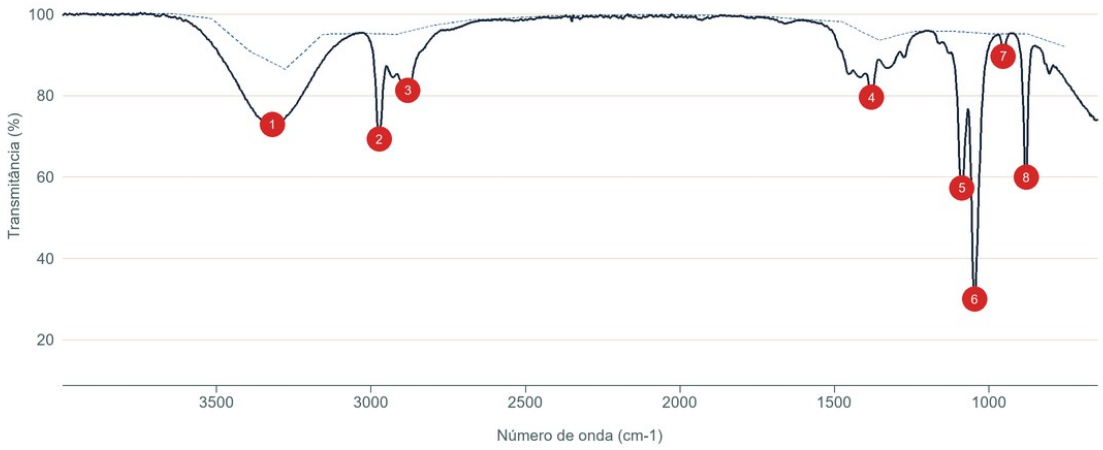


Figura 2 – Espectro com as bandas numeradas (mesmos números da Tabela 3); vermelho: confiança alta ou média; cinza: baixa; tracejado: linha de base estimada; faixas em laranja: zonas de baixa confiança

Fonte: espectroFTIR (2026b), a partir do espectro da amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo).

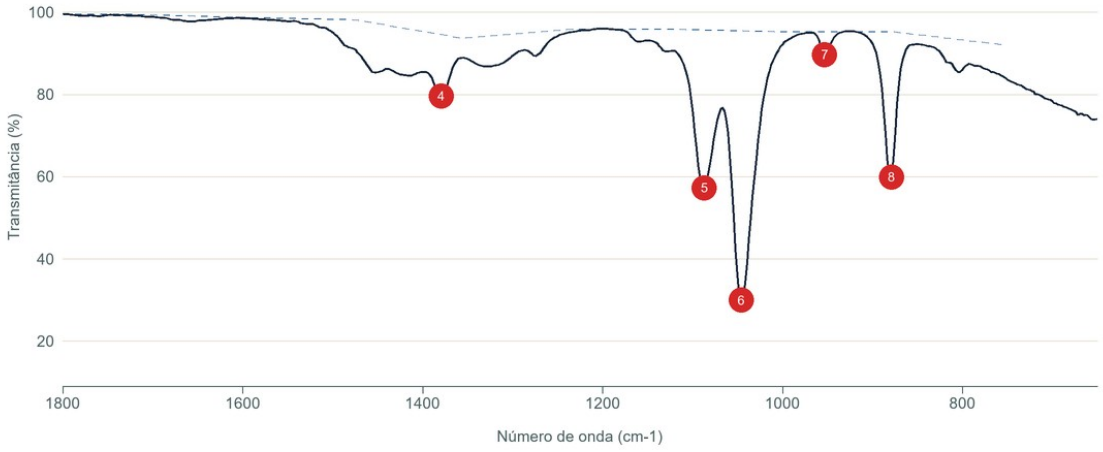


Figura 3 – Região de impressão digital (1800 a 650 cm^{-1}) com as bandas numeradas da Tabela 3

Fonte: espectroFTIR (2026b), a partir do espectro da amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo).

3.2 Bandas de absorção observadas

A Tabela 1 lista as bandas observadas, com posição, intensidade relativa, largura e a atribuição principal sugerida, além das alternativas possíveis e das bandas de apoio.

Posição (cm^{-1})	Intensidade	Largura (cm^{-1})	Atribuição principal	Alternativas possíveis	Bandas de apoio
3318 ± 2	Fraca a média	larga (~251)	ν O–H: Hidroxila de álcool (O–H ligado por hidrogênio)	—	~1046 (ν C–O)
2972 ± 2	Média	média (~31)	ν C–H alifático: Cadeia carbônica	—	~1379 (δ CH_2 / CH_3)
2880 ± 2	Muito fraca	média (~41)	ν C–H alifático: Cadeia carbônica	—	~1379 (δ CH_2 / CH_3)

Posição (cm^{-1})	Intensidade	Largura (cm^{-1})	Atribuição principal	Alternativas possíveis	Bandas de apoio
1379 ± 2	Fraca	média (~101)	δ CH_2 / CH_3: Cadeia carbônica	—	~2972 (ν C–H)
1087 ± 2	Fraca a média	estreita (~21)	ν C–O: Álcool alifático (C–O de álcool)	—	~3318 (ν O–H)
1046 ± 2	Muito forte	estreita (~29)	ν C–O: Álcool alifático (C–O de álcool)	—	~3318 (ν O–H)
953 ± 2	Muito fraca	estreita (~14)	— (sem faixa na tabela geral)	—	—
879 ± 2	Média	estreita (~16)	— (sem faixa na tabela geral)	—	—

Tabela 1 – Bandas espectrais observadas na amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo)

Fonte: espectroFTIR (2026b).

