



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO OESTE DO PARÁ – UFOPA
INSTITUTO DE ENGENHARIA E GEOCIÊNCIAS – IEG
CURSO BACHARELADO INTERDISCIPLINAR EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA – BICTEC**

RONIVALDO LAMEIRA DIAS

**ESPECTROSCOPIA ÓPTICA: ULTRAVIOLETA/VISÍVEL (UV-VIS) E
INFRAVERMELHO MÉDIO (*MIR*) NA CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS DE
ÓLEOS VEGETAIS AMAZÔNICOS.**

Santarém – PA
2023

RONIVALDO LAMEIRA DIAS

**ESPECTROSCOPIA ÓPTICA: ULTRAVIOLETA/VISÍVEL (UV-VIS) E
INFRAVERMELHO MÉDIO (*MIR*) NA CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS DE
ÓLEOS VEGETAIS AMAZÔNICOS.**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA, como
requisito à obtenção do Grau em Bacharelado
Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia.
Orientador: Prof. Dr. Manoel Roberval Pimentel Santos.

Santarém – PA
2023

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema Integrado de Bibliotecas – SIBI/UFOPA

D541e Dias, Ronivaldo Lameira
Espectroscopia óptica: ultravioleta/visível (UV-VIS) e infravermelho médio (MIR)
na caracterização de amostras de óleos vegetais amazônicos./ Ronivaldo Lameira Dias.
- Santarém, 2023.
48 f. : il.
Inclui bibliografias.

Orientador: Manoel Roberval Pimentel Santos.
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Universidade Federal do Oeste do
Pará, Instituto de Engenharia e Geociências, Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e
Tecnologia.

1. Óleos vegetais. 2. Espectroscopia óptica. 3. UV-VIS. 4. MIR I. Santos, Manoel Ro-
berval Pimentel, *orient.* II. Título.

CDD: 23 ed. 633.85

Bibliotecária - Documentalista: Cátia Alvarez – CRB/2 843

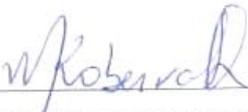
RONIVALDO LAMEIRA DIAS

**ESPECTROSCOPIA ÓPTICA: ULTRAVIOLETA/VISÍVEL (UV-VIS) E
INFRAVERMELHO MÉDIO (MIR) NA CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS DE
ÓLEOS VEGETAIS AMAZÔNICOS.**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA, como
requisito à obtenção do Grau em Bacharelado
Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia.
Orientador: Prof. Dr. Manoel Roberval Pimentel Santos.

Conceito: APROVADO

Data da Aprovação: 14 de Julho de 2023.



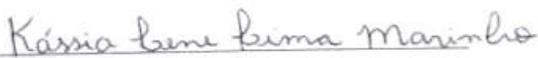
Prof. Dr. Manoel Roberval Pimentel Santos

Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA



Prof. Dr. Nelson de Souza Amorim

Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA



Prof. Me KASSIA LENE LIMA MARINHO

Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA

Santarém – PA
2023

DEDICATÓRIA

Aos meus Filhos!

AGRADECIMENTOS

Primeiramente ao Deus que habita em mim. Ao dom da vida. A oportunidade de ter condições necessárias para superar mais esta etapa da minha carreira.

Ao meu Orientador, Prof. Dr. Manoel Roberval Pimentel Santos. Por seu respeito comigo, por sua confiança em mim. Por compartilhar seus conhecimentos. Por seu companheirismo. Por humildade pessoal. E sobre tudo por ser imponente e grandioso profissional. Agradeço por suas orientações.

Aos demais professores que fazem parte do Corpo Docente da UFOPA, e, que por sua vez contribuíram significativamente para minha formação.

Aos colegas da Graduação, em Especial Pedro Pacheco, Ramon Pereira, que, juntos, em muitos momentos foram fundamentais na construção de conhecimentos e realização de atividades acadêmicas.

A Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA, por sua existência em nossa Região.

Ao Professor Ubiraelson de Lima Ruela, Coordenador do BI em Ciência e Tecnologia, UFOPA.

Aos Componentes da Banca Examinadora deste TCC, Prof^ª Me. Kássia Marinho Lene Lima Marinho; ao Professor Dr. Nelson de Souza Amorim, por suas considerações e contribuições neste trabalho.

A Central Analítica da Universidade Federal do Oeste do Pará, vinculada ao Órgão Suplementar Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH), onde foi possível a realização das coletas dos dados para a produção deste TCC,

A Técnica de Laboratório senhorita Maria Yasmin Nogueira Fonseca, por empatia, gentileza, dedicação e disponibilidade no Laboratório de Teste Físico-Químico da Central Analítica II UFOPA, local de realização dos experimentos.

Aos meus filhos Ronivaldo Dias Jr., Gustavo Dias, Renan Dias. Minhas razões de viver. Minhas forças para caminhar.

Aos meus Pais por me conceberem. Deram-me a vida!

DIAS, R. L. **ESPECTROSCOPIA ÓPTICA**: ultravioleta/visível (UV-VIS) e infravermelho médio (*MIR*) na caracterização de amostras de óleos vegetais amazônicos. Trabalho de Conclusão de Curso em Bacharelado em Ciência e Tecnologia. Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA, Santarém, 2023.

RESUMO

Neste estudo, buscou-se Caracterizar os óleos de copaíba (*Copaifera reticulata*) e andiroba (*Carapa guianensis*) através da espectroscopia óptica de absorção UV-VIS e MIR. As amostras foram adquiridas na Cooperativa Mista da Flona do Tapajós - COOMFLONA. A Pesquisa é de caráter experimental, realizada na Central Analítica II, vinculada ao Órgão Suplementar Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH), localizado no Bloco Núcleo Tecnológico de Bioativos (NTB) da Universidade Federal do Oeste do Pará - UFOPA. Os instrumentos utilizados: Espectrofotômetro Digital de Duplo Feixe UV/VIS, Espectrofotômetro de Bancada, controlado automaticamente através de uma interface lógica NCL. As medidas foram realizadas nas regiões do UV a partir de 200nm até a região do Visível, aproximadamente 600nm; Os espectros de infravermelho médio foram adquiridos no espectrofotômetro de infravermelho por transformada de Fourier a partir de um acessório de reflectância total atenuada universal (UATR-FTIR), no intervalo entre 4000 a 650 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} e 32 varreduras. O cristal utilizado nesta técnica contém na sua base superior diamante e elemento focalizador de seleneto de zinco. Controle de temperatura ambiente ($\sim 25^\circ\text{C}$). Foi possível verificar através da espectroscopia óptica de absorção no UV-VIS e espectroscopia de Infravermelho Médio (*MIR*) as propriedades e caracterização dos óleos vegetais copaíba e andiroba, das amostras adquiridas. Foram identificados os principais grupos funcionais responsáveis pela classificação dos óleos. As bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio do óleo de Andiroba: Número de onda cm^{-1} : 715 - 721; Modo vibracional: δ_s/τ ; Grupo Funcional: CH, e, na mesma sequência, 1165 - 1185- δ -C-O; 1300 - 1400 - δ - CH₃; 1465 - 1450 - δ_s - =CH₂; 1710 - 1745 - ν - C=O; 2852-2850 - δ_{as} - =C-H₂; 2924 - 2910 - ν - C-H₃; 3005-3100 - ν - H-C=. Característica do espectro UV-VIS: absorvância do óleo de Copaíba, de 390nm, em 800nm toda a radiação foi absorvida, e, para andiroba partir de 400nm, em 780nm toda a radiação foi absorvida. Desta forma sendo possível a caracterização dos óleos.

Palavras - Chave: Óleos vegetais, espectroscopia óptica, UV-VIS e *MIR*.

DIAS, R. L. OPTICAL SPECTROSCOPY: ultraviolet/visible (UV-VIS) and mid-infrared (MIR) in the characterization of samples of Amazonian vegetable oils. Completion of course work in Bachelor of Science and Technology. Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA, Santarém, 2023.

ABSTRACT

In this study, we sought to characterize copaiba (*Copaifera reticulata*) and andiroba (*Carapa guianensis*) oils through optical spectroscopy of UV-VIS and MIR absorption. The samples were acquired at Cooperativa Mista da Flona do Tapajós - COOMFLONA. The Research is of an experimental nature, carried out at the Analytical Center II, linked to the Supplementary Body Integrated Human Development Network (RIDH), located in the Technological Core Block of Bioactives (NTB) of the Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA. The instruments used: UV/VIS Dual Beam Digital Spectrophotometer, Benchtop Spectrophotometer, automatically controlled through an NCL logic interface. Measurements were performed in the UV regions from 200nm to the Visible region, approximately 600nm; The mid-infrared spectra were acquired on a Fourier transform infrared spectrophotometer from a universal attenuated total reflectance accessory (UATR-FTIR), in the range of 4000 to 650 cm^{-1} , with a resolution of 4 cm^{-1} and 32 scans. The crystal used in this technique contains diamond in its superior base and zinc selenide focusing element. Room temperature control ($\sim 25^\circ\text{C}$). It was possible to verify through the optical spectroscopy of absorption in the UV-VIS and spectroscopy of Medium Infrared (MIR) the properties and characterization of the vegetable oils copaiba and andiroba, of the acquired samples. The main functional groups responsible for the classification of oils were identified. The absorption bands obtained through the Middle Infrared analysis of Andiroba oil: wave number cm^{-1} : 715-721; Vibrational mode: δ_s/τ ; Functional Group: CH, and, in the same sequence, 1165-1185- δ - C-O; 1300-1400 - δ - CH_3 ; 1465-1450 - δ_s - $=\text{CH}_2$; 1710-1745 - ν - C=O; 2852-2850 - δ_{as} - $=\text{C}-\text{H}_2$; 2924-2910 - ν - $\text{C}-\text{H}_3$; 3005-3100 - ν - $\text{H}-\text{C}=\text{C}$. Characteristics of the UV-VIS spectrum: absorbance of Copaiba oil, of 390 nm, at 800nm all radiation was absorbed, and for andiroba from 400 nm onwards, at 780nm all radiation was absorbed. In this way, it is possible to characterize the oils.

Keywords: Vegetable oils, optical spectroscopy, UV-VIS and MIR,

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1 Justificativa.....	3
2. OBJETIVOS	4
2.1. Objetivo Geral	4
2.2. Objetivos Específicos	4
3. REVISÃO DA LITERATURA	5
3.1 Óleos vegetais	5
3.1.1 A Copaíba - <i>Copaifera reticulata</i>	5
3.1.2 A andiroba - <i>Carapa guianensis</i>	5
3.1.3 Seleção do Comprimento de ondas, no máximo de absorbância.....	6
3.1.4 Lei de Lambert-Beer.....	6
4. METODOLOGIA	10
4.1 Matérias e Métodos	10
4.1.1 Espectroscopia de Absorção UV-VIS	11
4.1.2 Espectroscopia no infravermelho Médio (<i>MIR</i>).....	11
4.1.3 Amostras dos óleos copaíba (<i>Copaifera reticulata</i>) e andiroba (<i>Carapa guianensis</i>) utilizada nas experimentações.	11
4.2 Descrições da Experimentação	12
4.2.1 Experimento: Espectroscopia de Absorção UV-VIS	12
4.2.2 Espectroscopias no infravermelho Médio (<i>Mid Infrared – MIR</i>)	14
4.3 Procedimentos para análise	15
4.3.1 Análises dos dados do Experimento	15
5. RESULTADOS, DISCUSSÃO DOS DADOS COLETADOS	16
5.1 Espectroscopia de Absorção UV-VIS do Óleo de Andiroba	12
5.2 Espectroscopia de Absorção UV-VIS do Óleo de Copaíba	17
5.3 Espectroscopia de Infravermelho Médio – <i>MIR</i> do Óleo de Andiroba	19

5.3 Espectroscopia de Infravermelho Médio – <i>MIR</i> do Óleo de Copaíba	20
6. 6. CONCLUSÃO, RECOMENDAÇÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS	23
6.1 Conclusão	23
6.2 Sugestões para trabalhos futuros	23
6.3 Considerações finais	24
REFERENCIA BIBLIOGRÁFICA	25
ANEXOS	27

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1. Transmitância (%T) – Óleo de Andiroba	16
Gráfico 2. Absorbância – Óleo de Andiroba	16
Gráfico 3. Transmitância (%T) x Absorbância – Óleo de Andiroba	17
Gráfico 4. Transmitância (%T) – Óleo de Copaíba.....	17
Gráfico 5. Absorbância - Óleo de Copaíba	18
Gráfico 6. Transmitância (%T) x Absorbância – Óleo de Copaíba	18
Gráfico 7. Espectro de absorção do óleo de Andiroba na região do infravermelho (MIR)	19
Gráfico 8. Espectro de absorção do óleo de Copaíba na região do infravermelho (MIR)	21

