



**Marcos André Pinto  
de Carvalho**

**Caracterização de matérias-primas através da  
espectroscopia de infravermelho por Transformadas  
de Fourier**





**Marcos André Pinto  
de Carvalho**

**Caracterização de matérias-primas através da  
espectroscopia de infravermelho por Transformadas  
de Fourier**

Tese apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Química, ramo dos Recursos Renováveis e Biorrefinarias, realizada sob a orientação científica da Doutora Diana Cláudia Gouveia Alves Pinto, Professora Auxiliar do Departamento de Química da Universidade de Aveiro, e do Eng. Marco Jorge Pedrosa Sebastião, responsável pela Direção Técnica na Mistolin S.A.



## **o júri**

presidente

Prof. Doutor Artur Manuel Soares da Silva  
professor catedrático do Departamento de Química da Universidade de Aveiro

Prof. Doutora Diana Cláudia Gouveia Alves Pinto  
professora auxiliar do Departamento de Química da Universidade de Aveiro

Prof. Doutora Ana Maria Loureiro da Seca  
professora auxiliar do Departamento de Ciências Tecnológicas e  
Desenvolvimento da Universidade dos Açores



## **agradecimentos**

Agradeço à professora Doutora Diana e Eng. Marco Sebastião pela paciência, disponibilidade e orientação prestada. Às senhoras engenheiras da Mistolin<sup>®</sup>, Andreia e Mónica, por todo o carinho, atenção e ajuda que me prestaram enquanto estive (e não) no laboratório. Ao grupinho de almoço e hora do café (Andreia, Ana, Cláudia, Gi e Catarina) pela ajuda na integração, por me terem feito sentir em casa.

Quero agradecer a todas as pessoas e instituições que me fizeram possível este estágio em ambiente empresarial, apesar dos contratemplos foi uma experiência muito enriquecedora e que me ajudou a definir novas metas na minha vida.

Agradeço a todos os meus amigos (em especial ao Ivo, Miguel, Orlando e “Toninho”) que me apoiaram nos momentos mais complicados.

Obviamente o meu maior agradecimento vai para os meus pais, que me têm apoiado incondicionalmente e proporcionado o melhor possível. Nem mesmo nos momentos mais difíceis da nossa vida me deixaram perder a esperança. Sem vós não seria nada. À Filipa por tudo quanto tem feito, por ter estado sempre do meu lado e me ter apoiado a todo o momento, sem ti muito provavelmente não teria tido forças para continuar. Dedico esta dissertação a vós, e em especial aos entes queridos que perdi nestes últimos anos. Espero nunca vos ter desiludido.





**palavras-chave**

Transformadas de Fourier, espectroscopia, FTIR, matérias-primas, detergentes.

**resumo**

Este estágio em ambiente empresarial tem como objetivo principal caracterizar as matérias-primas usadas na Mistolin® através da espectroscopia de infravermelho por Transformadas de Fourier. As matérias-primas foram analisadas no espectrômetro da empresa, com análise em triplicado de diferentes lotes de forma a garantir a exatidão das bandas principais. A análise e tratamento de dados foram efetuados através do software OPUS da Bruker®, e o eFTIR™. Os recursos utilizados para a caracterização dos espectros foram as bases de dados livres (*p.e.* da NIST) e os livros presentes na bibliografia.



**keywords**

Fourier Transforms, spectroscopy, FTIR, raw materials, detergents.

**abstract**

This internship in an enterprise environment aims to characterize, by Fourier transform infrared spectroscopy, the raw materials used by Mistolin®. The raw materials were analysed in the company spectrometer, triplicate analysis of different batches was performed, to ensure the accuracy of the main vibrational bands. In the analysis and data processing the OPUS software from Bruker® and eFTIR™ was used. The resources used to characterize the spectra were free databases (*e.g.* NIST) and the books cited in the bibliography.





# Índice

Índice	i
Abreviaturas	iii
Capítulo I	1
<b>1-Introdução</b>	3
<b>1.1- Detergentes</b>	3
<b>1.2- Mistolin</b>	6
<b>1.2.1- O que é?</b>	6
<b>1.2.2- Os Produtos</b>	8
<b>1.3- Espectroscopia de infravermelho</b>	10
<b>1.3.1- Fundamentos físicos</b>	10
<b>1.3.2- O espectro vibracional</b>	15
<b>1.3.3- O espectrómetro FTIR-ATR</b>	17
Capítulo II	23
<b>2-Objetivos</b>	25
Capítulo III	27
<b>3.1- Constituintes</b>	29
<b>3.2- Tensioativos</b>	30
<b>3.2.1- Tensioativos não-iônicos</b>	30
<b>3.2.2- Tensioativos aniônicos</b>	33
<b>3.2.3- Tensioativos catiónicos</b>	36
<b>3.2.4- Tensioativos anfotéricos</b>	40
<b>3.3- Solventes</b>	42
<b>3.4- Diversos</b>	47
<b>3.5- Quelantes</b>	51

<b>3.6- Perfumes</b>	52
<b>Capítulo IV</b>	55
<b>4- Conclusão</b>	57
<b>Capítulo V</b>	59
<b>5- Procedimento experimental</b>	61
<b>Capítulo VI</b>	63
<b>6- Bibliografia</b>	65
<b>Capítulo VII</b>	67
<b>7- Anexos</b>	69
<b>7.1- Tensioativos não-iônicos</b>	69
<b>7.2- Tensioativos aniônicos</b>	81
<b>7.3- Tensioativos catiónicos</b>	89
<b>7.4- Tensioativos anfotéricos</b>	93
<b>7.5- Solventes</b>	97
<b>7.6- Diversos</b>	105
<b>7.7- Quelantes</b>	135
<b>7.8- Ácidos e Bases</b>	141
<b>7.9- Perfumes</b>	149