A incerteza (±) é a de amostragem dos dados (passo de número de onda), não a exatidão de número de onda do instrumento. As bandas de apoio são outras bandas detectadas que costumam acompanhar a atribuição principal; sua ausência enfraquece, mas não exclui, a atribuição.

A Tabela 2 resume as bandas detectadas por região espectral, inclusive as regiões em que nenhuma banda foi detectada e as bandas sem faixa correspondente na tabela geral de grupos funcionais. As regiões 1 a 4 são as mesmas numeradas e coloridas na Figura 1.

N°	Região (cm^{-1})	Bandas detectadas	Com faixa correspondente	Sem faixa correspondente	Observação
1	4000–2500	3	3	0	todas com faixa correspondente
2	2500–1800	0	0	0	nenhuma banda detectada nesta região
3	1800–1500	0	0	0	nenhuma banda detectada nesta região
4	1500–650	5	3	2	sem faixa correspondente: ~953, ~879

Tabela 2 – Bandas detectadas por região espectral na amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo)

Fonte: espectroFTIR (2026b).

A Tabela 3 mostra, para cada banda fora das zonas de baixa confiança, a profundidade medida a partir da linha de base, a confiança e a leitura geral; os números são os da Figura 2.

N°	Posição (cm^{-1})	Profundidade (%T)	Confiança	Leitura geral (sem vínculo com substância)
1	~3318	15,23	Alta	ν O–H: Hidroxila de álcool (O–H ligado por hidrogênio)
2	~2972	22,06	Alta	ν C–H alifático: Cadeia carbônica
3	~2880	14,23	Alta	ν C–H alifático: Cadeia carbônica
4	~1379	13,32	Alta	δ CH_2 / CH_3: Cadeia carbônica
5	~1087	34,38	Alta	ν C–O: Álcool alifático (C–O de álcool)
6	~1046	57,84	Alta	ν C–O: Álcool alifático (C–O de álcool)
7	~953	3,61	Alta	sem faixa na tabela geral
8	~879	25,77	Alta	sem faixa na tabela geral

Tabela 3 – Profundidade e confiança das bandas observadas na amostra Etanol desnaturado, líquido (exemplo)

Fonte: espectroFTIR (2026b).

Critério de confiança (provisório): alta = profundidade de 0,8 %T ou mais, fora de zona de ruído; média = 0,4 a 0,8 %T; baixa = menos que isso.

3.3 Interpretação espectral por regiões

Para cada região do espectro, apresentam-se o que foi observado (bandas detectadas), a atribuição por faixas gerais de grupos funcionais e a inferência das regras automáticas, que é a parte menos firme e depende do conjunto do espectro.

3.3.1 Região de 4000 a 2500 cm^{-1} (O–H, N–H e C–H)

a) **Observado:** ~3318 (larga, fraca a média); ~2972 (média); ~2880 (muito fraca) cm^{-1};

b) **Atribuição (faixas gerais):** ν O–H (~3318); ν C–H alifático (~2972, ~2880);

c) **Inferência:** Observou-se absorção larga em ~3318 cm^{-1} (ν O–H associado por ligação de hidrogênio), acompanhada de ν C–H alifático nítido e de ν C–O em 1000–1150 cm^{-1}, sem carbonila nem N–H definido: conjunto compatível com álcool alifático; a confirmação depende da região de impressão digital. Há absorção de ν C–H alifático em ~2972 e ~2880 cm^{-1}.

3.3.2 Região de 2500 a 1800 cm^{-1} (ligações triplas e cumulativas)

a) **Observado:** nenhuma banda detectada nesta região;

b) **Atribuição (faixas gerais):** nenhuma banda a atribuir;

c) **Inferência:** Não foi detectada banda atribuível a ν C≡N, ν C≡C ou envelope de N^{+}–H (2500–1800 cm^{-1}), nas condições e na região avaliadas.

3.3.3 Região de 1800 a 1500 cm^{-1} (carbonila e C=C)

a) **Observado:** nenhuma banda detectada nesta região;

b) **Atribuição (faixas gerais):** nenhuma banda a atribuir;

c) **Inferência:** Não foi detectada banda atribuível a ν C=O (carbonila) (1830–1630 cm^{-1}), nas condições e na região avaliadas.