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Rota e localização de acesso para a FLONA	1
Figura 2. Central Analítica II, prédio á esquerda. Centro Tecnológico da Ufopa em Santarém	2
Figura 3. Ilustração da Espectroscopia Óptica. Radiação eletromagnética	7
Figura 4. Ilustração da Espectroscopia. Seleção do Comprimento de ondas, no máximo de absorbância	7
Figura 5. Ilustração da interação ocorrida pela absorção da luz (radiação eletromagnética), detectada e quantificada.....	8
Figura 6. Ilustração da lei de Lambert-Beer	9
Figura 7. Espectrofotômetro Digital de Duplo Feixe UV/VIS.....	11
Figura 8. Espectrômetro de infravermelho	11
Figura 9. Amostras dos óleos copaíba e andiroba, adquiridas na COOMFLONA	12
Figura 10. Central Analítica. UFOPA	12
Figura 11. Frascos das amostras e cubetas de vidro de 1 mm de caminho óptico dos óleos de copaíba e andiroba utilizados em UV-VIS e <i>MIR</i>	13
Figura 12. Análise das amostras em Espectrômetro de infravermelho Central Analítica da Universidade Federal do Oeste do Pará	15

LISTA DE QUADRO

- Quadro 1.** Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio do óleo de Andiroba, conforme descrição da Tabela de Absorções no Infravermelho. 20
- Quadro 2.** Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio do óleo de Copaíba, conforme descrição da Tabela de Absorções no Infravermelho. 22

LISTA DE ANEXOS

- Anexo 1** - Tabela de Absorções no Infravermelho. Universidade Federal do Rio Grande do Sul Departamento de Química Orgânica. Espectroscopia Orgânica (Profa. Sônia Nachtigall) 27
- Anexo 2** - Compostos Carbonílicos: Cetonas. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy. 5ed. Cengage Learning, 2014 29
- Anexo 3** - Compostos Carbonílicos: Aldeídos. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy. 5ed. Cengage Learning, 2014 30
- Anexo 4** - Compostos Carbonílicos. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. **Introduction to Spectroscopy**. 5ed. Cengage Learning, 2014..... 31
- Anexo 5** - Compostos Carbonílicos: Ácido Carboxílico. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy. 5ed. Cengage Learning, 2014 32
- Anexo 6** - Compostos Carbonílicos: Ésteres e Lactonas. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy. 5ed. Cengage Learning, 2014 33
- Anexo 7** - Compostos Carbonílicos: Amidas e Lactamas. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy. 5ed. Cengage Learning, 2014 34

LISTA DE SIGLAS

COOMFLONA – Cooperativa Mista da Flona do Tapajós

IR – *Infra red*

IV – Infravermelho

I₀ – Intensidade Incidente

I_R – Intensidade Refletida

I_T – Intensidade Transmitida

I_E – Intensidade Espalhada

I_A – Intensidade Absorvida

MIR – *Mid Infrared*

NTB – Núcleo Tecnológico de Bioativos

RIDH – Rede Integrada de Desenvolvimento Humano

UV-Vis – Ultravioleta/Visível

UFOPA – Universidade Federal do Oeste do Pará

%T – Percentual de Transmitância

FTIR – *Fourier-transform infrared*

LISTA DE ABREVIATURAS

Abs. - Absorbância

UV-VIS - Ultravioleta/Visível.

1. INTRODUÇÃO

Na Amazônia, há a maior floresta tropical do mundo, cobrindo parte do noroeste do Brasil e se estende por grande parte dos países vizinhos da América do Sul. O bioma da floresta amazônica tem sido eleito como uma das mais requisitadas para pesquisas, devido a sua extensa biodiversidade - animal e vegetal, a qual vai desde a exploração da borracha iniciada século XIX, aos óleos resinas vegetais, copaíba (*Copaifera reticulata*) e andiroba (*Carapa guianensis*), objetos do nosso estudo.

Os óleos resinas de copaíba e andiroba têm muitas possibilidades de usos pela população local de forma empírica, e com aplicações em gêneros alimentícios, às grandes indústrias farmacêuticas e de energia.

Estes óleos vegetais são amplamente estudados e dispõe-se em grades variedades. As amostras dos óleos resinas tem sua origem da Floresta Nacional do Tapajós, que abrange os Municípios de Aveiro, Belterra, Placas e Rurópolis, no Oeste do Estado do Pará.

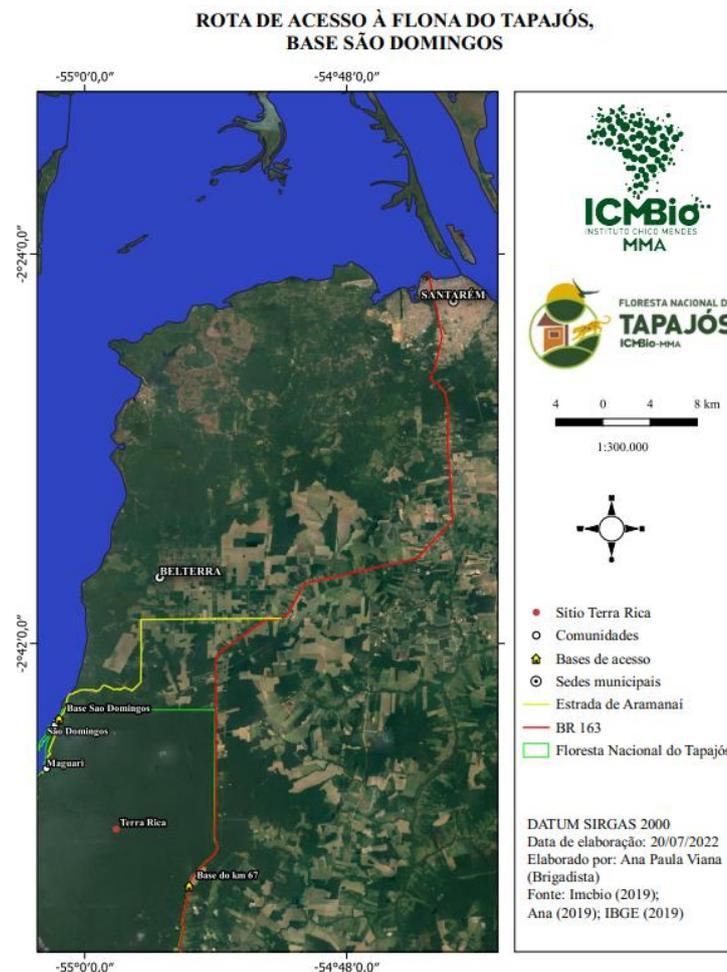


Figura 1. Rota e localização de acesso para a FLONA. Fonte: icmbio.gov.br/flonatapajos/

Neste trabalho os estudos da caracterização dos óleos de copaíba e andiroba foi através da espectrometria de absorção na região do ultravioleta visível (UV-VIS) entre as faixas de 250 a 700nm, e, de Infravermelho Médio (*Mid Infrared - MIR*), intervalo entre 4000 a 650 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} e 32 varreduras.

Esses procedimentos, de análise das técnicas de espectroscopia óptica de absorção no UV-VIS e *MIR*, em amostras de óleos da copaíba e andiroba foram realizados na Central Analítica II, vinculada ao Órgão Suplementar Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH), o qual faz parte do Centro tecnológico da Ufopa em Santarém, localizado no Bloco Núcleo Tecnológico de Bioativos (NTB) da Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA (foto).



Figura 2. Central Analítica II, prédio á esquerda. Centro Tecnológico da Ufopa em Santarém.
Fonte: [google.com/search](https://www.google.com/search).

Portanto, neste estudo foi proposto através de um experimento simples, introdutório, logo, de maneiras, que pudessem ser ampliados os conceitos sobre a espectrometria óptica na caracterização dos óleos vegetais aqui estudados, devido a sua importância local, cultura, comercial e industrial, e sua diversidade de aplicações.

1.1 Justificativa

As diversidades de aplicações e usos dos óleos vegetais de copaíba e andiroba, são amplas, como nas indústrias, e o uso pelas populações local como forma de trabalho e aumento na renda familiar, que de acordo com Newton et al (2011) faz parte da contribuição para a renda das famílias e das populações na exploração destes óleos. E conforme os estudos de Miguel (2007) As possibilidades de uso dos óleos de copaíba e andiroba, decorrem de suas propriedades biológicas, físicas, bioquímicas e fito-químicas desse produto, o que faz com que estes óleos sejam comercializados nas cidades de todo o Brasil.

A copaíba tem sua óleoresina retirada diretamente das arvores, e sua composição química depende os tipo de solo, do clima e de sua sazonalidade (FERREIRA, 2016). A autora coloca à composição química do óleoresina, devido à sazonalidade, podem influenciar em suas características físicoquímicas, e comprometer suas aplicações na indústria e nas tecnologias que fazem uso da copaíba.

Esta óleoresina tem sido utilizada pela população local e de toda a Amazônia como coadjuvante na medicina tradicional popular em algumas enfermidades como gripes e inflamações diversas. Alguns estudos mostram sua eficácia em como propriedades cicatrizantes, antissépticas, antibacterianas, diuréticas, anti-inflamatórias, expectorantes, analgésicas, antirreumáticas e antidiarreicas, e o uso da copaíba pode ser feita de forma oral, uso externo, por inalação e cápsulas (REIS, 2022).

A andiroba, como uma óleoresina, também tem seu uso na medicina tradicional população amazônica, e oferecem aspectos importantes em, por exemplo, reflorestamentos comerciais, indústrias madeireiras, devido ao crescimento satisfatório para tal (EMBRAPA, 2006).

A utilização do óleo de andiroba tem sido muito utilizada por indústrias de cosmético, na produção de sabão, shampoos. Essas indústrias dão preferência na produção dos produtos a partir do óleo bruto, extraído das sementes. Os produtos oferecem proteção para a pele e cabelos humanos, assim como limpeza e hidratação. Esses produtos são chamados de biocosméticos (saldaterrabio.com.br).

Portanto este estudo poderá corroborar com o uso e utilização dos óleos de copaíba e andiroba, através de suas caracterizações.

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Caracterizar os óleos de copaíba (*Copaifera reticulata*) e andiroba (*Carapa guianensis*) através da espectroscopia de absorção UV-VIS e MIR, coletados na Cooperativa Mista da Flona do Tapajós - COOMFLONA.

2.2 Objetivos Específicos

1. Identificar as características e propriedades de absorbância e transmitância na faixa do UV-VIS das amostras de copaíba e andiroba;
2. Identificar as características e propriedades das amostras de copaíba e andiroba através de espectroscopia de infravermelho Médio (MIR);
3. Descrever os espectros UV-VIS: absorbância dos óleos de copaíba e andiroba.
4. Descrever as bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio do óleo de copaíba e andiroba (Número de onda; Modo vibracional Grupo Funcional);

3. REVISÃO DA LITERATURA

3.1 Óleos vegetais

3.1.1 A Copaíba - *Copaifera reticulata*

A copaíba (*Copaifera reticulata*) produz um óleo de aspecto líquido, fino, odor fraco e de coloração amarelo-dourada (73,3% das plantas), mas com variações (amarelo-média, 16,7%; amarelo-clara, 10%) (ALENCAR (1982), Apud SILVA et al, 2012). O estudo sugere que, além do tipo de copaíba, as características do local de crescimento das árvores também afetam a coloração do óleo-resina. O índice de acidez variou de 9,62 a 10,17 mg g⁻¹ de KOH e o de saponificação de 100,63 a 109,84 mg g⁻¹. A análise molecular identificou 78 alelos, com média de 13 por loco. A heterozigosidade esperada variou 0,59 a 0,85 (média de 0,75), com nível de endogamia de 0,375 a 0,419. Neste estudo da copaíba, através de espectroscopia de absorção na região UV-VIS, foram analisadas uma amostra de cada espécie vegetal, totalizando quatro amostras, e as medidas de absorção foram feitas na faixa de 250 a 700nm com passos de um nanômetro e tempo de integração de 0,5 segundos. As medidas foram feitas à temperatura ambiente (25 °C) sem a adição de solvente. (ALENCAR,1982).

3.1.2 A andiroba - *Carapa guianensis*

A andiroba *Carapa guianensis* é nativa do Brasil, principalmente encontrada na região Norte. Esta tem sido reconhecida pelas suas propriedades fitoterápicas e medicinais, inclusive aos do óleo vegetal, mesmo assim ainda são necessários estudos mais aprofundados a respeito da caracterização pós-colheita do fruto.