## Abreviaturas

<b>a.C.</b>	Antes de Cristo
<b>ABS</b>	Alquilbenzeno sulfonatos
<b>AOS</b>	$\alpha$ -olefino sulfonatos
<b>APG</b>	Alquilpoliglicosídeos
<b>ATR</b>	Reflexão Total Atenuada, do inglês “ <i>Attenuated Total Reflectance</i> ”
<b>BDG</b>	Butil Diglicol
<b>BG</b>	Butilglicol
<b>d.C.</b>	Depois de Cristo
<b>DEA</b>	Dietanolamida de Côco
<b>DPM</b>	Dipropileno glicol éter
<b>EDTA</b>	Ácido etilenodiamino tetra-acético, do inglês “ <i>Ethylenediamine tetraacetic acid</i> ”
<b>FTIR</b>	Espetroscopia de Infravermelho com Transformadas de Fourier, do inglês “ <i>Fourier transform infrared</i> ”
<b>LAS</b>	Alquilbenzeno sulfonatos lineares linear , do inglês “ <i>alkylbenzene sulfonate</i> ”
<b>LES</b>	Lauril éter sulfato de sódio
<b>IPA</b>	Álcool isopropílico, do inglês “ <i>Isopropyl alcohol</i> ”
<b>IV</b>	Infravermelho
<b>MEG</b>	Monoetileno glicol
<b>MES</b>	Metil-éster sulfonato
<b>MPG</b>	Monopropileno glicol
<b>MP</b>	Matéria-prima
<b>PEG</b>	Polietileno glicol
<b>pH</b>	Potencial de hidrogénio
<b>PME</b>	Pequenas e médias empresas
<b>PPG</b>	Polipropileno glicol
<b>NTA</b>	Ácido nitriloacético, do inglês “ <i>Nitrilotriacetic acid</i> ”
<b>TEA</b>	Trietanolamina
<b><math>\delta</math>X-Y</b>	Vibração por deformação da ligação “X-Y”
<b><math>\nu</math>X-Y</b>	Vibração por estiramento da ligação “X-Y”







# **Capítulo I**

## **Introdução**



## 1- Introdução

### 1.1- Detergentes

Desde a antiguidade que a humanidade usa diferentes métodos para tratar da sua higiene e da limpeza dos seus bens materiais. As primeiras provas da utilização de “sabão” datam de 2800 a.C., quando em escavações arqueológicas descobriram-se evidências que um artigo do género era já usado na antiga Suméria na limpeza de lãs.<sup>1,2</sup> O sabão, para além de se espalhar por toda a área da Mesopotâmia, tornou-se mais do que um processo de remoção de sujidades de tecidos, o conceito de limpeza estendeu-se até à religião, onde tanto o povo Hebreu como os antigos Egípcios e Gregos praticavam rituais onde a pureza de espírito era também demonstrada na pureza física dos sacerdotes e dos fiéis (Figura 1).<sup>1</sup>



**Figura 1- Ilustração do processo de limpeza na antiga Grécia.**

No sétimo século d.C. o sabão já era usado em praticamente todo o atual território Europeu, apesar disso a sua tecnologia não evolui muito nos séculos vindouros, a base destes primeiros detergentes era essencialmente sebo, raízes de plantas e algumas cinzas.

Apesar da grande expansão da indústria do sabão durante os séculos dezassete e dezoito, apenas no século vinte é que os detergentes sofreram enormes evoluções, como a produção do primeiro detergente sintético em 1916 na Alemanha, em resposta a diminuta disponibilidade de gorduras durante a Primeira Guerra Mundial.<sup>3</sup> Estes detergentes eram

baseados em sulfonatos de naftaleno com grupos alquila de cadeia curta. Entre a década de 20 e 30, os sabões eram fabricados através da sulfonação de álcoois de cadeia longa, e vendidos como sais de sódio neutralizados.

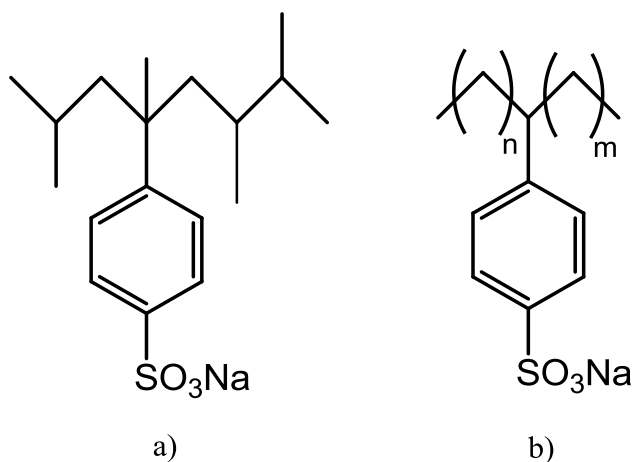
No entanto uma explosão de produtos de higiene ocorre no final da década de 40, devendo-se à investigação química amplamente estimulada pela Segunda Guerra Mundial. Em poucos anos foram desenvolvidos os primeiros detergentes lava loiça, e detergentes de roupa sintéticos. Começou uma era de detergentes sintéticos a preços baixos, e principalmente sintetizados a partir de produtos de origem petrolífera. Estes detergentes eram compostos por sulfonatos com longas cadeias alquílicas e polímeros arílicos, sintetizadas a partir do querosene, que tinham como centro aromático o benzeno.<sup>4</sup>

A década seguinte levou a um aumento gradual na sofisticação dos detergentes, não só pelo aumento de conhecimento na área química, mas também devido à evolução dos utensílios domésticos, como o aparecimento das máquinas de lavar roupa e loiça, dos fornos de limpeza automática, micro-ondas, e que trouxeram outras implicações, como a ação a diferentes temperaturas e diferentes interações mecânicas no processo de limpeza.

Esta evolução do estilo de vida da sociedade levou a que o design dos produtos de higiene e limpeza se tornasse um verdadeiro desafio, já que o detergente deve cumprir as expectativas do consumidor, que por si só têm várias variáveis, como a preferência de aromas, ou a técnica de limpeza, mas também tem o dever de ser eficaz em diversas condições. Por exemplo no caso de um detergente de roupa, este deve lavar vários tipos de tecido (lã, seda, algodão, poliésteres, poliamidas), e diferentes cores sem que as altere, no final é ainda necessário que torne o tecido mais suave e agradável ao tato. O detergente deve ainda ser capaz de remover vários tipos de compostos do tecido, como gorduras, lamas, óxidos metálicos, nódoas de vinho, sangue, entre muitos outros. Para além disso deve ser eficaz em diferentes tipos de pH e de dureza da água, já que estas propriedades diminuem a eficiência dos tensoativos, que são os constituintes mais importantes dos detergentes e são responsáveis pela diminuição da tensão interfacial entre a sujidade e o substrato, fenómeno que promove as ações de limpeza. Todas estas condicionantes de limpeza variam não só de país para país, como de casa para casa. O espectro de tarefas também varia com o tipo de família, sendo que as necessidades de uma família também variam de dia para dia.

