

Utilização da lei de Lambert-Beer para determinação da concentração de soluções

DOI: 10.30609/JETI.2018-2.5930

Thalita A. Canassa^{1*}, Anna L. Lamonato², Allan V. Ribeiro²

¹ UFMS - Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, Campo Grande, MS – Brasil.

² IFSP – Instituto Federal de São Paulo, Birigui, SP – Brasil.

Resumo

Neste trabalho abordamos a caracterização de soluções de sulfato de cobre II penta-hidratado ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) utilizando a técnica de espectroscopia no UV-Vis. Empregando a Lei de Lambert-Beer, foi possível calcular o coeficiente de extinção molar do CuSO_4 em solução. Este parâmetro é útil para determinações quantitativas de cobre em solução. Os espectros analisados apresentaram uma única banda de absorção centrada em 810 nm e transparência na região correspondente à cor azul no espectro eletromagnético.

Key words: Íons de Cobre, Espectroscopia no UV-Vis, Lei de Lambert-Beer.

1.- Introdução

A técnica de espectroscopia ou espectrofotometria no UV-Vis é uma das técnicas analíticas amplamente difundidas e com grande potencial para diversas aplicações. Dentre as aplicações mais conhecidas podemos citar a determinação da concentração de espécies químicas absorvedoras em solução. Embora esta técnica seja amplamente utilizada nos laboratórios de diferentes áreas de estudo, é comum ainda surgir dúvidas por parte de seus usuários em relação aos princípios envolvidos e a correta utilização da mesma.

A técnica baseia-se na interação da luz com a matéria [1], a Figura 1, ilustra a parte correspondente à faixa do UV-Vis no espectro eletromagnético. O intervalo referente ao UV-Vis corresponde a faixa de comprimento de onda compreendida entre 160 nm à 780 nm, entretanto, equipamentos comerciais usualmente trabalham na faixa de 190 nm à 1100 nm, não envolvendo assim parte do espectro correspondente ao UV e englobando parte do espectro correspondente ao infra-vermelho próximo, maiores detalhes sobre as regiões espectrais podem ser encontrados na literatura [1-3].

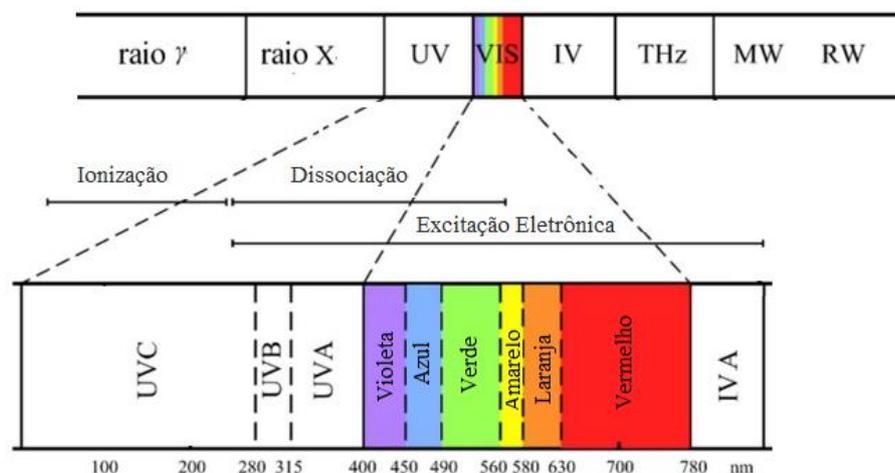


Figura 1: Espectro de radiação eletromagnética evidenciando a faixa correspondente ao ultravioleta e visível (UV-Vis). Adaptado de [1].