Os estudos de SILVA (2018) mostraram suas propriedades físico-químicas e o perfil dos ácidos graxos. O óleo fixo foi obtido sob prévia extração por prensagem a frio e caracterizado quanto a: ácidos graxos livres (%), índice de acidez (mg. NaOH/g⁻¹), índice de peróxidos (meq/1000g), índice de saponificação (mg. KOH/g-1), índice de iodo (g.I2/100g⁻¹), pH, polifenóis extraíveis totais (mg. 100g⁻¹).

Nos estudos de Nascimento (2019), o espectro de infravermelho mostraram mudanças nas bandas de absorção de 1300 a 1000 cm⁻¹ para (CO), 1712 a 1745 cm⁻¹ (C = O), e desaparecimento da banda de absorção em 721 cm⁻¹, deformações planas dos grupos ds/t (C-H) e a 3005 cm⁻¹ para a banda de deformação axial de n (H-C=), sendo possível que estas alterações sejam devidas ao aumento progressivo do grau de polimerização do óleo devido ao aumento de ligações cruzadas e diminuição sistemática das ligações duplas.

Outros estudos sobre Espectroscopia UV-VIS, de Almeida (2014) sobre o espectro de absorção em função do comprimento de onda para amostras de fluídos magnéticos de óleo de copaíba com 100 μL de NPMs, óleo de copaíba com 1000 μL de NPMs,

Apresenta o espectro de UV-VIS, onde a amostra óleo de copaíba com 100 μL de NPMs apresenta uma única banda de absorção de 190 - 300 nm. A amostra Óleo com 100 μL . Apresenta duas bandas a primeira de 190-241 nm e a segunda de 241-386 nm. A amostra óleo de copaíba com 1000 μL de NPMs apresenta duas bandas à primeira de 190-248 nm e a segunda 248-406 nm, figura abaixo.

Espectro de absorção em função do comprimento de onda para amostras de fluídos magnéticos óleo de copaíba (O), óleo de copaíba com 100 μL de NPMs (OC), óleo de copaíba com 1000 μL de NPMs (OM), Almeida (2014).

3.1.3 Seleção do Comprimento de ondas, no máximo de absorbância.

O aspecto primordial da Espectrometria é quando a radiação passa através de uma camada de um sólido ou de um líquido ou de um gás, algumas frequências podem ser removidas por absorção num processo pelo qual a energia eletromagnética é transferida para os átomos ou moléculas, nesse caso, destacamos as moléculas dos óleos de copaíba e andiroba, as quais serão a nossa amostra de interesse.

Estudos nos mostram que quando a molécula absorve energia e ela pode absorver na região do infravermelho do visível ou do ultravioleta.

Neste sentido, na espectroscopia óptica, quando a molécula absorve no infravermelho ocorre um tipo de transição que é vibracional, no mesmo nível eletrônico. Já no visível e no ultravioleta acontece uma transição eletrônica, onde os elétrons saem de um nível mais baixo de energia para o nível mais alto de energia.

A espectroscopia óptica remete aos níveis de energia do visível, porém como ultravioleta e o infravermelho tem características bem parecidas, eles também são considerados como espectroscopia óptica (figura 1).

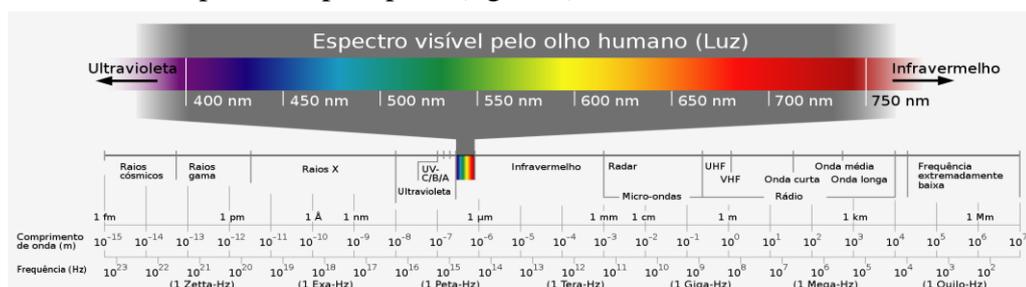


Figura 3. Ilustração da Espectroscopia Óptica. Radiação eletromagnética. Fonte: Por Horst Frank, Jailbird, Alebergen.

As medidas de absorvência são feitas em comprimentos de onda que correspondem ao máximo de absorvência, por variação e absorvência por unidade de concentração. Geralmente se faz uma varredura do analito em vários comprimentos de onda e determina-se em qual o comprimento de onda ele vai apresentar uma maior absorvência. É nesse comprimento de onda que o analito deve ser analisado.

Neste sentido se houver as espécies de andiroba e copaíba, é analisada pelo comprimento de onda de absorção daquela cor.

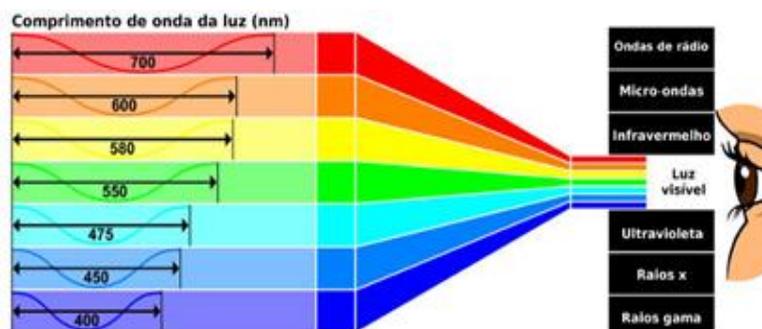


Figura 4. Ilustração da Espectroscopia. Seleção do Comprimento de ondas, no máximo de absorvência. Fonte: <https://cienciaemacao.com.br/introducao-a-espectrofotometria/>

A espectroscopia óptica tem como propósito identificar um composto ou investigar a composição de uma amostra inorgânica ou orgânica, pode fazer uso de diversas técnicas analíticas a fim de se caracterizar um material (PAVANATTI, 2010). Caracterizamos um material por meio de técnicas instrumentais de análise a qual pretende compreender e relacionar os diferentes aspectos relacionados à sua composição (massa molecular, número de oxidação, dentre outras). A estrutura (ligações químicas, fase cristalina, etc.), as quais estão diretamente ligadas às propriedades químicas e físicas dos materiais, ou seja, vinculadas diretamente às propriedades mecânicas, ópticas, catalíticas, por exemplo, (ARAÚJO, 2015). Desta forma a caracterização auxilia na determinação da aplicabilidade dos compostos estudados, tanto na medicina tradicional popular como nas indústrias farmacêuticas e de cosméticos.

As análises químicas e estruturais dos materiais são obtidas por instrumentos que convertem as informações obtidas sobre essas características químicas e/ou físicas de um determinado material em dados os quais podem ser obtidos, manipulados e interpretados (BARBOSA, 2007; ARAÚJO, 2015).

Os instrumentos de análise baseiam-se em estimular a amostra, por incidência de energia eletromagnética, calor, entre outras formas, de modo que tal estímulo gera uma resposta do sistema em análise, podendo ser interpretada por grandezas físicas e químicas.

A espectroscopia será um dos instrumentos de análise estudado nesse trabalho, relacionando os efeitos da radiação eletromagnética sobre a matéria.

A espectroscopia óptica consiste na interação da radiação eletromagnética ultravioleta no visível ou no infravermelho com a matéria no estado sólido, líquido ou gasoso. A interação da luz vai acontecer pela absorção da radiação eletromagnética (figura 1), a qual pode ser detectada e qualificada (figura 2).

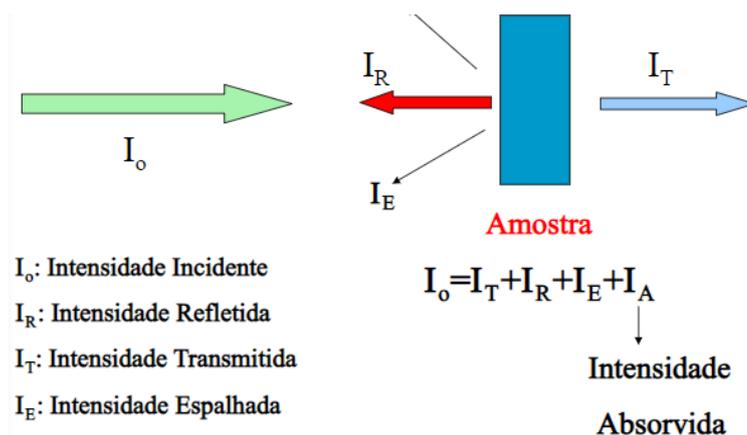


Figura 5. Ilustração da interação ocorrida pela absorção da luz (radiação eletromagnética), detectada e quantificada. Fonte: Maria José V. Bell, DF – UFJF.

Podemos ver na figura 5, que a radiação incide na mostra, e uma parte dessa radiação pode ser refletida, uma parte pode ser espalhada e uma parte vai ser transmitida. No entanto, o que interessa na análise é a intensidade que é absorvida.

3.1.4 Lei de Lambert-Beer

A quantificação foi feita, utilizando a lei de Lambert-Bee. Esta lei estabelece quantitativamente como a grandeza absorção/absorbância – medida pela atenuação da radiação eletromagnética incidente depende da concentração das moléculas e da extensão do caminho sobre o qual ocorre a absorção, assim, quanto maior o caminho, mais a radiação irá interagir com as espécies presentes. Mais irá absorver.

$$\text{Absorbância} = \log (P_o/P) = \epsilon . b . c, \text{ ou } \epsilon . l . c$$

ϵ é a constante de proporcionalidade denominada absorvidade.

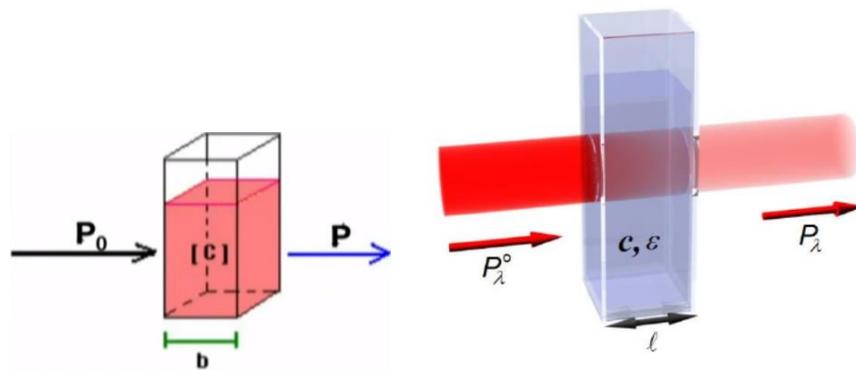


Figura 6. Ilustração da lei de Lambert-Beer: “c” concentração das moléculas; “b” ou “l” extensão do caminho.