Outro desafio que se tornou entretanto evidente foi a necessidade de haver controlo ambiental, já que o volume de matérias-primas de detergentes no meio ambiente aumentou

consideravelmente. Um dos problemas iniciais foi a formação avultada de espumas em águas de superfície, e esgotos devido à existência de derivados de alquilbenzeno sulfonatos (ABS), com estruturas ramificadas que não são biodegradáveis, e se acumularam nas águas durante os anos 50 e 60.<sup>5</sup> Para combater este problema, a indústria química dos anos 60 substituiu os ABS ramificados por alquilbenzeno sulfonatos lineares (LAS) (Figura 2), que tal como o nome indica possuem uma estrutura linear, que permite a sua degradação através de bactérias, prevenindo desta forma a sua acumulação nos meios aquíferos.<sup>4</sup>



**Figura 2- Estrutura do (a) tetrapropileno benzeno sulfonato (ABS ramificado) e do (b) LAS, em que  $n$  e  $m$  são estruturas carbonadas desde 7 a 10 carbonos.**

É por isso importante e necessário compreender qual o impacto dos vários componentes de um detergente no meio ambiente, particularmente nos ambientes aquáticos, reduzir a carga química e passar a usar matérias-primas biodegradáveis, e ambientalmente inertes. Para responder com sucesso a todos estes desafios é essencial compreender não só todas as propriedades das matérias-primas, assim como as potenciais interações que possam ocorrer durante a produção, e após a sua utilização. É importante aproveitar todos os benefícios das interações entre matérias-primas para desenvolver produtos que possuam uma capacidade superior de limpeza, com o recurso à menor quantidade possível de ingredientes ativos. Esta prática não só reduz os custos da formulação, assim como contribui para a diminuição da quantidade de materiais orgânicos que são libertados para o meio ambiente.

## 1.2- Mistolin®

### 1.2.1- O que é?

A Mistolin® surge em 1992 no coração de Vagos (Figura 3), uma nova empresa do sector químico com a ambição de se tornar numa das maiores empresas especializadas na produção de artigos de higiene e limpeza para fins domésticos e profissionais.



**Figura 3- Fábrica da Mistolin® em Vagos.**

No início do ano de 1997 a empresa produzia basicamente lixívia e lava tudo, mas posteriormente alargou a oferta de produtos para fins domésticos com detergentes para a roupa, loiça, sendo que destes o mais notório é o tira-gorduras. Cinco anos depois ocorre uma mudança na gerência da empresa, trazendo consigo novas estratégias de negócio, introduzindo uma maior coesão e rigor na gestão, e uma maior competência profissional. Estas qualidades permitiram que em 2004 a Mistolin® avançasse para um novo desafio, a área profissional (Mistolin® Professional), que se dedica exclusivamente ao negócio B2B (business-to-business), desenvolvendo produtos a pensar nas necessidades específicas de diversas empresas (e não só) de distintos sectores de mercado, como a indústria agroalimentar, escolar, oficinas, lavandarias, restauração, hotelaria, construção, higiene pessoal, entre outros, e apostando no melhoramento e inovação das relações com os parceiros comerciais.

A partir de 2006 a Mistolin<sup>®</sup> apostou na certificação, neste momento são certificados pelas seguintes normas: NP EN ISO 9001:2008 (Sistema da Qualidade), NP EN ISO 14001:2004 (Ambiente), OHAS 18001:2007 (Higiene e segurança no trabalho) e SA 8000:2008 (Responsabilidade Social). E também na aquisição de novos equipamentos, o que levou a um aumento nos padrões de exigência e qualidade dos produtos. Todas estas apostas por parte da nova gerência traduziram-se num crescimento gradual das vendas.

No ano 2008 a empresa aposta numa nova área de negócio, a Mistolin<sup>®</sup> Serviços (Figura 4), que se dedica a dar resposta às necessidades dos clientes do sector profissional. E numa nova imagem institucional, sustentando novas ideias de marketing e reforçando o investimento na investigação e desenvolvimento de melhores soluções para cada produto, de forma a marcar a diferença no mercado para a restante concorrência.



**Figura 4- Logótipos das três áreas da Mistolin<sup>®</sup>.**

Atualmente a empresa encontra-se num processo de modernização e internacionalização, através do desenvolvimento de parcerias com algumas empresas (nativas ao país de exportação) que não sendo concorrenciais, têm em vista o mesmo mercado. Neste momento 35% da produção destina-se ao mercado nacional doméstico, e 30% à área profissional, sendo a restante fatia destinada quase exclusivamente às exportações para Espanha, França, Bélgica, Holanda, Luxemburgo, Suíça, Marrocos, Angola, Cabo Verde e Moçambique. No entanto estão já em vista novos mercados alvo como

Polónia, Argélia, Arábia Saudita, China e Brasil, sendo que alguns destes destinos já se encontram com avanços no processo.

No final de 2012 a gestão rigorosa de recursos aplicada permitiu à empresa uma faturação de 9,1 milhões de euros, e com este crescimento o controlo de custos aumentou, de forma que 95% das embalagens utilizadas são agora produzidas na própria fábrica, com a aplicação de processos ecológicos. Todos estes fatores e certificações levaram a empresa a revalidar em 2012 o seu título como PME líder (segundo ano consecutivo).

### 1.2.2- Os Produtos

A produção ocorre entre os 10 800 m<sup>2</sup> da fábrica (atualmente em crescimento), onde milhões de embalagens são preenchidas, dando origem a cerca de 900 toneladas de produtos por mês, que tornam a Mistolin<sup>®</sup> na maior empresa portuguesa com produtos de marca própria e na maior empresa com fabrico de detergentes para uso profissional.

O variado leque de produtos divide-se por duas áreas, a área doméstica e a área profissional (já referida anteriormente).

A área doméstica dedica-se ao fabrico de produtos práticos, que vão de encontro às expectativas de qualidade, segurança e eficiência dos consumidores, conciliando também um preço económico e tecnologias amigas do meio ambiente.

Estes produtos são especificamente direcionados para a utilização em higiene pessoal, roupa, cozinhas, casas de banho, diversas superfícies das residências e automóveis.



**Figura 5-** As sete marcas próprias da Mistolin<sup>®</sup>.

A empresa é representada nesta área por sete marcas próprias (Figura 5), mas também através de linhas brancas produzidas para marcas de distribuidor. Sendo a formulação dos



produtos (Figura 6) pensada de forma a garantir a melhor funcionalidade a preço competitivo.