3.3.4 Região de 1500 a 650 cm^{-1} (impressão digital)

a) **Observado:** ~1379 (fraca); ~1087 (fraca a média); ~1046 (muito forte); ~953 (muito fraca); ~879 (média) cm^{-1};

b) **Atribuição (faixas gerais):** δ CH_2 / CH_3 (~1379); ν C–O (~1087, ~1046); sem faixa na tabela geral: ~953, ~879;

c) **Inferência:** Observou-se δ CH_2/CH_3 em ~1379 cm^{-1}. Há bandas de ν C–O / C–O–C em ~1087 e ~1046 cm^{-1}, compatíveis com álcool ou éter (sem carbonila, afasta ácido e éster). A banda de ν C–O mais intensa, em ~1046 cm^{-1}, é típica de álcool primário (primários absorvem perto de 1050, secundários perto de 1100 e terciários perto de 1150 cm^{-1}); junto do O–H largo e sem carbonila, é compatível com álcool alifático simples. Esta é a região de impressão digital: a comparação com um padrão obtido nas mesmas condições é o critério mais forte.

A interpretação acima é gerada automaticamente a partir das posições dos picos detectados (aproximadas; ±4 cm^{-1}, tolerância de atribuição). Descreve o que se observou e o que não se observou, e indica grupos funcionais e classes compatíveis; não identifica substância. A presença ou a ausência de uma banda deve ser avaliada em conjunto com o espectro completo e com padrões obtidos nas mesmas condições.

3.4 Classes de material compatíveis com as bandas

Classes de grupos funcionais compatíveis com as bandas observadas, segundo regras automáticas. Não é identificação de substância: materiais diferentes compartilham as mesmas bandas, e misturas combinam as bandas de seus componentes.

a) **Álcoois alifáticos (v O–H largo, v C–H alifático nítido e v C–O em ~1000–1090 cm^{-1}, poucas bandas C–O)** (por exemplo etanol, metanol, isopropanol e outros álcoois de cadeia curta, e glicóis). Bandas: ~3318; ~2972; ~1087; ~1046 cm^{-1}.

3.5 Qualidade do espectro e orientações para a próxima medição

A qualidade do espectro foi classificada como boa: sinal forte, linha de base estável e ruído baixo. Não são necessários ajustes.

O que já está bom: a região de 3600 a 3000 cm^{-1} saiu limpa, com ruído muito baixo (0,015 a 0,028 %T), e o espectro tem pontos suficientes para registrar bandas largas e estreitas.

4 CONCLUSÃO

Não foi realizada comparação com espectros de referência. O relatório descreve as bandas de absorção observadas e as faixas de grupos funcionais compatíveis. Para comparar com padrões, envie uma biblioteca de referência.

O conjunto de bandas é compatível com a classe álcoois alifáticos (v O–H largo, v C–H alifático nítido e v C–O em ~1000–1090 cm^{-1}, poucas bandas C–O).

REFERÊNCIAS

ESPECTROFTIR. *Banco de dados interno de faixas de absorção no infravermelho (grupos funcionais e materiais comuns)*. Parnaíba: [s. n.], 2026a. Versão do banco: a do software citado em ESPECTROFTIR (2026b). Disponível em: https://espectroftir.com.br/tabela-de-frequencias.html. Acesso em: 13 nov. 2026.

ESPECTROFTIR. *espectroFTIR 2026.10 (ARIS ea9e2970)*. Parnaíba: [s. n.], 2026b. Disponível em: https://espectroftir.com.br. Acesso em: 13 nov. 2026.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. *Introdução à espectroscopia*. Tradução da 4. ed. norte-americana. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

APÊNDICE A – RASTREABILIDADE

O Quadro 4 reúne os dados que permitem reproduzir e verificar este resultado.

ARIS (Algoritmo de Regras para Interpretação de Espectros) é o procedimento do espectroFTIR que detecta as bandas, atribui grupos funcionais por regras e, quando há biblioteca, compara o espectro com os padrões. O código entre parênteses, na linha Software, é o SHA-256 abreviado do código usado nesta análise e identifica a versão do algoritmo.

Item	Descrição	Origem
Software	espectroFTIR 2026.10 (ARIS ea9e2970)	Algoritmo
Parâmetros de detecção	limiar 3,0% da altura do gráfico; piso de 6× o ruído; distância mínima 12 cm^{-1}; suavização de 3 pontos; tolerância de atribuição de faixas ±4 cm^{-1}	Algoritmo
Parâmetros de qualidade (provisórios)	linha de base: média dos 5 menores valores em janelas de 215 cm^{-1} (passo de 120), interpolada; profundidade = diferença para a linha de base, com média móvel de 9 pontos; ruído por janela de 100 cm^{-1} pela segunda diferença (1,4826 × MAD); zona de baixa confiança: janela dominada por ruído, com ruído ≥ 5× o do terço mais quieto e ≥ 10% da amplitude; confiança da banda: alta ≥ 0,8, média ≥ 0,4 %T; amplitude: forte ≥ 15, adequada ≥ 5, fraca ≥ 2 %T	Algoritmo
Arquivo analisado (SHA-256)	0d7d0bd72de911c6aa096c257d6d2be14a8838b43c491914b163551e8c696c90	Arquivo
Emitido em	13/11/2026 01:17:30 (horário do Brasil)	Algoritmo

Quadro 4 – Rastreabilidade do processamento

Fonte: espectroFTIR (2026b).