Equação da absorvância (A) correspondente do logaritmo decimal do inverso (ou simétrico do logaritmo) da Transmitância. (T).

$$T = \frac{P_{\lambda}}{P_{\lambda}^0} \quad (1)$$

$$A = \log \frac{P_{\lambda}^0}{P_{\lambda}} = -\log T = \log \frac{1}{T} \quad (2)$$

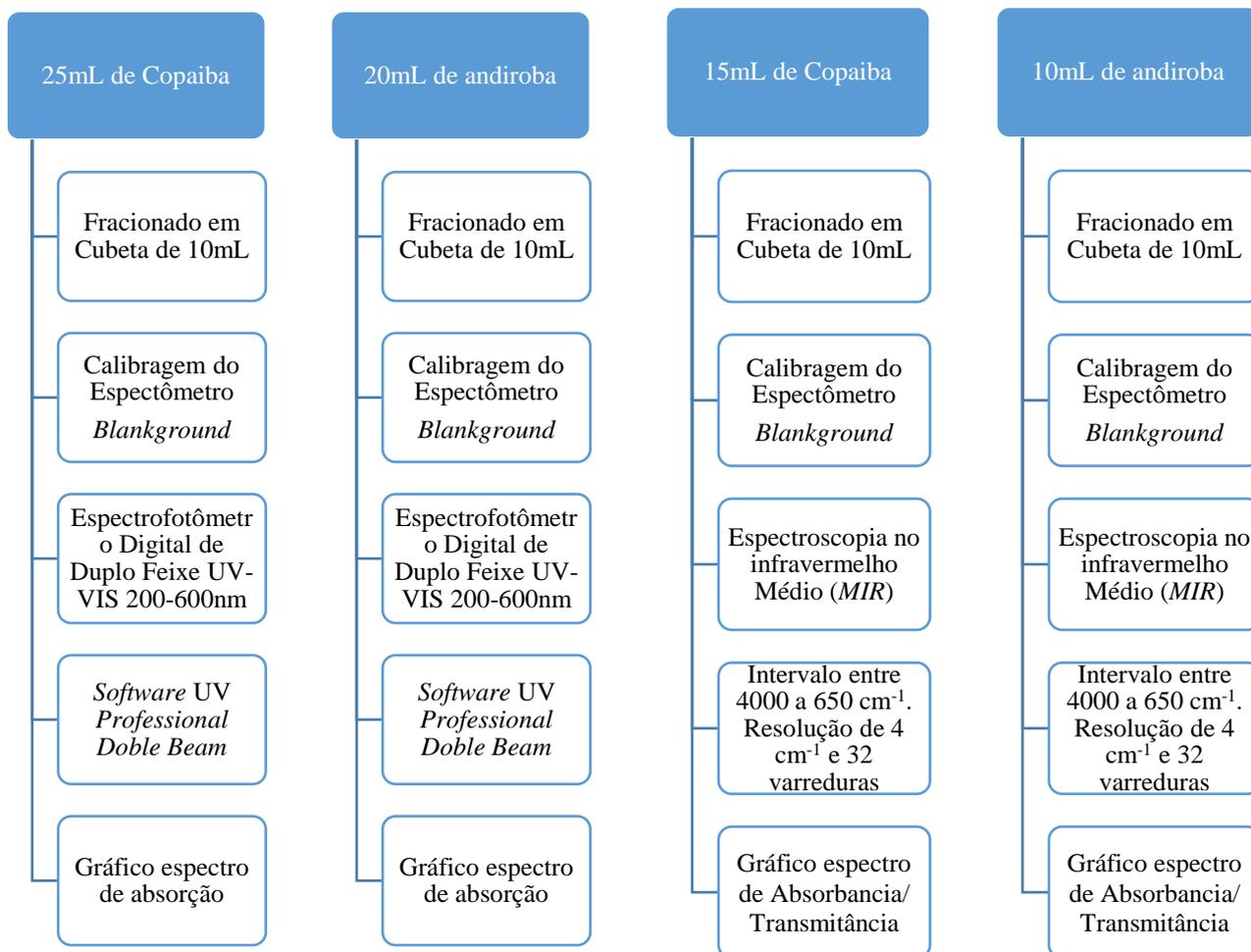
E a lei de lei de Lambert-Bee é traduzida pela seguinte expressão matemática:

$$A = \epsilon \cdot l \cdot c \quad (3)$$

Nessa equação (3), c representa a concentração molar da espécie em solução ($\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$)/ a distancia percorrida pela radiação através da solução (m) e o ϵ o coeficiente de absorção molar da espécie em estudo ($\text{m}^2 \text{mol}^{-1}$)

4. METODOLOGIA

Os procedimentos para análise seguem alguns passos para a análise das amostras e a seleção do comprimento de ondas e os espectros de infravermelho médio, descritos nos fluxogramas abaixo.



Fluxograma UV-VIS para a copaíba e a andiroba.

Fluxograma MIR para a copaíba e a andiroba.

4.1 Materiais e Métodos

4.1.1 Espectroscopia de Absorção UV-VIS

Espectrofotômetro Digital de Duplo Feixe UV/VIS, Espectrofotômetro de Bancada, controlado automaticamente através de uma interface lógica NCL. As aquisições das medidas são nas regiões entre UV a partir de 200nm até a região do Visível, aproximadamente 600nm. Cubeta de vidro de 1 mm de caminho óptico, e controle de temperatura ambiente ($\sim 25^{\circ}\text{C}$).



Figura 7. Espectrofotômetro Digital de Duplo Feixe UV/VIS. Fonte: Autores/ Central Analítica da Universidade Federal do Oeste do Pará, vinculada ao Órgão Suplementar Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH).

4.1.2 Espectroscopia no infravermelho Médio (*MIR*)

Os espectros de infravermelho médio foram adquiridos no espectrofotômetro de infravermelho por transformada de Fourier a partir de um acessório de reflectância total atenuada universal (UATR-FTIR). Foi utilizado o intervalo entre 4000 a 650 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} e 32 varreduras. O cristal utilizado nesta técnica contém na sua base superior diamante e elemento focalizador de seleneto de zinco. Controle de temperatura ambiente ($\sim 25\text{ }^{\circ}\text{C}$).



Figura 8. Espectrômetro de infravermelho Central Analítica da Universidade Federal do Oeste do Pará, vinculada ao Órgão Suplementar Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH).

4.1.3 Amostras dos óleos copaíba (*Copaifera reticulata*) e andiroba (*Carapa guianensis*) utilizada nas experimentações.

Foram adquiridos: aproximadamente 25mL, em fraco plástico, de copaíba sem identificação da espécie e aproximadamente 20mL, em fraco plástico, de andiroba sem identificação da espécie.



Figura 9. Amostras dos óleos copaíba e andiroba adquiridas na COOMFLONA. Fonte: Autores.

4.2 Descrição da Experimentação.

4.2.1 Experimento: Espectroscopia de Absorção UV-VIS

Na Central Analítica II, local de realização do teste Físico-Químico da UFOPA, iniciamos a experimentação, procurou-se entender o funcionamento do espectrofotômetro e a técnica de espectroscopia molecular no UV-Vis.

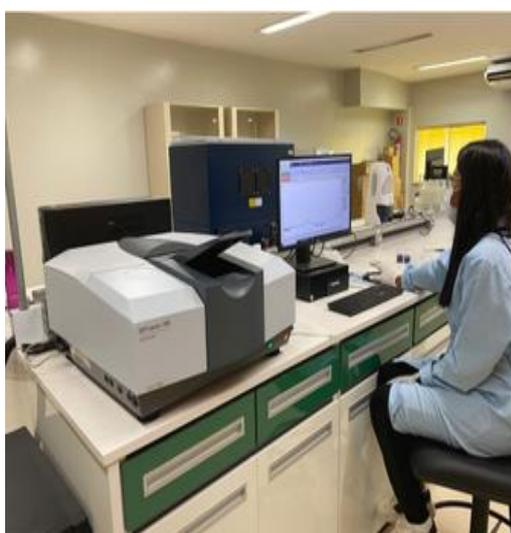


Figura 10. Central Analítica. UFOPA. Fonte: www.ufopa.edu.br/ridh/unidades-2/nucleo-tecnologico-de-bioativos/central-analitica/.

Foram realizados os procedimentos de análise de acordo com Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH), para a utilização do aparelho no Laboratório de teste

Físico-Químico. Verificou-se o funcionamento do aparelho, o qual possui duas lâmpadas, uma delas emite luz no ultravioleta, e outra lâmpada de luz visível.

A metodologia do aparelho se dá, quando a luz atravessa uma solução dependendo do tipo de substância ela pode absorver uma parte da luz.

Foi usada uma fonte de luz visível branca para as nossas soluções de andiroba e copaíba. O aparelho possui um sistema ótico que separa a luz branca em seus componentes. Esse sistema faz com que apenas uma cor, atravesse a amostra, de cada vez.

Foi feito o comando no aparelho para uma medida por todo o espectro visível utilizando as cubetas de vidro de 10 milímetros de largura, por 1 centímetro.



Figura 11. Frascos das amostras e cubetas de vidro de 1 mm de caminho óptico dos óleos de copaíba e andiroba utilizados em UV-VIS e MIR. Fonte: Autores.

Tomaram-se os devidos cuidados para segurar as cubetas, apenas pelos seus lados foscos, e seu preenchimento com as amostras - até a altura atingida pelo feixe de luz do aparelho. E os lados transparentes voltados para a direção do feixe.

Antes de fazer a medida foram realizados os ajustes do aparelho para, método utilizado para “descontar” qualquer absorção de luz, proveniente da cubeta ou do solvente (água), ou seja, fazer o branco do aparelho, para isso colocou-se o solvente água destilada na uma cubeta. O procedimento é analisar as variáveis que influenciam absorbância, variáveis como efeito de solvente. Se o solvente apresentar picos ou bandas na mesma região, temperatura, outras substâncias que também podem apresentar bandas na mesma região, todas essas substâncias devem ter os seus efeitos conhecidos, e, as condições de análise devem ser controladas para evitar tais influências durante a análise.

Para fazer a medida da absorbância de as amostras. Colocou-se em cubetas idênticas àquela usada para fazer o branco. Introduzindo-a no aparelho, e, no computador, utilizando o *software UV Professional Doble Beam* (Feixe duplo profissional). Dado o comando de fazer

uma varredura, e, entrada com os valores do comprimento de onda inicial e final na escala da absorvância (a escala vertical).

Assim, foi identificada a curva de calibração, ou seja, uma curva que nos mostra qual é absorvância para cada concentração das amostras, e pode-se verificar e caracterizar, a partir das soluções das amostras de copaíba e andiroba, suas absorvâncias.

O aparelho mede a absorvância em cada comprimento de onda, gerando um gráfico de um espectro de absorção.

Com isso obteve-se os dados para identificação da absorvância no comprimento de onda máximo de absorção em cada uma das amostras.

4.2.2 Espectroscopias no infravermelho Médio (*Mid Infrared* – MIR)

Na Central Analítica II, local de realização do teste Físico-Químico da UFOPA, iniciamos a experimentação, com o espectrofotômetro infravermelho médio.

Foi realizado *Blankground*, para a leitura do branco. Em seguida, iniciaram-se as medidas das amostras, colocando-as no cristal e realizou-se a leitura da mesma, sendo uma amostra por vês, de copaíba e andiroba, respectivamente.

Os espectros de infravermelho médio (*MIR*) foram adquiridos no espectrofotômetro de infravermelho por transformada de Fourier a partir de um acessório de refletância total atenuada universal (UATR-FTIR). Foi utilizado o intervalo entre 4000 a 650 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} e 32 varreduras.

O cristal utilizado nesta técnica com a espectroscopia no infravermelho – IV, ou do inglês *Mid Infrared* – MIR, é um tipo de espectroscopia de absorção, em que a energia absorvida se encontra na região do infravermelho do espectro eletromagnético. Como as demais técnicas espectroscópicas, ela pode ser usada para identificar um composto ou investigar a composição de uma amostra (HENEINE, 2001).

A espectroscopia no infravermelho se baseia no fato de que as ligações químicas das substâncias possuem frequências de vibração específicas, as quais correspondem a níveis de energia da molécula (chamados nesse caso de níveis vibracionais). Tais frequências dependem da forma da superfície de energia potencial da molécula, da geometria molecular, das massas dos átomos e eventualmente do Acoplamento vibrônico (SALA, 1995). Têm na sua base superior diamante e elemento focalizador de seleneto de zinco.

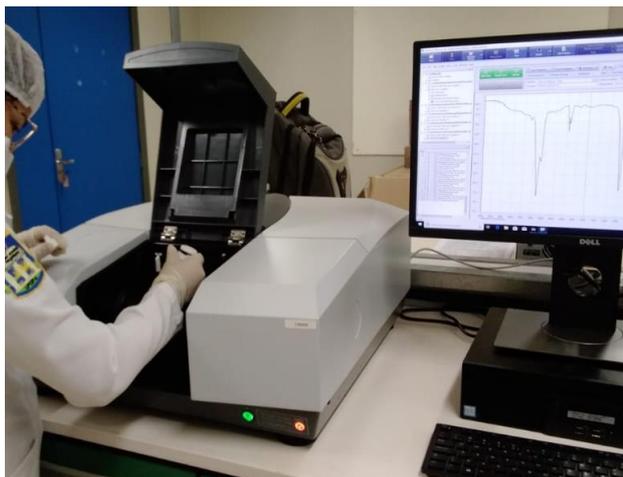


Figura 12. Análise das amostras em Espectrômetro de infravermelho Central Analítica da Universidade Federal do Oeste do Pará, vinculada ao Órgão Suplementar Rede Integrada de Desenvolvimento Humano (RIDH).

4.3 Procedimentos para análise.

Realização da seleção do comprimento de ondas nas medidas de absorbância, feitas em comprimentos de onda que correspondem ao máximo de absorbância. Comprimento de onda de absorção do óleo de copaíba apresenta um pico máximo entre as faixas de 250 a 700nm (SILVA et al, 2012). Comprimento de onda de absorção do óleo de andiroba apresenta um pico máximo em entre 300 a 350nm (ALVES et al, 2015).