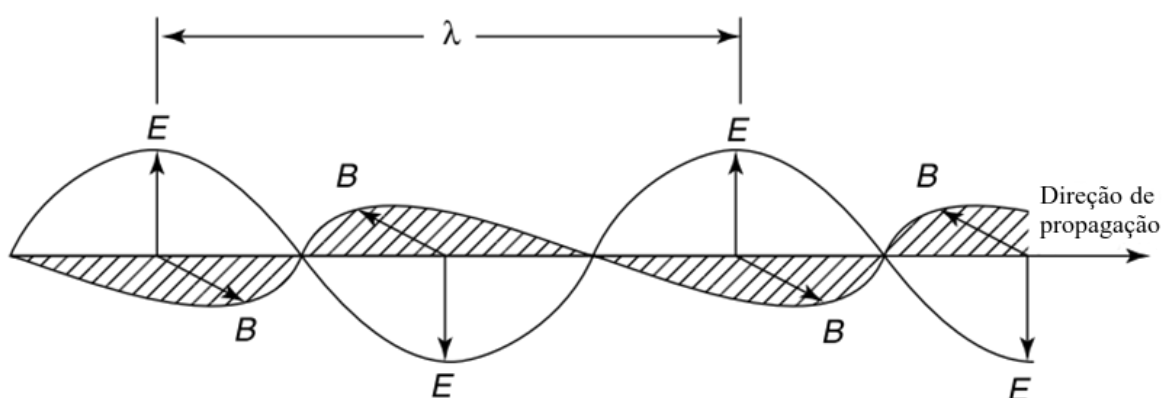
**Figura 6- Alguns produtos das variadas gamas da marca Mistolin®.**

Nesta tese serão caracterizadas as matérias-primas que dão origem a estas formulações. Esta caracterização será efetuada com recurso à espectroscopia IV, utilizando o espectrómetro da empresa.

### 1.3- Espectroscopia de infravermelho

#### 1.3.1- Fundamentos físicos

A espectroscopia tem como princípio o estudo da interação da radiação eletromagnética com a matéria. A radiação eletromagnética é caracterizada pela alternância de dois campos em fase e mutuamente perpendiculares, o campo elétrico e o campo magnético. Estes campos foram descritos classicamente por Maxwell como ondas sinusoidais (Figura 7).



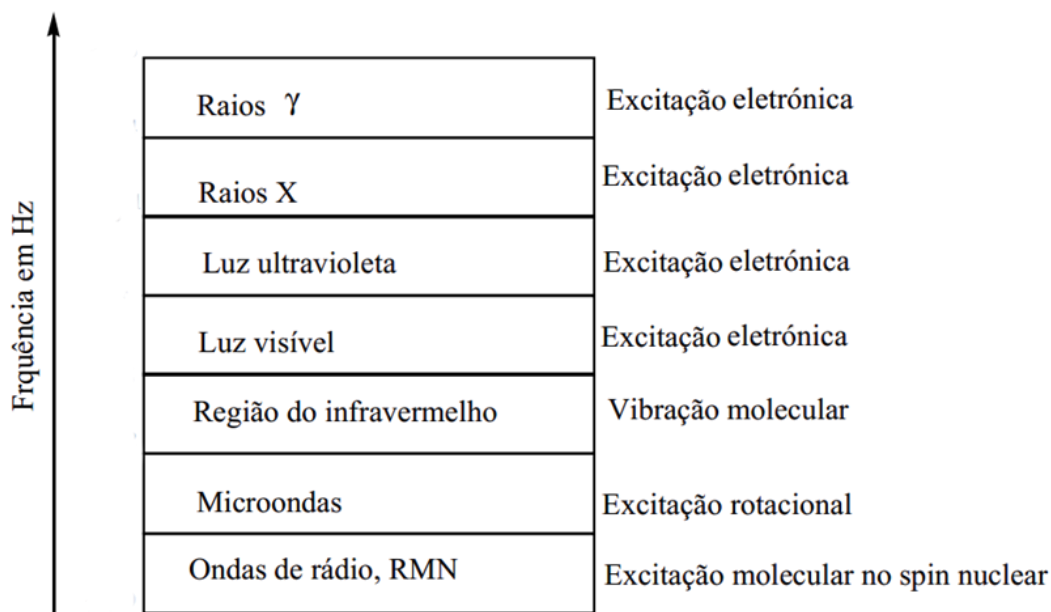
**Figura 7-** Esquema representativo da radiação eletromagnética, onde **E** e **B** representam a magnitude dos vetores elétrico e magnético.

A radiação eletromagnética varia energeticamente com a sua frequência segundo a equação 1:

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

E é dividida em várias regiões, desde os potentes raios gama, até às baixas frequências das ondas rádio. Cada tipo de radiação interage de diferentes formas com a matéria em função da energia que é absorvida pelos diferentes elementos moleculares, provocando diferentes alterações físicas (Figura 8).

No espectro eletromagnético, os infravermelhos abrangem a região entre os 14,000  $\text{cm}^{-1}$  até 10  $\text{cm}^{-1}$ .



**Figura 8- Espectro eletromagnético, e as suas interações ao nível molecular.**

E possui a energia necessária para provocar transições entre diferentes estados vibracionais das moléculas. A região do infravermelho subdivide-se em três regiões (Tabela 1), e a região do infravermelho médio é muito usada na química orgânica devido a ser a amplitude do espectro eletromagnético onde ocorre interação com grande parte dos grupos funcionais dos compostos orgânicos.<sup>6</sup>

**Tabela 1- Regiões espectrais do infravermelho.**

Região	Intervalo de número de onda, $\text{cm}^{-1}$
Próximo	14000 - 4000
Médio	4000 - 400
Longínquo	400 - 10

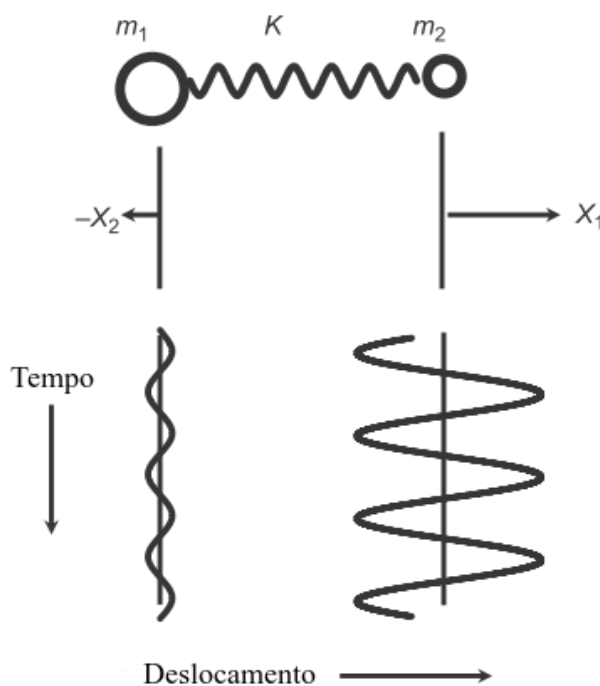
Esta interação da radiação com as moléculas pode ser descrita em termos de ressonância, onde uma determinada radiação possui uma frequência que corresponde à frequência de uma particular oscilação de uma ligação molecular.