O princípio de funcionamento de um espectrômetro no UV-Vis pode ser observado na Figura 2. Usualmente, uma fonte de luz (lâmpada), emite um espectro amplo envolvendo toda faixa de comprimento de onda que o aparelho engloba. O feixe de luz emitido deve passar por dois processos, (i) ter um comprimento de onda selecionado, que incidirá sobre a amostra, e (ii) ter sua intensidade I_0 medida. Um, dos esquemas possíveis, é fazer o feixe passa por uma grade de difração que irá separar os diferentes comprimentos de onda. Em seguida, este feixe incide em um semi-espelho que permite 50% da intensidade da luz

passar e os outros 50% são refletidos e irá incidir sobre a amostra. O feixe que passa direto vai para um detector permitindo a determinação de I_0 para um dado comprimento de onda.

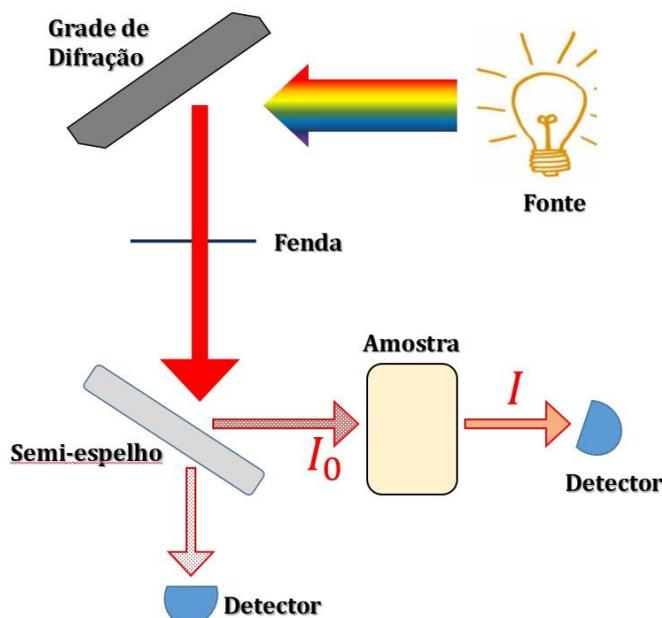


Figura 2: Esquema de funcionamento de um espectrometro de UV-Vis convencional.

Ao incidir sobre a amostra, parte da intensidade do feixe de luz pode ser absorvida pela amostra devido a excitação de elétrons de ligação em moléculas e íons orgânicos, ou ainda alguns ânions inorgânicos [3]. Assim, podemos medir a Transmissão (T) de luz pela amostra pela equação (1).

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (1)$$

Um espectro característico do espectro de UV-Vis pode trazer informações de absorção (Abs) ou transmissão (T) em função do comprimento de onda (λ em nm). A correlação entre Abs e T é descrita de acordo com a equação (2).

$$Abs = \log\left(\frac{1}{T}\right) = \log\left(\frac{I_0}{I}\right) \quad (2)$$

O espectro obtido no UV-Vis é caracterizado como uma banda larga com máximos centrais (tipo funções gaussianas), caracterizando o que é conhecido como bandas de absorção, descritas em termos de sua posição e intensidade. A posição da banda de absorção corresponde ao comprimento de onda da radiação cuja energia é igual à necessária para que ocorra a transição eletrônica. Já a intensidade depende de dois fatores, a probabilidade de

interação entre a energia radiante incidente e o sistema eletrônico, de modo a permitir a passagem de elétrons do estado fundamental a um estado excitado, e a polaridade do estado excitado [1-4].

Este trabalho teve como objetivo investigar as principais características do espectro de absorção do sulfato de cobre II em solução aquosa e preparar uma curva de calibração para determinação das concentrações do mesmo a partir da Lei de Lambert-Beer.

1.1- Descrição da Lei de Lambert-Beer

Consideremos um bloco de material absorvente de luz de dimensões a e b , e com seção transversal S , Figura 3. No volume deste material temos um total de n átomos, íons ou moléculas absorvedoras. Sobre este volume incide uma quantidade de luz I_0 e sai I .

