

# Espectro

Paulo Ribeiro Claro

CICECO/ Universidade de Aveiro  
prc@ua.pt

## CITAÇÃO

Claro, P. R. (2018)  
Espectro,  
*Rev. Ciência Elem.*, V6(03):055.  
[doi.org/10.24927/rce2018.055](https://doi.org/10.24927/rce2018.055)

## EDITOR

José Ferreira Gomes,  
Universidade do Porto

## EDITOR CONVIDADO

João Lopes dos Santos,  
Universidade do Porto

## RECEBIDO EM

09 de setembro de 2018

## ACEITE EM

21 de setembro de 2018

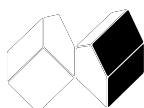
## PUBLICADO EM

04 de outubro de 2018

## COPYRIGHT

© Casa das Ciências 2018.  
Este artigo é de acesso livre,  
distribuído sob licença Creative  
Commons com a designação  
[CC-BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/), que permite  
a utilização e a partilha para fins  
não comerciais, desde que citado  
o autor e a fonte original do artigo.

[rce.casadasciencias.org](http://rce.casadasciencias.org)



Um espectro é uma representação gráfica da magnitude da interação radiação-matéria (*intensidade*) em função da *energia* dessa radiação. (ver artigo “Espectroscopia”)

Assim, o eixo das ordenadas num espectro é sempre indicativo da intensidade do sinal registado no detetor (muitas vezes em unidades arbitrárias e apenas com valor relativo), mas o eixo das abcissas representa qualquer grandeza proporcional à energia.

Por razões históricas e de ordem prática, diferentes tipos de espectroscopia adotaram diferentes representações convencionais, o que pode tornar a comparação entre espectros um pouco confusa. (FIGURA 1)

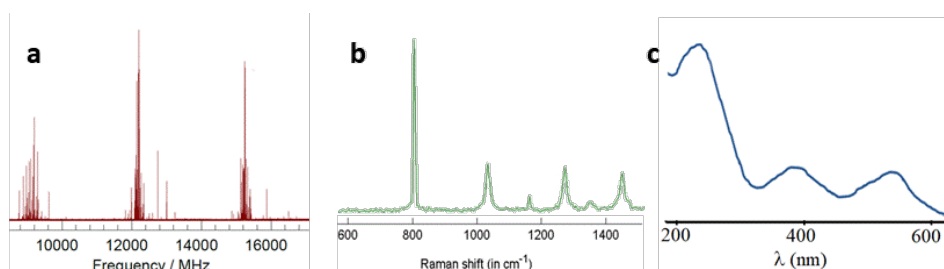


FIGURA 1. A- Espectro rotacional, trifluoriodometano; B- Vibracional, ciclohexano; C- Eletrónico, complexo de crómio (III).

A radiação eletromagnética tem propriedades ondulatórias a que corresponde uma frequência ( $\nu$ ) e um comprimento de onda ( $\lambda$ ). A energia da radiação,  $E$ , é proporcional à sua frequência de acordo com a equação

$$E = h\nu \quad (1)$$

sendo  $h$  um valor constante universal (constante de Planck).

A velocidade da luz,  $c$ , corresponde ao produto da frequência pelo comprimento de onda

$$c = \nu\lambda \quad (2)$$

e o inverso do comprimento de onda é designado por número de onda, com o símbolo  $\tilde{\nu}$

$$\tilde{\nu} = 1/\lambda \quad (3)$$

Das equações (1-3) resulta

$$E = hc/\lambda = hc\tilde{\nu} \quad (4)$$

Deste modo, a representação da energia da radiação de um espectro pode fazer-se com qualquer unidade de energia ( $E$ ), ou qualquer grandeza que lhe seja diretamente proporcional ( $\nu, \tilde{\nu}$ ) ou inversamente proporcional ( $\lambda$ ).

TABELA 1. Grandezas importantes na representação de um espectro e respetivas unidades SI.

Grandeza	Unidade (Sistema Internacional)
Energia, $E$	J (joule)
Frequência, $\nu$	Hz (hertz = inverso de segundo, $s^{-1}$ )
Comprimento de onda, $\lambda$	m (metro)
Número de onda, $\tilde{\nu}$	$m^{-1}$ (inverso de metro)

A variedade de unidades utilizadas na representação de espectros resulta da “tradição” em cada tipo de espectroscopia, que advém frequentemente das características do equipamento de deteção e da tendência natural para escolher números de fácil leitura e representação gráfica (ver TABELA 2).

TABELA 2. Intervalos de valores utilizados na representação de espectros em alguns tipos representativos de espectroscopia.