Para que um fóton de infravermelhos seja absorvido pela molécula, é necessário que haja uma alteração no momento dipolar de um determinado tipo de vibração molecular, ou seja, uma diferença na distribuição de carga ao longo da ligação, que resulta na formação de um campo elétrico oscilante. As características físicas deste campo elétrico definem qual a energia do fóton que é absorvido.<sup>7</sup>

Para moléculas diatômicas homonucleares, gases nobres, assim como vibrações onde não ocorre indução de momento dipolar, não são ativas em IV e por isso não podem ser caracterizadas por este tipo de espectroscopia.<sup>8</sup>

As frequências das vibrações moleculares dependem da massa dos átomos, da geometria molecular e da força das ligações químicas. Apesar de muito redutor, a adaptação do modelo físico de um oscilador harmônico às vibrações moleculares simplifica a percepção destas propriedades.

Se considerarmos uma molécula diatômica heteronuclear como duas esferas de diferente massa conectadas por uma mola (sem massa e em constante oscilação), cada esfera desloca-se em torno de uma posição de equilíbrio, e devido à inércia a sua amplitude é inversamente proporcional à massa, o que permite que o centro de massa se mantenha estático (Figura 9).



**Figura 9- Deslocamento atômico em torno da ligação química com força  $K$ ,  $m_1$  e  $m_2$  são átomos de diferentes massas e por isso apresentam deslocamentos diferentes.**

Neste modelo a frequência de vibração para uma molécula diatômica é dada pela equação 2.

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{K \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)} \quad (2)$$

Onde  $K$  é a constante de força da mola, que neste modelo clássico reproduz a força de ligação molecular, e  $m_1$  e  $m_2$  são as massas das esferas (os átomos). Esta aproximação simplista permite-nos observar que para um oscilador diatômico a frequência depende da constante de força (aumenta com a força de ligação), e depende da massa dos átomos envolvidos na vibração (diminui com o aumento da massa do átomo). No entanto, uma parábola simétrica baseada na lei de Hooke, não é a função que melhor caracteriza a variação de energia potencial em relação à distância internuclear.

Atualmente a mecânica quântica é a teoria que nos permite uma caracterização mais completa e exata das interações moleculares. Segundo a mecânica quântica sabemos que as moléculas existem em estados quantizados de energia, dessa forma a energia vibracional não varia de forma contínua, mas sim através de estados discretos de energia, caracterizados por um número quântico  $\nu$  (em que  $\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$ ), segundo a equação 3:

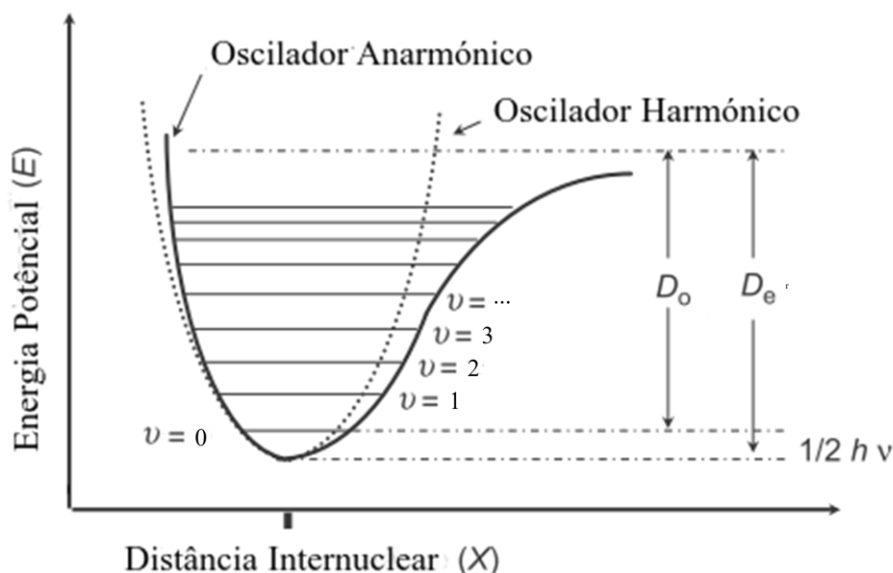
$$E_\nu = h\nu \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

A variação da energia potencial em função da distância internuclear apresenta um comportamento díspar antes, e após o seu valor mínimo. Na prática a variação da energia potencial de uma molécula diatômica apresenta anarmonicidade, e é descrita através da função potencial de Morse:

$$E_\nu = h\nu \left( \nu + \frac{1}{2} \right) + h\nu\chi \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (4)$$

Onde  $\chi$  representa a constante de anarmonicidade.

A separação entre níveis energéticos adjacentes torna-se cada vez menor quanto maior o valor do nível vibracional, até que por fim é atingido o valor da energia de dissociação molecular ( $D_0$ ) (Figura 10).

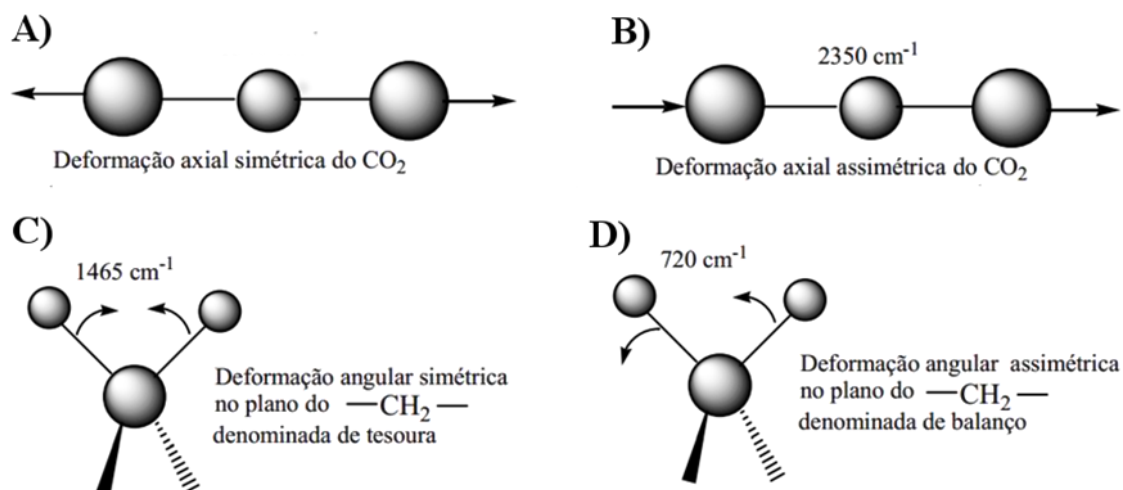


**Figura 10- Comparação do diagrama de energia potencial de um oscilador anarmônico e harmônico.  $D_0$  representa a energia necessária para quebra da ligação, e  $D_e$  a energia potencial mínima.**

Num oscilador harmônico apenas transições para níveis adjacentes são permitidas, ou seja, transições fundamentais ( $\Delta v = \pm 1$ , modos normais de vibração). O número máximo de modos normais de vibração de uma molécula é determinado através do número total de átomos ( $N$ ) dessa mesma molécula. Considerando que os átomos movem-se livremente nas coordenadas cartesianas, obtemos  $3N$  graus de liberdade. Contudo existem certas combinações de movimentos que resultam em rotações e translações da molécula, ou seja, não resultam em qualquer oscilação molecular (porque os átomos movem-se como um todo). Por essa razão numa molécula linear é espectável  $3N-5$  modos normais de vibração, e para uma molécula não linear  $3N-6$  modos normais de vibração. No entanto, algumas vibrações podem degenerar, *i.e.* podem ter a mesma frequência, ou ser inativas no IV (Figura 11).