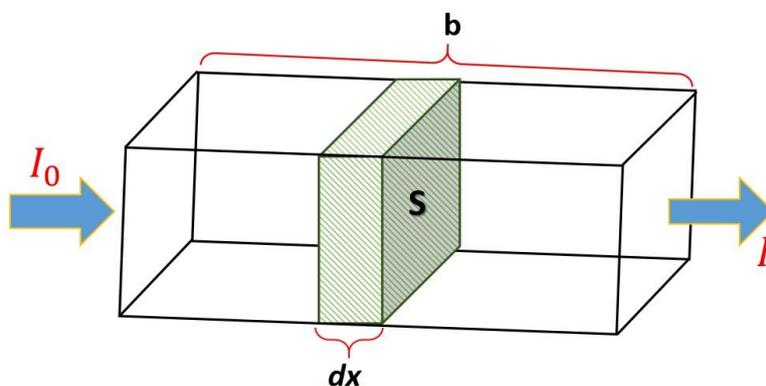


Figura 3: Esquema de luz incidente sobre amostra absorvedora. Seção S contém n espécies absorvedoras.

Na parte rachurada da Figura 3 de seção transversal S e comprimento dx , temos dn espécies absorvedoras, para cada partícula há uma seção de choque na qual ocorrerá a captura de fótons. A razão dS/S representará a probabilidade de captura. A fração absorvida dI_x do feixe I_x que atinge a seção é proporcional ao número de fótons por cm^2 , assim $(-dI_x/I_x)$ é a probabilidade de captura. Logo, podemos escrever a equação (3) abaixo:

$$-\frac{dI_x}{I_x} = \frac{dS}{S} \quad (3)$$

Mas,

$$dS = a \cdot dn \quad (4)$$

assim,

$$-\int_{I_0}^I \frac{dI_x}{I_x} = \int_0^n \frac{a \cdot dn}{S} \quad (5)$$

$$-\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = \frac{a \cdot n}{S} \quad (6)$$

$$\log\left(\frac{I_0}{I}\right) = \frac{a \cdot n}{2,303 \cdot S} \quad (7)$$

Como, $S=V/b$

$$\log\left(\frac{I_0}{I}\right) = \frac{a \cdot n \cdot b}{2,03 \cdot V} \quad (8)$$

Temos que a concentração de espécies pode ser escrita como n/V , e definimos $a/2,303$ como o coeficiente de extinção molar ou absorvidade molar (ϵ). Finalmente, escrevemos a Lei de Beer como:

$$Abs = \epsilon \cdot b \cdot c \quad (9)$$

Onde *Abs* representa o valor da absorção da solução em um dado comprimento de onda, o coeficiente *b* representa o caminho óptico (largura da cubeta que contém a solução, no nosso caso de 10mm), e o termo *c* representa a concentração da espécie absorvedora (cobre) dado em g/mL.

2.- Materiais e Métodos

Neste trabalho foi empregado como analito o Sulfato de Cobre II ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) – PM: 249,69 da Dinâmica Química Ltda (lote: 65815). Soluções em diferentes concentrações (g/mL) de Sulfato de Cobre foram obtidas após a dissolução do reagente em água deionizada à temperatura ambiente sob agitação constante.

As soluções foram caracterizadas com base em seu espectro de absorção óptica na faixa de 250 – 1100 nm, utilizando um espectrômetro da Shimadzu, modelo 1800, em cubeta de quartzo com 1 cm de caminho ótico. O coeficiente de extinção molar ou absorvidade molar (ϵ) foi determinado com base no coeficiente angular do ajuste linear realizado no gráfico de Absorção da solução em 810 nm (ponto de máxima absorção do espectro) versus concentração, utilizando como base a Lei de Beer, descrita pela equação (9).

3.- Resultados

A Figura 4 ilustra as alíquotas da solução de CuSO_4 dissolvidas em água deionizada em diferentes concentrações. Foram preparadas 7 (sete) concentrações distintas no intervalo de 0,02 a 0,08 g/mL, variando em intervalos de 0,01 g/mL. Tais soluções apresentaram uma coloração azulada, o tubo de ensaio número 1 (um), de coloração mais intensa, corresponde à maior concentração. Assim, à medida que a concentração diminui (em direção ao tubo de número sete) a coloração vai se tornando gradualmente menos intensa.

