Roteiro de Leitura de um Espectro FTIR

Interpretar um espectro é raciocinar sobre evidências: cada banda restringe as estruturas compatíveis, e o conjunto, somado ao contexto da amostra e da técnica, sustenta uma hipótese.

1 **Verifique o dado**

Técnica (ATR ou KBr) e eixo Y (%T ou absorbância). Resolução, ruído, linha de base e saturação (absorbância acima de ≈ 1–1,5). CO_2 (≈ 2349 e 667 cm^{-1}) e vapor de água (3900–3500 e 1900–1300 cm^{-1}) não são da amostra.

2 **Observe**

Liste as bandas dominantes com posição, intensidade relativa, largura e forma, sem atribuí-las ainda.

3 **Atribua provisoriamente**

Para cada banda, liste os grupos compatíveis e as alternativas: uma banda larga acima de 3100 cm^{-1} pode ser O–H (álcool, ácido, água) ou N–H.

4 **Procure corroboração**

Cada grupo implica outras bandas. Éster: C=O e duas bandas de C–O. Ácido: O–H larga, C=O e banda perto de 930 cm^{-1}. Amida: amida I, amida II e N–H. Bandas esperadas e não detectadas também contam, como “não detectadas nas condições e na região avaliadas”.

5 **Teste a consistência**

A hipótese explica todas as bandas relevantes? Considere mistura, aditivo, carga e água. Compare com referência medida na mesma técnica; para conclusões fortes, use técnica ortogonal.

As Quatro Regiões do Espectro

4000–2500	**Estiramentos X–H**	O–H livre ≈ 3600; O–H associado 3550–3200 (larga); N–H 3500–3300; C–H aromático ou de alceno > 3000; C–H alifático 2960–2850; aldeído 2820 e 2720
2500–2000	**Triplas e cumulativas**	C≡N 2260–2210; C≡C 2260–2100; azidas, isocianatos e isotiocianatos 2300–2000
2000–1500	**Duplas e N–H**	C=O 1850–1630; C=C 1680–1620; anel aromático ≈ 1600, 1580 e 1500; amida II 1570–1510
1500–650	**Impressão digital**	δ CH_2/CH_3 1470–1370; C–O e C–N 1300–1000; C–H aromático fora do plano 900–690; C–Cl 800–600

Números de onda em cm^{-1}. Faixas aproximadas: variam com a técnica, o estado físico, a matriz e o equipamento. Os limites das regiões são convencionais.

Posição do C=O por Classe

Éster alifático	1750–1735	Éster aromático ou conjugado	1730–1715
Cetona alifática	1725–1705	Cetona conjugada ou aromática	1700–1680
Aldeído	1740–1720	Ácido carboxílico (dímero)	1725–1700
Amida (amida I)	1690–1630	Anidrido	≈ 1820 e ≈ 1760

Valores em cm^{-1}. A posição ajuda a separar classes, mas só com as bandas de apoio (C–O, O–H, N–H, C–H de aldeído). Conjugação e ligação de hidrogênio abaixam a banda; tensão de anel e efeito indutivo a elevam.

Da Observação à Conclusão

Observação	banda forte e estreita em ≈ 1715 cm^{-1}; nada acima de 3100 cm^{-1}
Atribuição	compatível com ν(C=O) de carbonila
Hipótese	sem O–H e N–H, o conjunto sugere cetona ou éster
Conclusão	só com bandas corroborantes, referência e, se preciso, outra técnica

Erros Comuns

- Tratar uma banda isolada como prova de um composto.
- Atribuir bandas de CO_2 e vapor de água à amostra.
- Comparar ATR com biblioteca em KBr sem ressalva (intensidades e posições mudam).
- Interpretar a intensidade relativa de bandas saturadas.
- Ler a ausência de uma banda como prova de que o grupo não existe.
- Usar faixas de tabela como regras rígidas: elas variam com técnica, estado físico e matriz.

Continue na Trilha Aprenda IR

Aulas, guias e ferramentas gratuitas em **espectroftir.com.br**. Envie o seu espectro e veja bandas anotadas, tabela de atribuições e interpretação por regiões. Siga **@espectro.ftir** para as próximas aulas.

Fontes: Silverstein, Webster, Kiemle e Bryce, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 8. ed. (Wiley, 2014); Pavia, Lampman, Kriz e Vyvyan, *Introduction to Spectroscopy*, 5. ed. (Cengage, 2015); Smith, *Infrared Spectral Interpretation* (CRC Press, 1999); Socrates, *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies*, 3. ed. (Wiley, 2001). Material didático original do espectroFTIR; o roteiro apoia a interpretação e não identifica substâncias. Compartilhe citando a fonte.