Das vibrações podem resultar dois tipos de processos físicos, a alteração da distância de ligação (estiramento ou alongação), ou alteração do ângulo de ligação (deformação ou flexão). As vibrações resultantes da alongação da ligação de um determinado grupo funcional ocorrem a frequências superiores às de deformação do respectivo grupo, e isto deve-

se à maior exigência energética no processo de alongação da ligação. Quando átomos de diferentes ligações moleculares estão suficientemente próximos pode ocorrer acoplamento, resultando duas diferentes vibrações de acoplamento, as vibrações simétricas e assimétricas, onde podemos observar alguns exemplos na Figura 11.



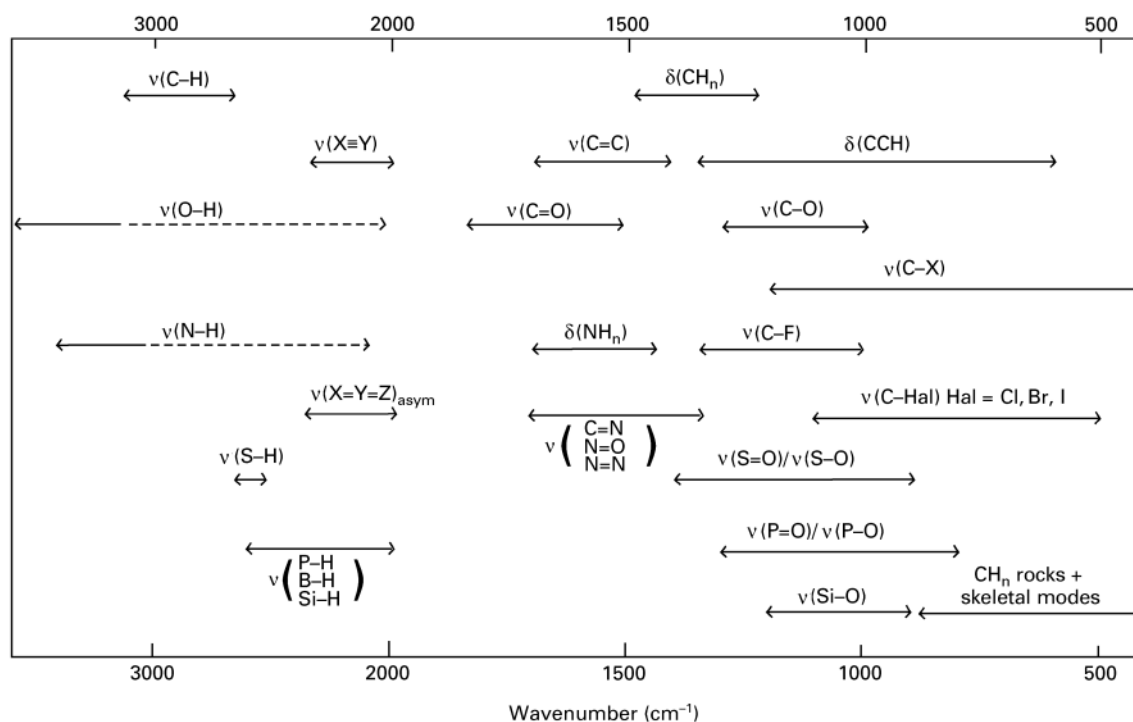
**Figura 11- Alguns tipos de vibrações moleculares. As vibrações B), C) e D) ocorrem quando há absorção de IV. A vibração A) não provoca uma alteração no momento dipolar, e por isso é inativa em IV, ou seja, não é detetada por IV.**

Como na realidade as moléculas comportam-se como um oscilador anarmónico, outras transições, como os sobretons ( $\Delta v = \pm 2, 3, \dots$ ), as bandas de combinação ( $\Delta v = v_i + v_j$ , onde  $v_i$  e  $v_j$  são diferentes modos de vibração) e a ressonância de Fermi (acoplamento entre uma vibração fundamental e uma outra vibração de combinação ou sobreton) também ocorrem, este tipo de transições para além de serem menos prováveis que as transições fundamentais, ocorrem com menor intensidade.<sup>8-10</sup>

### 1.3.2- O espectro vibracional

Várias bandas de absorção são facilmente reconhecidas devido à sua forma e à sua frequência, e correspondem a grupos funcionais da amostra. Toda a informação relativa às bandas características foi compilada por vários cientistas ao longo de várias décadas, e atualmente têm sido corrigidas e comprovadas através de modelos matemáticos (teoria de

grupos),<sup>7</sup> dando origem às várias tabelas de correlação. Na Figura 12 está representada uma tabela simples de correlação de algumas vibrações de grupos funcionais.



**Figura 12- Tabela de correlação que representa as bandas de absorção de algumas ligações químicas.**

Nos espectros de IV médio encontramos essencialmente duas regiões. A primeira entre os 4000 e os 1600  $\text{cm}^{-1}$ , onde encontramos distintas bandas resultantes (na sua maioria) do estiramento de ligações químicas. A segunda (designada de região de “fingerprint”) que se estende desde os 1600 até aos 400  $\text{cm}^{-1}$ , é uma região densamente ocupada por bandas de deformação alifática, estiramento de haletos, sulfatos, fosfatos, entre outras como as resultantes do acoplamento de várias vibrações do “esqueleto” molecular. Através das tabelas de correlação a identificação dos grupos funcionais de uma substância torna-se mais simples, e a presença de um ou vários grupos funcionais é mais rapidamente identificada pela existência (ou não) das suas bandas características.