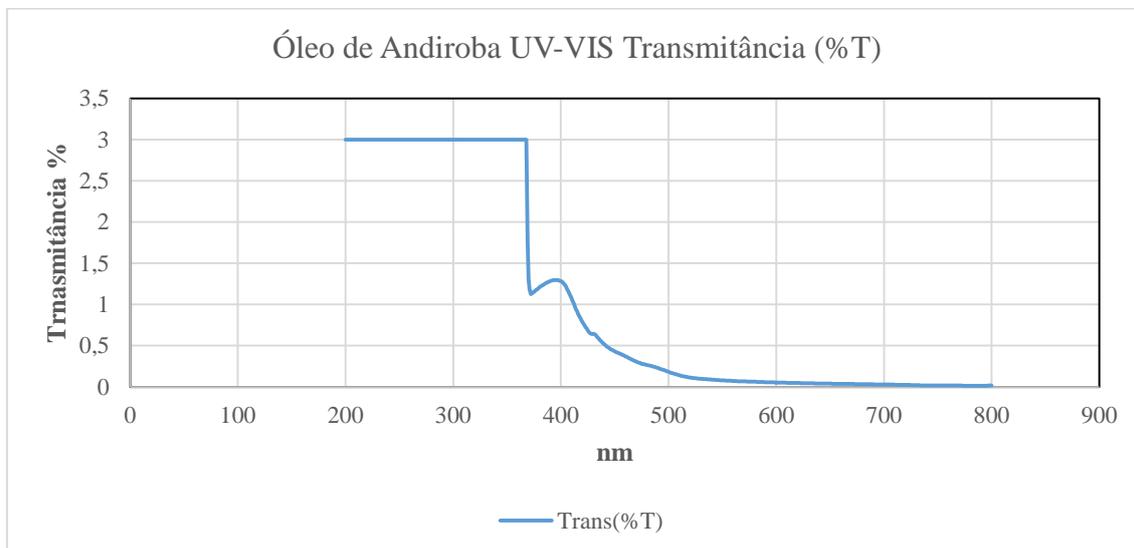
4.3.1 Análises dos dados do Experimento

Foi analisada a Luz não absorvida que chega ao detector, o qual transforma a energia eletromagnética em sinais elétricos. Os sinais elétricos são interpretados pelo dispositivo de leitura, que os irá transformar em um gráfico de absorbância (ABS) (eixo “x”) x o Comprimento da Onda (eixo “y”).

5. RESULTADOS, DISCUSSÃO DOS DADOS COLETADOS.

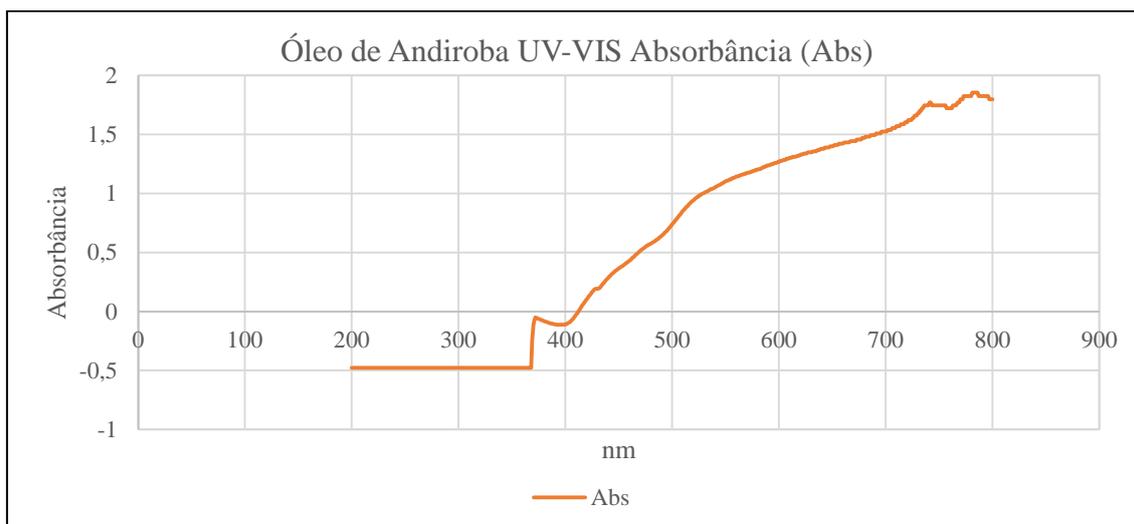
5.1. Espectroscopia de Absorção UV-VIS do Óleo de Andiroba.

Gráfico 1 - Transmitância (%T) do Óleo de Andiroba



Nos gráficos 1, observa-se o espectro da Transmitância do óleo de Andiroba no UV-vis, em geral tem apenas uma ou algumas bandas para cada analito então isso é uma característica deste espectro, que o diferente da outra técnica em análise. Transmitância é a fração de energia luminosa que consegue atravessar a espessura de um determinado material, sem ser absorvida, ou seja, a capacidade de transmitir luz.

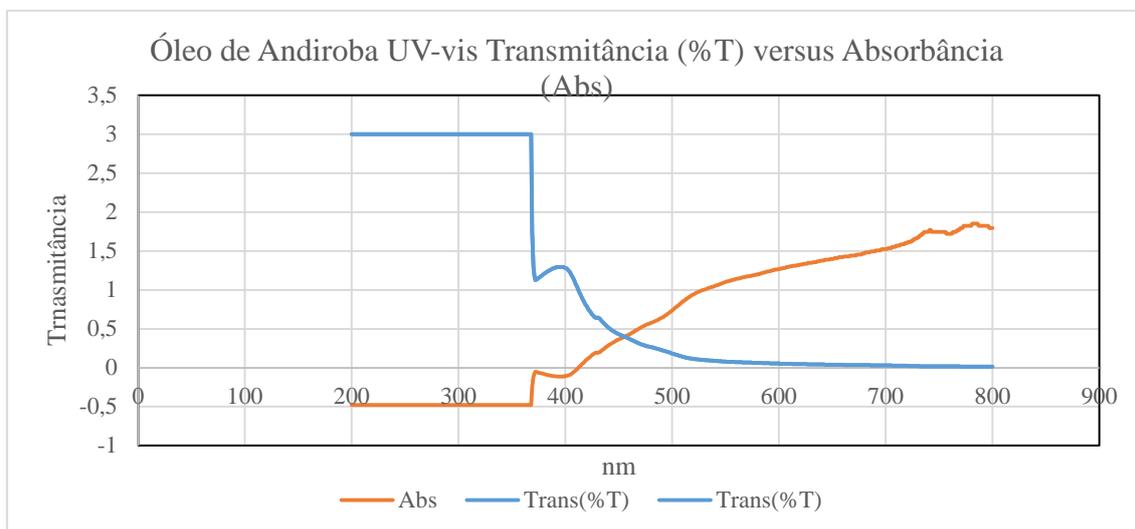
Gráfico 2 - Absorbância – Óleo de Andiroba.



E, no gráfico 2, é visualizado o espectro da Absorbância do óleo de Andiroba no UV-vis, e que da mesma forma, geralmente, há apenas uma ou algumas bandas para o analito ainda como uma característica do espectro UV-VIS. Absorbância é a capacidade intrínseca

dos materiais em absorver radiações em frequência específica. A andiroba absorve fortemente os comprimentos de onda da região do UV. A partir de 400 nm, e em 780nm toda a radiação é absorvida.

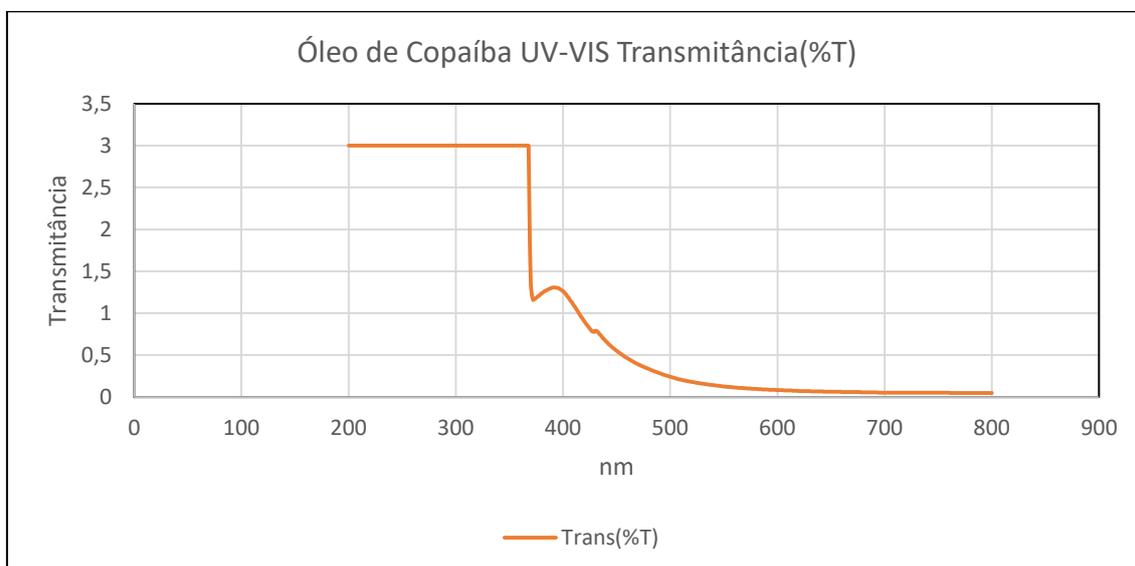
Gráfico 3 – Transmitância (%T) x Absorbância – Óleo de Andiroba.



No gráfico 3, apresentamos o espectro da Transmitância (%T) versus Absorbância do Óleo de Andiroba, Ao passo que a absorbância da solução aumenta, a transmitância diminui. Quanto maior a camada que a luz irá incidir sobre, maior é a absorbância. Ou seja, a transmissão de luz decresce com o aumento linear da espessura da camada. Então, quanto maior a espessura da camada, maior a absorbância.

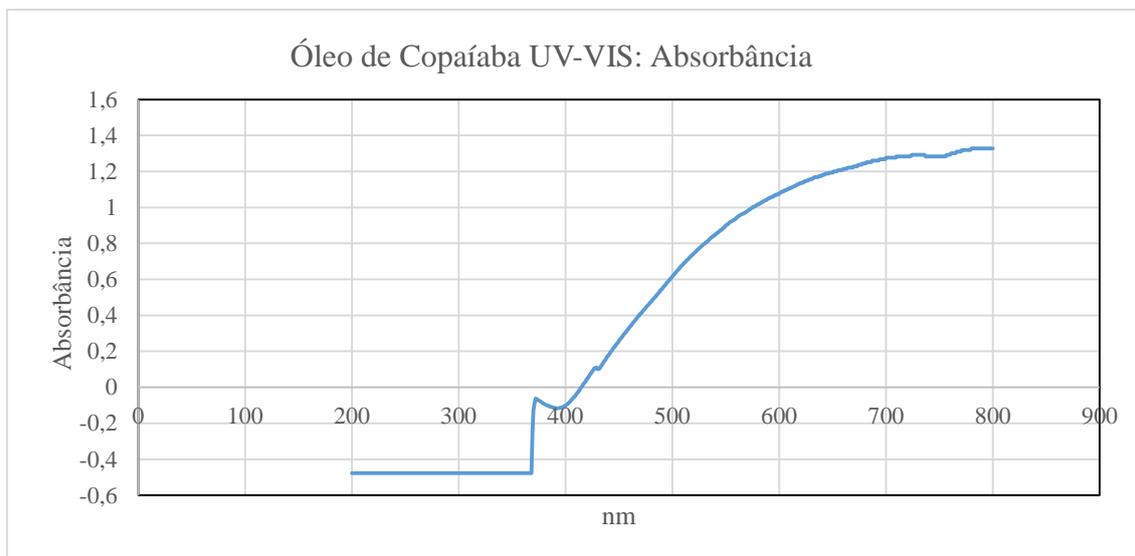
5.2 Espectroscopia de Absorção UV-VIS do Óleo de Copaíba

Gráfico 4 - Transmitância (%T) - Óleo de Copaíba.