Espectroscopia	Valores típicos	Energias correspondentes / $\text{kJ mol}^{-1}$
Rotacional	10-10000 GHz	0,004 - 4
Vibracional, infravermelho	400-4000 $\text{cm}^{-1}$	5 - 48
Eletrónica, UV-Vis	200-700 nm	171 - 600
Fotoeletrónica	5-20 eV	480 - 1900

A utilização da energia em joule no eixo das abcissas de um espectro é muito pouco frequente. No entanto, nos casos em que a energia envolvida é elevada – como na espectroscopia eletrónica de alta energia –, é comum a utilização da energia expressa em eletrão-volt, eV.

Tradicionalmente, a espectroscopia de ultravioleta-visível (UV-Vis) utiliza a representação em função do comprimento de onda – o que tem origem histórica no facto de a dispersão da luz num prisma ser proporcional ao comprimento de onda (ver FIGURA 3 do artigo “Espectroscopia” e FIGURA 1C). Como a luz visível tem comprimentos de onda da ordem dos  $10^{-7}$  m, a melhor forma de conseguir números simples, fáceis de ler, é representar o espectro de UV-Vis em nanómetros (nm): tipicamente, o eixo fica entre os 200-700 nm.

Na espectroscopia vibracional, é utilizado quase exclusivamente o número de onda, impropriamente designado por “frequência, em  $\text{cm}^{-1}$ ”. Também aqui, foi a preferência por

números “simples” que determinou o uso do  $\text{cm}^{-1}$  como unidade: deste modo, o chamado infravermelho médio corresponde ao intervalo  $400\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$ . No entanto, quando a energia da radiação já é muito afastada do visível (o chamado infravermelho longínquo), o número de onda é da ordem das dezenas de  $\text{cm}^{-1}$  e é comum a utilização da frequência em Terahertz ( $1\text{ THz} \approx 33\text{ cm}^{-1}$ ). Na espectroscopia de Raman, representa-se o desvio entre a energia da luz incidente e difundida no intervalo  $0\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$  (FIGURA 1B). A título de curiosidade, refira-se que os espectros de difusão inelástica de neutrões são por vezes representados em função da energia dos neutrões, medida em milieletrões-volt, meV.

A convenção para a espectroscopia rotacional é utilizar a grandeza frequência, em gigahertz (GHz, FIGURA 1A) ou, alternativamente, em megahertz (MHz).

A espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) é um caso à parte, porque a separação entre os níveis de energia da amostra depende do campo magnético aplicado pelo espectrómetro – ou seja, não é independente do aparelho de medida, como é no caso dos níveis eletrónicos, vibracionais ou rotacionais. Por esse motivo, não faz sentido referir o valor absoluto da energia absorvida numa transição e em vez disso representa-se o desvio relativo a um composto de referência medido nas mesmas condições. Este desvio é designado por *desvio químico*,  $\delta$ , e representado em partes por milhão, ppm.

Os livros dedicados aos temas de espectroscopia incluem frequentemente uma tabela de conversão entre unidades de “energia”, ou seja, unidades de grandezas diretamente proporcionais à energia (TABELA 2). Esta tabela permite converter rapidamente  $1\text{ cm}^{-1}$  em eV ou  $\text{kJmol}^{-1}$ . O mesmo tipo de conversão pode ser obtido de forma ainda mais eficiente em conversores “on-line”.

TABELA 3. Fatores de conversão entre unidades de grandezas diretamente proporcionais.

	J/mol	eV	$\text{cm}^{-1}$	GHz
J/mol	1	$1.03643 \times 10^{-5}$	$8.35935 \times 10^{-2}$	2.50607
eV	$9.64853 \times 10^4$	1	$8.06554 \times 10^3$	$2.41799 \times 10^5$
$\text{cm}^{-1}$	11.9627	$1.23985 \times 10^{-4}$	1	29.9792
GHz	0.399031	$4.13567 \times 10^{-6}$	0.0333564	1

## BIBLIOGRAFIA

<sup>1</sup> TEIXEIRA DIAS, J. J. C., *Espectroscopia Molecular: Fundamentos, Métodos e Aplicações*, Edição: Fundação Calouste Gulbenkian, 1986, ISBN: 0066000107119

<sup>2</sup> HOLLAS, J. M., *High Resolution Spectroscopy*, Edição: Butterworth-Heinemann, 1982, ISBN: 9780471974215.

<sup>3</sup> CLARO, P.R., [Espectroscopia](#), *Rev. Ciência Elem.*, V5(4):052, 2017.

<sup>4</sup> [Tabela de conversão](#) (acedido em 1 de outubro de 2018).