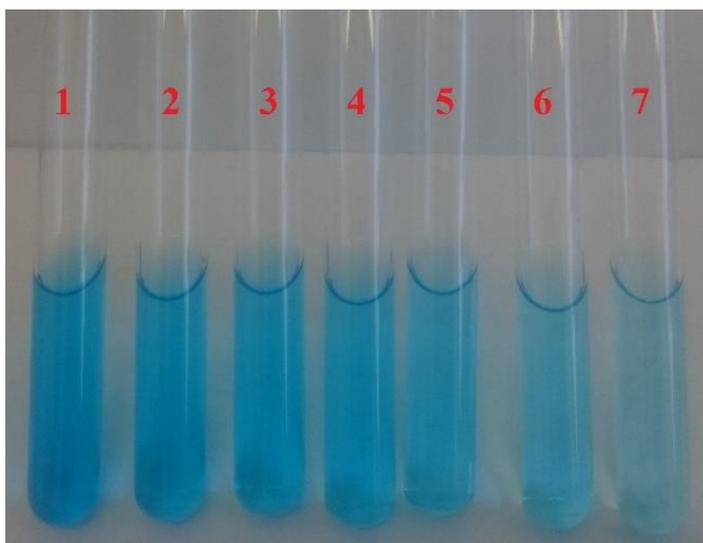


Figura 4: Imagem das soluções de CuSO_4 dissolvidas em água deionizada em diferentes concentrações utilizadas nas caracterizações por espectroscopia no UV-Vis.

Os espectros de absorção no UV-Vis das soluções de CuSO_4 dissolvidas em água deionizada em diferentes concentrações, estão ilustrados na Figura 5. Uma forte banda de absorção centrada em 810 nm e possuindo uma largura de aproximadamente 500 nm foi identificada para a solução. Por outro lado, um corte abrupto na região do ultravioleta (em torno de 300 nm) foi observado. Quando analisamos o espectro de absorção da solução e confrontamos com o espectro ilustrado na Figura 1, a região na qual a solução não absorve (é transparente) - no intervalo aproximado de 300 a 600 nm - corresponde a região do azul no espectro eletromagnético.

Os dados obtidos para a absorção da solução em 810 nm foram analisados em função de suas concentrações e estão graficados na Figura 6. A dependência linear da absorção em função da concentração, como predito pela Lei de Lambert-Beer, foi confirmada pelo ajuste linear (reta em vermelho) realizado com um R^2 de 0,9994. O coeficiente de extinção molar foi calculado a partir do coeficiente angular da reta obtida, em torno de $4,42 \pm 0,03 \text{ mg/m}^2$.

Este valor do coeficiente de extinção molar pode ser utilizado para controle e determinação de soluções com concentrações inicialmente desconhecidas, medindo sua absorção em 810 nm e utilizando a Lei de Lambert-Beer, descrita na pela equação (9).