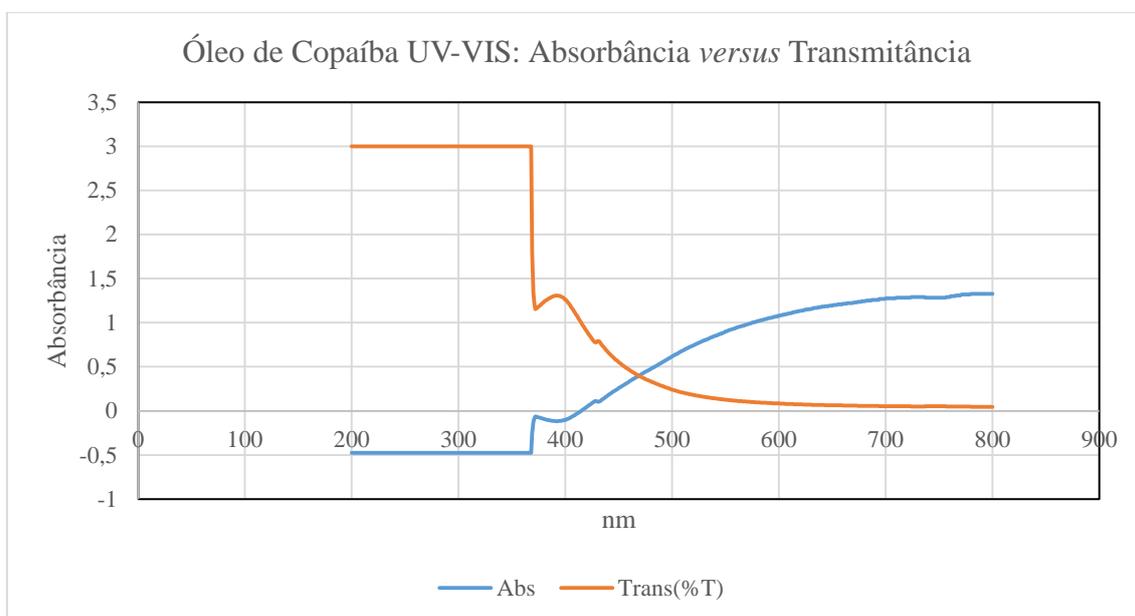
Nos gráfico 4, visualiza-se o espectro da Transmitância do óleo de Copaíba no UV-vis, apresentando uma ou algumas bandas para o analito, sendo uma característica deste espectro.

Gráfico 5 - Absorbância - Óleo de Copaíba



No gráfico 5, é visualizado o espectro da Absorbância do óleo de Copaíba no UV-vis, e que observando-se, que á apenas uma ou algumas bandas para o analito, o que lhe constitui a característica do espectro UV-VIS. A copaíba absorve fortemente os comprimentos de onda da região do UV. A partir de 390 nm, e em 800nm toda a radiação é absorvida.

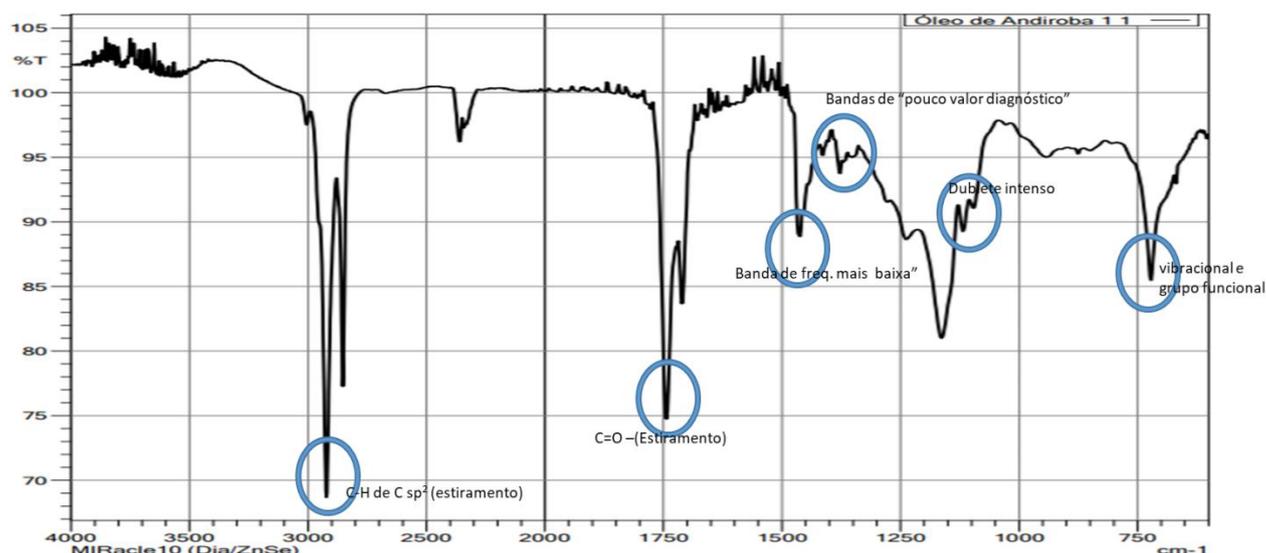
Gráfico 6 - Transmitância (%T) x Absorbância – Óleo de Copaíba



No gráfico 6, apresentamos o espectro da Transmitância (%T) *versus* Absorbância do Óleo de Copaíba, Ao passo que a absorbância da solução aumenta, a transmitância diminui. Quanto maior a camada que a luz irá incidir sobre, maior é a absorbância. Ou seja, a transmissão de luz decresce com o aumento linear da espessura da camada. Então, quanto maior a espessura da camada, maior a absorbância.

5.3 Espectroscopia Infravermelho Médio (MI do Óleo de Andiroba) .

No gráfico 7, mostramos os espectros, resultante do infravermelho médio (*MIR*) do Óleo de Andiroba. Podemos ver número de picos grandes (infravermelho) e bastantes estreitos em relação a toda a faixa de comprimento de onda do espectro. Gráfico 7 : Espectro de absorção do óleo de Andiroba na região do infravermelho (*MIR*), a temperatura de 24 °C: Fonte: Autores da pesquisa/ Laboratório Central Analítica UFOPA.



O Gráfico 7, mostra o espectro de absorção do óleo de Andiroba na região do infravermelho (*MIR*), a temperatura de 24 °C, dados coletados no Laboratório Central Analítica UFOPA, identificando o % de Transmitância *versus* o comprimento de onda (cm^{-1}). Bandas de absorção, em relação ao número de ondas (cm^{-1}), modo vibracional e grupo funcional, em 715 -721, alargada; 1165 – 1185 dupleto intenso; 1300 – 1400 bandas de “pouco valor diagnóstico”; 1465 - 1450 bandas de frequência mais baixa; 1710 – 1745 C=O – (estiramento). Ácidos carboxílicos (dímeros). Ácidos carboxílicos não associados: ~1760. Ânions carboxilato: 1610-1550; 2852-2850 C-H (estiramento) aldeídos, Geralmente aparecem 2 bandas de combinação (overtone). A Confirmar com banda C=O (~1725 cm^{-1}); 2924 – 2910 C-H de C sp^3 (estiramento), Geralmente intensas e múltiplas (estiramento simétrico e assimétrico de grupos CH, CH2 e CH3); 3005-3100, C-H de C sp^2 (estiramento) Presente em

alcenos e arenos. O ciclopropano também apresenta estiramento CH nessa região. Alcenos de massa molecular alta: banda fraca.

Quadro 01. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio do óleo de Andiroba, conforme descrição da Tabela de Absorções no Infravermelho.

Número de onda cm^{-1}	Modo vibracional	Grupo funcional
715 - 721	δ_s/τ	CH
1165 - 1185	δ	C-O
1300 - 1400	δ	CH ₃
1465 - 1450	δ_s	=CH ₂
1710 - 1745	ν	C=O
2852-2850	δ_{as}	=C-H ₂
2924 - 2910	ν	C-H ₃
3005-3100	ν	H-C=

ν - Deformação Axial; s - simétrica, as - assimétrica, δ - deformação angular no plano, τ - deformação angular assimétrica fora do plano. Fonte: Autores da pesquisa/ Laboratório Central Analítica UFOPA.

5.4 Espectroscopia de Infravermelho Médio – *MIR* do Óleo de Copaíba.

No gráfico 8, abaixo, mostramos os espectros, resultante do infravermelho médio (*MIR*) tem do Óleo de Copaíba. Da mesma forma, observa-se a aparência diferente no espectro UV-VIS. No *MIR*, observa-se número de picos grandes, bastantes estreitos em relação a toda a faixa de comprimento de onda do espectro.

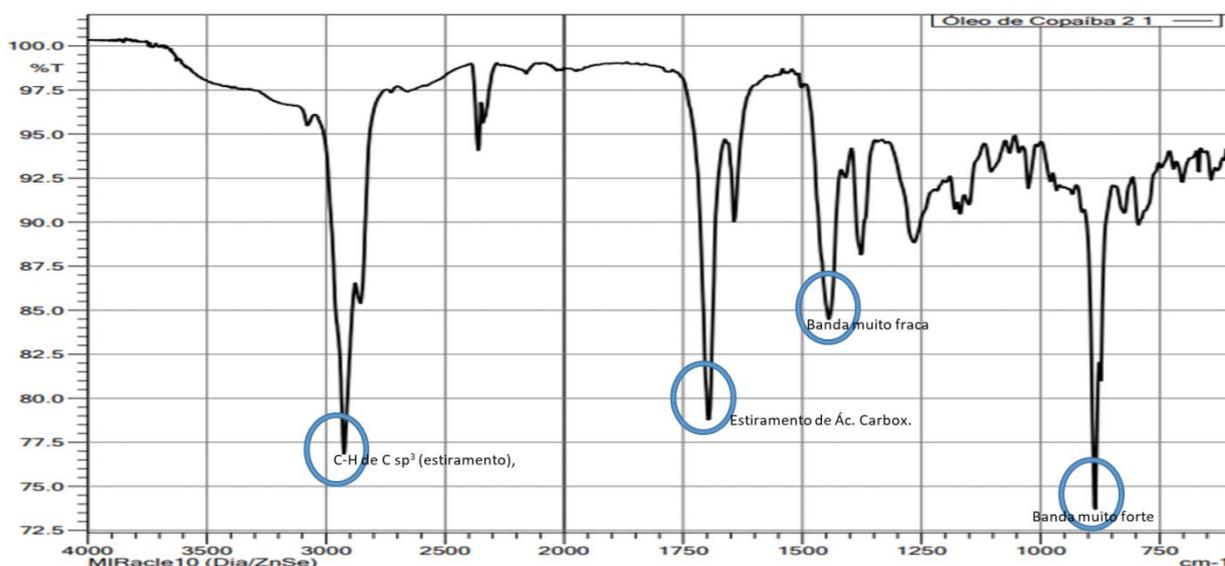


Gráfico 8: Espectroscopia de Infravermelho Médio (*MIR*) – Óleo de Copaíba 1 no *MIR*: Fonte: Autores da pesquisa. a temperatura de 24 °C: Fonte: Autores da pesquisa/ Laboratório Central Analítica UFOPA.

O gráfico 8, apresenta o espectro de absorção do óleo de Copaíba na região do infravermelho (MIR), a temperatura de 24 °C, dados coletados no Laboratório Central Analítica UFOPA, identificando o % de Transmitância versus o comprimento de onda (cm^{-1}).

Observa-se no gráfico 8, os espectros de absorção por espectroscopia Infravermelho Médio (MIR) dos óleo de copaíba, respectivamente, as principais bandas características de triglicerídeos, como uma banda de baixa intensidade atribuída a região de deformação em 883 cm^{-1} , referente a Fenilas meta-dissubstituídas – uma banda forte, em 1891 cm^{-1} atribuída a banda de combinação presentes nos anéis aromáticos; bandas de absorção em 1701 cm^{-1} atribuídas ao C=O estiramento do ácido carboxílico.; em 2912 cm^{-1} C-H C sp^3 (estiramento), geralmente intensas e múltiplas – estiramentos simétricos e assimétricos de Grupos CH, CH₂ e CH₃.

Quadro 02. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio do óleo de Copaíba, conforme descrição da Tabela de Absorções no Infravermelho.

Número de onda cm^{-1}	Modo vibracional	Grupo funcional
883	δ_s/τ	CH
1701	ν	C=O
1891	δ_{as}	=C-H ₂
2912	ν	CH, CH ₂ e CH ₃

ν - Deformação Axial; s - simétrica, as - assimétrica, δ - deformação angular no plano, τ - deformação angular assimétrica fora do plano. Fonte: Autores da pesquisa/ Laboratório Central Analítica UFOPA.

No gráfico 9, temos um estudo com achados semelhantes, de Nascimento Filho et al (2019), para análise do óleo de andiroba em Espectroscopia no Infravermelho FT-IR, o que corrobora com os nossos, neste estudo.

6. CONCLUSÃO, RECOMENDAÇÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS.

6.1 Conclusão

Neste trabalho, foi possível verificar através da espectroscopia óptica de absorção no UV-VIS. As Características do espectro de absorbância do óleo de Copaíba, de 390nm, em 800nm toda a radiação foi absorvida, e, para andiroba partir de 400nm, em 780nm toda a radiação foi absorvida.