Cada molécula apresenta uma estrutura particular, portanto o seu espectro é também único. O espectro de IV é como um bilhete de identidade da molécula, e considerando que a molécula não é um elemento isolado, o ambiente químico apresenta fatores que influenciam as suas vibrações fundamentais. As interações intermoleculares, como as pontes de hidrogénio, diminuem as frequências de estiramento de grupos em que estão envolvidas (*p.e.*



$\nu_{\text{N-H}}$ ,  $\nu_{\text{C=O}}$ , onde  $\nu$  identifica a vibração como vibração por estiramento). Contudo as vibrações por deformação (*p.e.*  $\delta_{\text{N-H}}$ , onde  $\delta$  identifica a vibração como vibração por deformação) sofrem um desvio para frequências superiores devido ao facto de as pontes de hidrogénio serem lineares.<sup>7</sup>

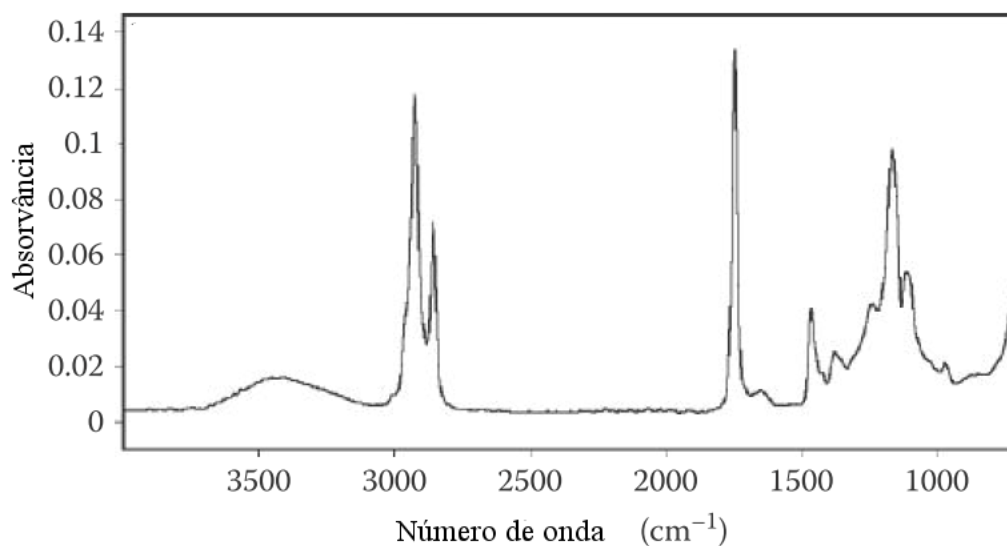
Outros fatores intrínsecos à molécula como o efeito indutivo ou mesomérico de substituintes adjacentes ao grupo funcional também afetam a frequência de vibração.

Quando um grupo carbonilo possui um hidrogénio ligado ao carbono (aldeído), o oxigénio sendo um elemento eletronegativo atrai elétrons e diminui a densidade eletrónica (força) da ligação o que diminui a frequência de  $\nu_{\text{C=O}}$ , em relação *p.e.* a um grupo carbonilo de uma cetona. Quando o hidrogénio é substituído *p.e.* pelo elemento cloro (elemento muito eletronegativo), a polaridade da ligação C=O é reduzida (devido à atração eletrónica provocada pelo cloro), aumentando o caracterr da ligação dupla, o que leva a um aumento na frequência de  $\nu_{\text{C=O}}$ . Estes exemplos são representativos do efeito indutivo.

O efeito mesomérico (ou de ressonância) baseia-se no facto de existirem grupos com elétrons não ligantes que os doam provocando um rearranjo estrutural e consequentemente uma alteração na densidade eletrónica das ligações. Utilizando novamente o exemplo do grupo carbonilo, quando este se encontra ligado a um átomo de azoto, oxigénio, ou mesmo cloro, os elétrons não ligantes destes elementos podem provocar um rearranjo doar elétrons ao oxigénio do grupo carbonilo. Este processo diminui a força de ligação e consequentemente a frequência de  $\nu_{\text{C=O}}$ . No caso do elemento cloro, o efeito dominante é o indutivo, no entanto nas amidas este é o efeito predominante e por essa razão verificamos que a frequência de  $\nu_{\text{C=O}}$  das amidas é menor que nas cetonas e aldeídos.<sup>9</sup>

### 1.3.3- O espectrómetro FTIR-ATR

As análises por IV são possíveis graças ao espectrómetro de IVs, o conceito base destes aparelhos consiste na emissão de radiação IV para uma amostra onde ocorre a absorção de determinadas bandas energéticas, que são detetadas e registadas. Essa absorção é impressa no espetro, que não é mais que o registo da quantidade de energia absorvida (ou emitida) a cada valor de número de onda do espetro eletromagnético (Figura 13).<sup>8</sup>