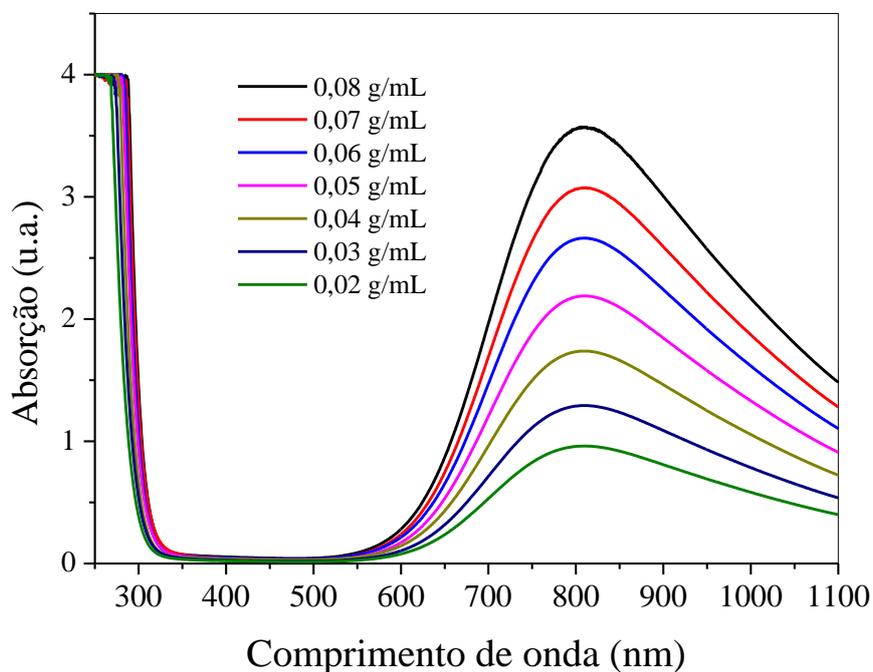


Figura 5: Espectro de absorção no UV-Vis das soluções de CuSO₄ em diferentes concentrações.

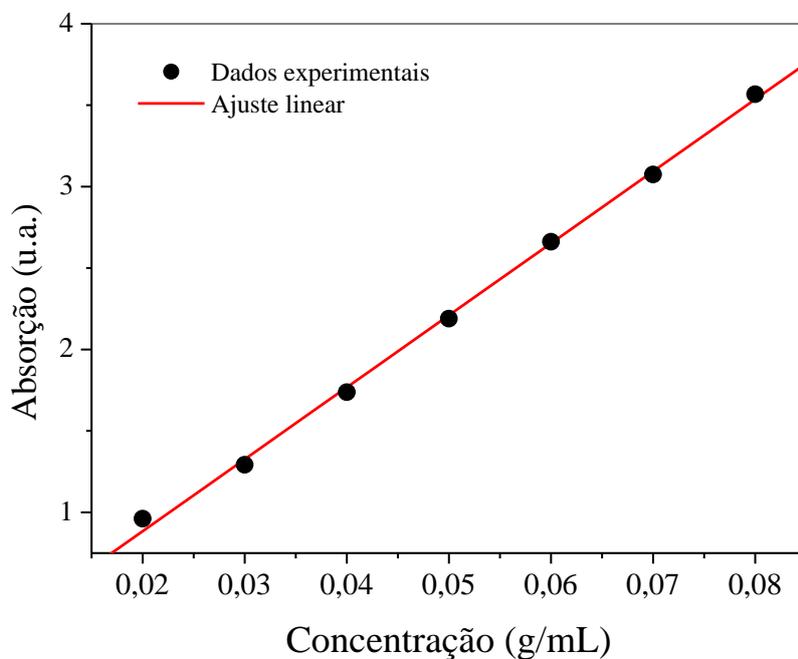


Figura 6: Ajuste linear dos dados experimentais obtidos para a absorção da solução de CuSO₄ registrada em 810 nm em função da concentração.

4.- Conclusões

Os dados obtidos neste estudo revelaram a característica absorvedora dos íons de Cu em solução, a determinação do coeficiente de extinção molar através da Lei de Lambert-Beer possibilita a identificação de íons cobre e determinação de sua concentração em soluções aquosas em caráter analítico, uma vez que é comum a ocorrência destes elementos como contaminantes de águas fluviais.

5.- Bibliografia

- [1] SKOOG, D.A.; LEARY, J.J. Principles of instrumental analysis. Editora Saunders, 1992.
- [2] SILVERSTEIN, R.M. Identificação espectrométrica de compostos orgânicos. Editora Guanabara Koogan, 1979.
- [3] PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S.; VYVYAN, J.R. Introdução à espectroscopia. Cengage Learning, 2016.
- [4] CENA, C.R.; MALMONGE, L.F.; MALMONGE, J.A. Layer-by-layer thin films of polyaniline alternated with natural rubber and their potential application as a chemical sensor. Journal of Polymer Research, v. 24, 2017.