Já para e a espectroscopia de Infravermelho Médio (*MIR*) as propriedades dos óleos vegetais copaíba (*Copaifera reticulata*) e andiroba (*Carapa guianensis*) que as caracteriza, foram: para a andiroba Número de onda cm^{-1} : 715 - 721; Modo vibracional: δ_s/τ ; Grupo Funcional: CH, e, na mesma sequencia, 1165 – 1185- δ : C-O; 1300 – 1400 - δ : CH₃; 1465 – 1450 - δ_s : =CH₂. Ácidos carboxílicos 1710 – 1745 – ν : C=O; 2852-2850 - δ_{as} : =C-H₂. 2924 – 2910 - ν : C-H₃; 3005-3100 - ν : H-C=.

Para a copaíba: os espectros de absorção por espectroscopia Infravermelho Médio (*MIR*) do óleo de copaíba, temos as principais bandas características de triglicerídeos, como uma banda de baixa intensidade atribuída a região de deformação em 883 cm^{-1} , referente a Fenilas meta-dissubstituídas – uma banda forte; em 1891 cm^{-1} atribuída a banda de combinação presentes nos anéis aromáticos; bandas de absorção em 1701 cm^{-1} atribuídas ao C=O estiramento do ácido carboxílico; em 2912 cm^{-1} C-H C sp^3 (estiramento), geralmente intensas e múltiplas – estiramento simétrico e assimétricos de Grupos CH, CH₂ e CH₃.

Portanto conclui-se que através de metodologias baseadas na utilização da técnica de UV-vis e espectroscopia *MIR*, foram identificados os principais grupos funcionais responsáveis pela classificação dos óleos, desta forma sendo possível caracterizá-los.

6.2 Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho se faz como uma introdução aos conhecimentos destas técnicas de espectroscopias. Tais técnicas como expertises poderão ser realizadas com maior aprofundamento técnico e comparações com outros óleos vegetais em uma próxima pesquisa experimental.

Esta pesquisa poderia ser bem mais aproveitada com a implementação dos Conteúdos Espectroscopia no UV e Infravermelho no desenho curricular dos Cursos do IEG, contribuindo e enriquecendo o ensino dos acadêmicos.

6.3 Considerações finais.

Muitos materiais e substâncias são pesquisados por todo tipo de indústrias. Na busca de melhoramento de alguns já existentes e de novas descobertas.

É comum usar o termo absorvência para descrever as características funcionais de um filtro UV/protetor solar. Por isso, quando se pesquisa sobre fotoproteção em geral, nos deparamos com esse termo, talvez até mais do que transmitância, devido a aplicabilidade das propriedades químicas e biológicas encontradas nessas substância, e de interesses nas indústrias que as manipulam.

Assim, por exemplo, testes envolvendo a absorção de um filtro UV são cada vez mais comuns por fabricantes e pesquisadores para medir a fotoestabilidade de um filtro UV sozinho, assim como em combinação com outros filtros e ingredientes são aspectos da espectroscopia do UV-visível e do infravermelho.

Portanto, essas diversidades de aplicações e usos da copaíba e andiroba, tanto pelas populações quanto nas indústrias, cada uma com seus interesses inerentes, nos faz pensar em fazer melhor e com mais eficiência as pesquisas e atividades acadêmicas em benefícios das melhoras, e do uso de produto e subprodutos desses óleos vegetais.

REFERENCIA BIBLIOGRÁFICAS

ARAÚJO, H. A. G. B. de. **Síntese e caracterização de matrizes híbridas para aplicação em sistemas de liberação controlada**. 2015.84 f. Dissertação (Mestrado), Universidade Estadual Paulista- UNESP, Ilha Solteira, 2015.

ALVES, W. F., et al. **Características físico-químicas de óleos essenciais de plantas da Região do Vale do Juruá**. Centro Científico Conhecer, disponível em, DOI: http://dx.doi.org/10.18677/Enciclopedia_Biosfera_2015_107. Acessado em 19/06/2023.

ATKINS, P; PAULA. J.de. **Físico-Química**. V.2. Ed. LTC, Rio de Janeiro, 2004.

BARBOSA, L. C. A. Espectroscopia no infravermelho na caracterização de compostos orgânicos. Viçosa: UFV, 2007.

EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. **Andiroba (Carpa guianensis Aubl.)** Documentos.ISSN 1517-3135, Novembro, 2006

FERREIRA, L.S, et al, **Caracterização de óleos e resinas vegetais da Amazônia por espectroscopia de absorção**. Scientia Plena 13, 012704. 2017.

HALLIDAY, D. ; RESNICK, R.; WALKER, J. **Fundamentos de física**. Volume 3: eletromagnetismo, tradução Ronaldo Sérgio de Biasi. 10 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2022.

FERREIRA, L. dos S. Caracterização do óleoresina de copaíba (Copaifera reticulata) coletado sazonalmente na Floresta Nacional do Tapajós, PARÁ, BRASIL. Dissertação. Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA. Janeiro, 2016.

MIGUEL, L. M. **Uso sustentável da biodiversidade na Amazônia brasileira: experiências atuais e perspectivas das bioindústrias de cosméticos e fitoterápicos**. 2007. 171 f. Dissertação (Mestrado em Geografia) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.

NAGATA, K.M.R; REMÉDIOS, C.M.R., **Espectrofotometria Raman, FTIR E UV-VIS do óleo vegetal de inajá** (Maximiliana Maripa (Aublet) Drude). Dissertação apresentada à Universidade Federal do Oeste do Pará – UFOPA, 2013.

NEWTON, P. et al. Determinantes do rendimento de um produto florestal não madeireiro: oleoresina de Copaifera nas reservas extrativistas amazônicas. *Forest Ecology and Management* 261, 255–264. 2011.

NUNES, E. C. B., **Propriedades Ópticas e Térmicas da Oleína de Palma**. Dissertação de mestrado, DF/UFGA, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará, 2008.

NUSSENZVEIG, Herch M. **Curso de Física Básica**. 3 ed. Editora Blucher. São Paulo 2015.

OLIVEIRA, N. A. de. **Eletromagnetismo: teoria e aplicações**. 1ed. Rio de Janeiro: LTC, 2019.

PAVIA, D. L. **Introduction to Spectroscopy**. 5ed. Cengage Learning, 2014.

PAVANATTI, H. C. **Introdução à tecnologia dos materiais**. Florianópolis: Departamento acadêmico de Metal- Mecânica, IFSC, 2010.

REBEQUE, P. V. S. **Síntese e caracterização elétrica de compósitos poliméricos condutores com poliuretano derivado de óleo de mamona como matriz**. Ilha Solteira: 2011. 90f. Dissertação (Mestrado) - Faculdade de Engenharia- UNESP, Ilha Solteira, 2011.

REGO, R. A. do. **Eletromagnetismo básico**. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

REIS, M. A. R. **Óleo de copaíba: para que serve, como usar e efeitos colaterais**. REVISÃO CLINICA. Fevereiro 2022. Disponível em: <https://www.tuasaude.com/oleo-de-copaiba/#:~:text=O%20%C3%B3leo%20de%20copa%C3%ADba%20%C3%A9,%20analg%C3%A9sicas%20antirreum%C3%A1ticas%20e%20antidiarreicas>. Acessado em: 16/07/2023.

SALA, O. **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho**. São Paulo: Unesp, 1995.

SILVA, E.S et al. **Análise físico-química do óleo-resina e variabilidade genética de copaíba na Floresta Nacional do Tapajós**. Pesq. agropec. bras., Brasília, v.47, n.11, p.1621-1628, nov. 2012.

SILVA, L.R. **Propriedades físico-químicas e perfil dos ácidos graxos do óleo da andiroba**. Nativa, Sinop, v. 6, n. 2, p. 147-152, mar./abr. 2018.

ANEXO 1 - Tabela de Absorções no Infravermelho. Universidade Federal do Rio Grande do Sul Departamento de Química Orgânica. Espectroscopia Orgânica (Profa. Sônia Nachtigall).

TABELA DE ABSORÇÕES NO INFRAVERMELHO

Número de onda, cm^{-1}	Ligação (tipo de vibração)	Observações
3600 - 3400	O-H (estiramento)	<u>Álcoois e fenóis:</u> OH livre: 3650-3500 cm^{-1} (banda aguda). OH associado: 3550-3200 cm^{-1} (banda alargada). <u>Ác. carboxílicos:</u> Banda muito larga entre 3300-2500 cm^{-1} .
3500-3200	N-H (estiramento) Amidas e aminas	NH não associado: 3300 cm^{-1} (aguda). NH associado: 3200 cm^{-1} (alargada). Grupos NH_2 : duas bandas. NH de amina secundária: banda fraca.
3333-3267	C-H de alcino terminal (estiramento)	Banda fina e intensa. Confirmar com estiramento $\text{C}\equiv\text{C}$ em 2260-2100 cm^{-1} .
3100-3000	C-H de C sp^2 (estiramento)	Presente em alcenos e arenos. O ciclopropano também apresentam estiramento CH nessa região. Alcenos de massa molecular alta: banda fraca.
3000-2840	C-H de C sp^3 (estiramento)	Geralmente intensas e múltiplas (estiramento simétrico e assimétrico de grupos CH, CH_2 e CH_3).
2820-2720	C-H (estiramento) aldeídos	Geralmente aparecem 2 bandas de combinação (<i>overtone</i>). Confirmar com banda $\text{C}=\text{O}$ ($\sim 1725 \text{cm}^{-1}$).
2250-2225	$\text{C}=\text{N}$ (estiramento) nitrilas	CN não conjugada: $\sim 2250 \text{cm}^{-1}$; CN conjugada: $\sim 2225 \text{cm}^{-1}$.
2260-2100	$\text{C}=\text{C}$ (estiramento)	Banda moderada em alcinos terminais, fraca ou ausente em alcinos simétricos.
2260-2100	$\text{C}=\text{X}=\text{Y}$ (estiramento)	$\text{C}=\text{C}=\text{O}$ (cetenos) em $\sim 2150 \text{cm}^{-1}$ e $\text{N}=\text{C}=\text{O}$ (isocianatos) em $\sim 2250 \text{cm}^{-1}$: são muito intensas.
2000-1650	Bandas de combinação	Presentes nos anéis aromáticos.
1820-1760	$\text{C}=\text{O}$ (estiramento) anidridos de ácido	Duas bandas que podem mudar de posição por conjugação e se o anidrido for cíclico.
1800	$\text{C}=\text{O}$ (estiramento) cloretos de acila	Podem sair até 1760 cm^{-1} devido à conjugação
1745	$\text{C}=\text{O}$ (estiramento) cetonas cíclicas de 5 membros	Podem sair até 1715 cm^{-1} devido à conjugação
1735	$\text{C}=\text{O}$ (estiramento) ésteres	Podem sair até 1710 cm^{-1} devido à conjugação. Com grupo vinílico ligado ao oxigênio: $\sim 1760 \text{cm}^{-1}$.
1725 e 1715	$\text{C}=\text{O}$ (estiramento)	Bandas de aldeídos e cetonas, respectivamente. A conjugação desloca para menores frequências.
1710	$\text{C}=\text{O}$ (estiramento) ác. carbox. (dímeros)	Ác. carboxílicos não associados: $\sim 1760 \text{cm}^{-1}$. Ânions carboxilato: 1610-1550 cm^{-1} .

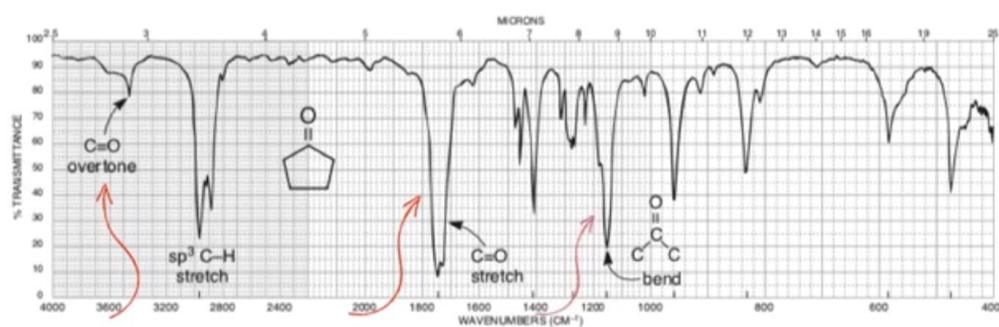
Número de onda, cm^{-1}	Ligação (tipo de vibração)	Observações
1690-1650	C=O (estiramento) amidas	Quando associadas podem deslocar 30-40 cm^{-1} .
1667-1600	C=C (estiramento) alcenos	C=C exocíclica e anel com menos de 6 membros: aumenta a frequência.
1650-1600	NH (deform angular)	Nas amidas, é chamada de Banda II.
1640	C=N (estiramento)	Banda fraca comparada à C=O
1600, 1500 e 1580-1450	C=C (estiramento) anéis aromáticos	Intensidade variável.
1600	NH ₂ (def. angular)	Úteis para identificar aminas e amidas primárias.
1540	NH (def. angular)	Úteis para identificar aminas e amidas secundárias.
1520 e 1350	NO ₂ (estiramento sim. e assimétrico)	Par de bandas normalmente intenso.
1465	CH ₂ (def. angular, tesoura)	CH ₂ C=O : ~1410 cm^{-1} .
1450 e 1375	CH ₃ (def. angular)	A banda de frequência mais baixa é útil para detectar grupos metila. Grupos metila geminais aparecem como um dublete (~1385 e ~1365 cm^{-1}).
1420-1330	OH (deform. angular)	Bandas de pouco valor diagnóstico.
1350-1150	CH ₂ (def. angular, sacudida)	Normalmente fracas.
1260-1000	C-O (estiramento) álcoois, fenóis, éteres	Bandas intensas, geralmente acopladas a C-C, tb chamadas estiramento assimétrico C-C-O ou C-O-C
1050	RSOR' sulfóxidos	Intensa
1330-1140	RSO ₂ R' sulfonas	Dublete intenso
1380-1170	RSO ₃ R' sulfonatos	Dublete intenso
970	RCH=CHR (def. angular)	Útil para distinguir alcenos 1,2-dissubstituídos (E de Z).
890	R ₂ C=CH ₂ (deform angular)	Banda que identifica grupos CH ₂ terminais. Desloca-se de 20-80 cm^{-1} se o metileno estiver ligado a um átomo ou grupo eletronegativo.
840-800	Fenilas para-dissubstituídas	Banda muito forte.
815	R ₂ C=CHR	Ligação dupla trissubstituída.
810-750 725-680	Fenilas meta-dissubstituídas	Uma banda muito forte + uma banda forte
770-690	Fenilas monossubstituídas.	Duas bandas intensas. Solventes clorados podem esconder essas bandas.
770-735	Fenilas orto-dissubstituídas	Uma banda forte
730-675	RCH=CH ₂ , deform. angular (balanço)	Geralmente alargada.

ANEXO 2 – Compostos Carbonílicos: Cetonas. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy.

5ed. Cengage Learning, 2014.

Espectroscopia IV: Compostos carbonílicos

Cetona		
Deformação	Ligação/Grupo	Número de onda (cm ⁻¹)
Axial	C=O	1720 - 1708
Angular	C(O)C	~ 1100

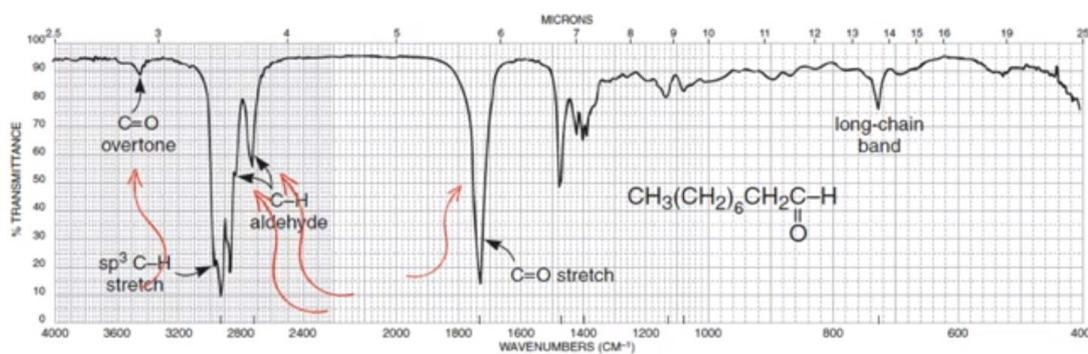


Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. Introduction to spectroscopy, 5 ed., 2015, Cengage Learning

ANEXO 3 – Compostos Carbonílicos: Aldeídos. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. Introduction to Spectroscopy. 5ed. Cengage Learning, 2014.

Espectroscopia IV: Compostos carbonílicos

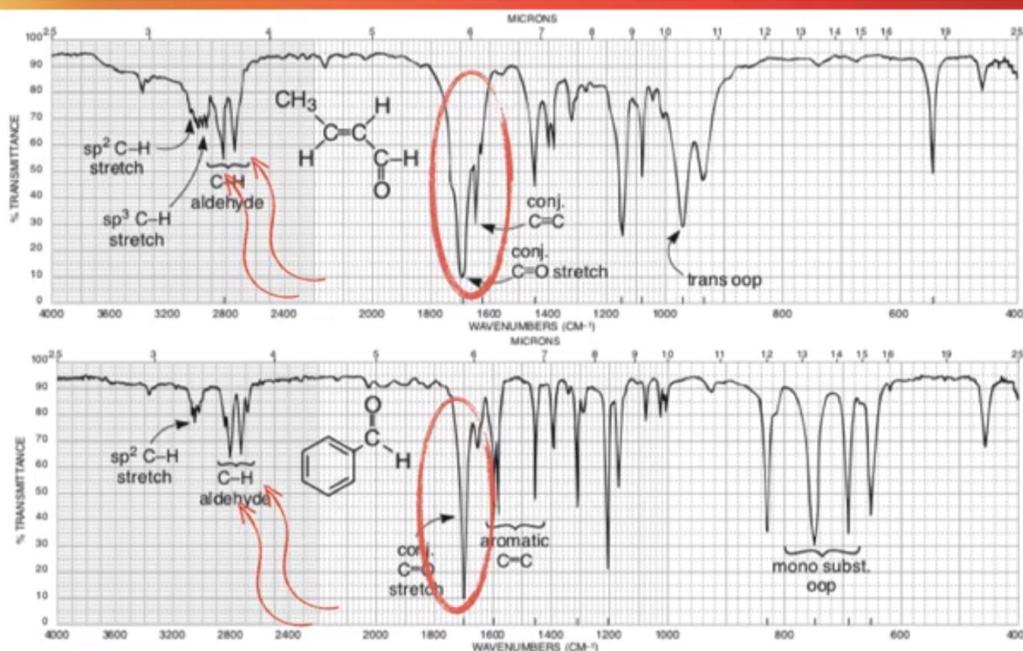
ALDEÍDOS		
Deformação	Ligação/Grupo	Número de onda (cm ⁻¹)
Axial	C=O	~ 1740-1725
Axial	C-H (dublete)	~ 2860-2800 e 2760-2700



Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. Introduction to spectroscopy, 5 ed., 2015, Cengage Learning

ANEXO 4 – Compostos Carbonílicos. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. **Introduction to Spectroscopy**. 5ed. Cengage Learning, 2014.

Espectroscopia IV: Compostos carbonílicos



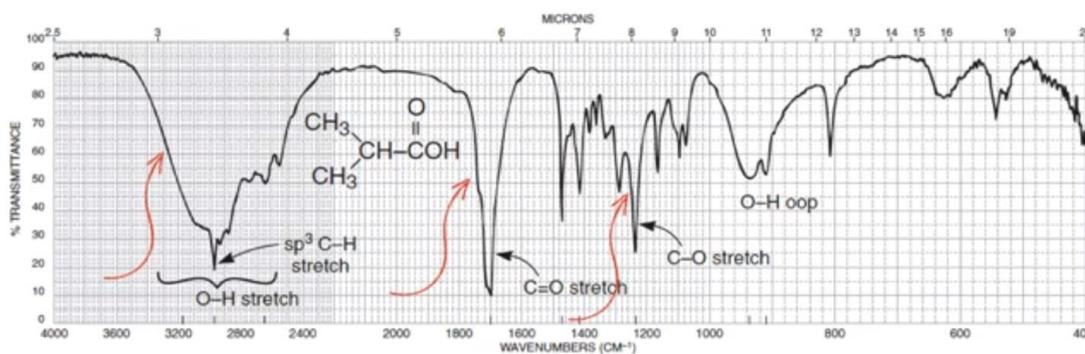
Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. *Introduction to spectroscopy*, 5 ed., 2015, Cengage Learning

ANEXO 5 – Compostos Carbonílicos: Ácido Carboxílico. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. **Introduction to Spectroscopy**. 5ed. Cengage Learning, 2014.

Espectroscopia IV: Compostos carbonílicos

ÁCIDOS CARBOXÍLICOS

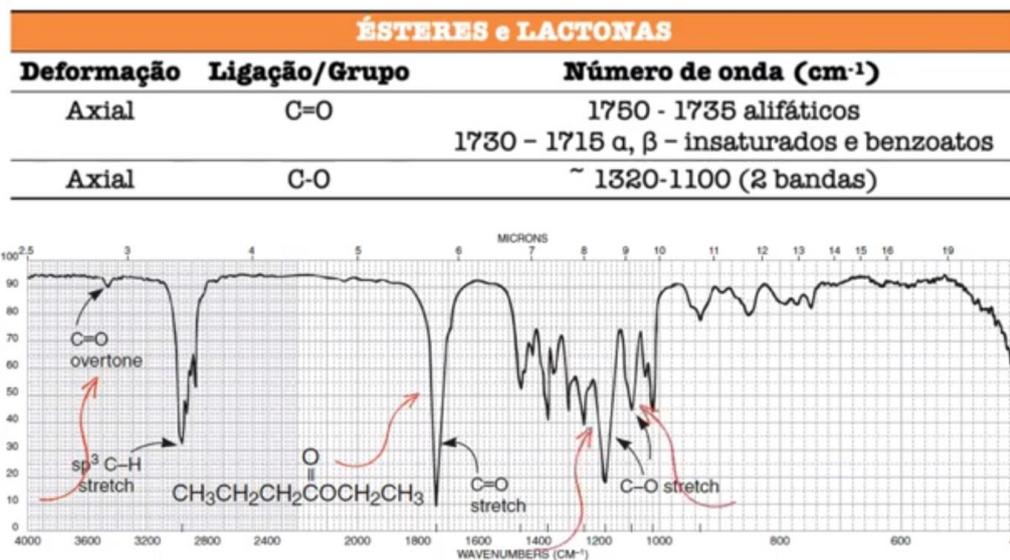
Deformação	Ligação/Grupo	Número de onda (cm ⁻¹)
Axial	O-H	~ 3400-2400 (muito larga)
Axial	C=O	~ 1730-1700
Axial	C-O	~ 1320-1210



Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. Introduction to spectroscopy, 5 ed., 2015, Cengage Learning

ANEXO 6 – Compostos Carbonílicos: Ésteres e Lactonas. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. **Introduction to Spectroscopy**. 5ed. Cengage Learning, 2014.

Espectroscopia IV: Compostos carbonílicos

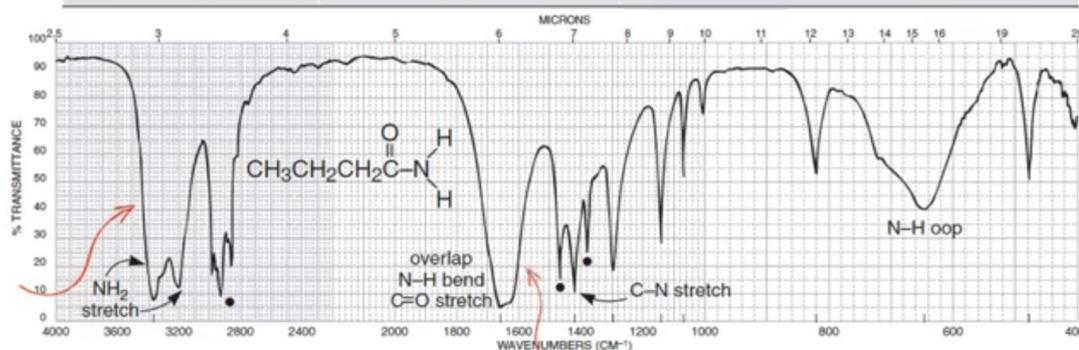


Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. *Introduction to spectroscopy*, 5 ed., 2015, Cengage Learning

ANEXO 7 – Compostos Carbonílicos: Amidas e Lactamas. Bandas de absorção obtidas através da análise de Infravermelho Médio. Adaptado de PAVIA, D. L. **Introduction to Spectroscopy**. 5ed. Cengage Learning, 2014.

Espectroscopia IV: Compostos carbonílicos

AMIDAS E LACTAMAS		
Deformação	Ligação/Grupo	Número de onda (cm ⁻¹)
Axial	C=O	~ 1680-1630
Axial	N-H	primária: ~ 3350 e 3180 secundária: ~ 3300
Angular (amida II)	N-H	~ 1640-1550



Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S.; Vyvyan, J. *Introduction to spectroscopy*, 5 ed., 2015, Cengage Learning