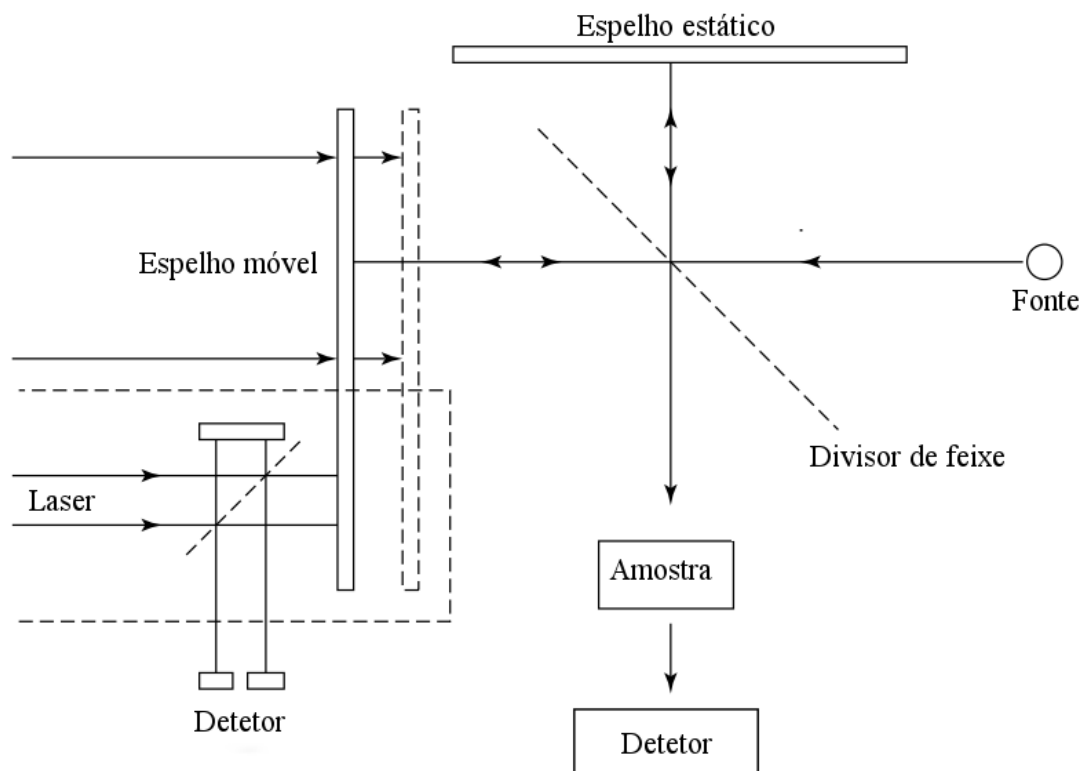


**Figura 13- Espectro típico da espectroscopia de infravermelho.**

O espectrómetro de IVs é comercializado desde os anos 40, nessa altura recorria a prismas como elemento de dispersão da radiação, este sistema foi substituído nos anos 50 pelas redes de difração, no entanto o maior avanço na espectroscopia IV ocorreu aquando da introdução do espectrómetro por Transformadas de Fourier. Este tipo de instrumento tira partido do processo matemático homónimo e de um engenhoso sistema mecânico, o interferómetro.

O interferómetro mais comum neste tipo de aparelhos é o interferómetro de Michelson (Figura 14), e consiste em dois espelhos perpendiculares entre si (em que um é estático e o outro é móvel) e um divisor de feixe que bissecta o plano dos dois espelhos. Assim que a fonte emite radiação, esta é direcionada para o divisor de feixe, onde metade da radiação é transmitida para o espelho móvel, e a restante é refletida para o espelho fixo. Nos espelhos as partes da radiação são refletidas de novo para o divisor de feixe e recombinadas. Como o espelho móvel produz uma diferença de percurso ótico (mensurado por laser), os dois feixes irão interferir construtivamente ou destrutivamente conforme a diferença de percurso.

O resultado será um padrão de interferência, denominado de interferograma, que consiste na soma dos vários comprimentos de onda e intensidades em relação ao percurso ótico. Após passagem pela amostra e chegada ao detetor, o domínio de distância é convertido computacionalmente em frequência recorrendo ao método matemático das transformadas de Fourier.



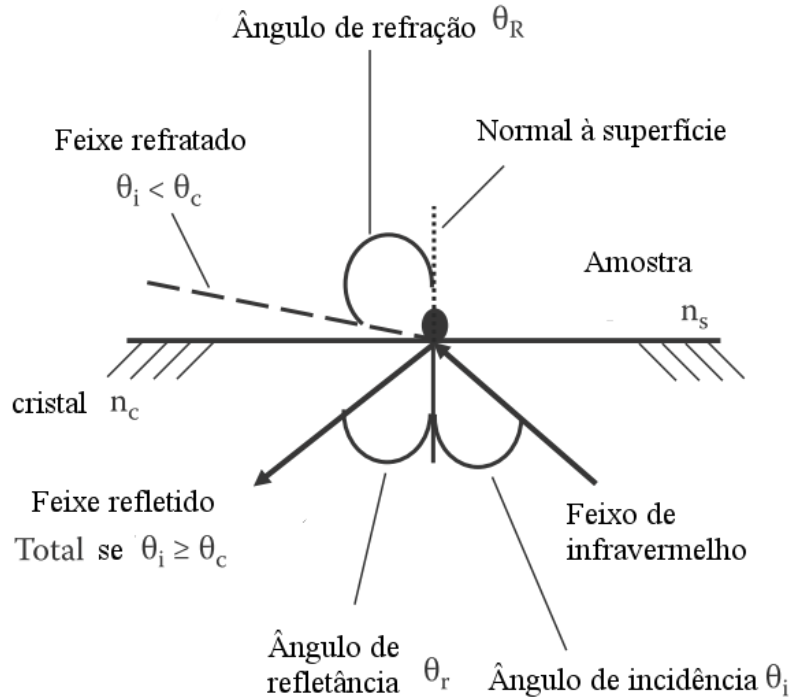
**Figura 14- Representação de um interferômetro de Michelson.**

A espectroscopia FTIR veio aumentar dramaticamente a qualidade e minimizar substancialmente o tempo de obtenção dos espectros.

Neste trabalho irá ser utilizada a espectroscopia por FTIR-ATR, esta técnica baseia-se na reflexão interna. Neste sistema a amostra é colocada sobre um cristal e a fonte de infravermelhos percorre o cristal (com um ângulo  $\theta_i$ ), que possui um determinado índice de refração  $n_c$ , e incide sobre a amostra (que possui um outro índice de refração  $n_s$ ). Quando o ângulo de incidência  $\theta_i$  é baixo, alguma radiação será refratada para fora do cristal.

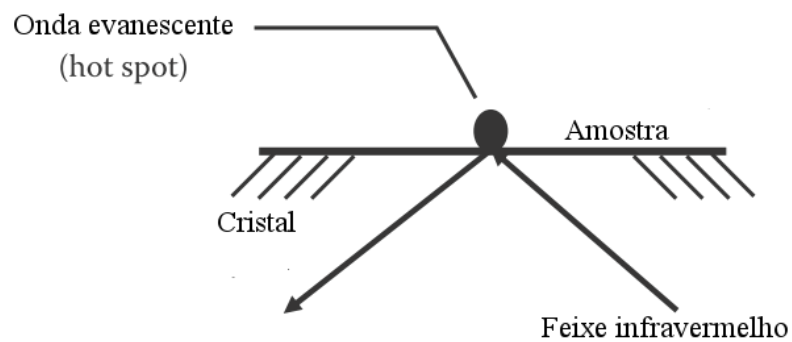
O ângulo de refração  $\theta_R$ , é o ângulo que o feixe refratado faz com a superfície do cristal. Quanto maior o  $\theta_i$ , maior será o  $\theta_R$ , de forma que perante um determinado  $\theta_i$ , o ângulo  $\theta_R$  será  $90^\circ$ , e o feixe de infravermelhos não escapa do cristal, ocorrendo uma refletância total (Figura 15). O ângulo mínimo de incidência para que tal ocorra denomina-se de ângulo crítico ( $\theta_c$ ) e é calculado pela equação 5. A refletância total ocorre para todos os valores superiores a  $\theta_c$ ,<sup>10</sup> e depende dos índices de refração do cristal e da amostra segundo a equação:

$$\theta_c = \sin^{-1}(n_s/n_c) \quad (5)$$



**Figura 15- Processos óticos que ocorrem quando um feixe de infravermelhos percorre um cristal com elevado índice refrativo, e encontra a amostra, que possui um menor índice refrativo.**

Desta refletância total resulta o fenómeno de evanescência (Figura 16), onde ocorre uma projeção de radiação infravermelha acima da superfície do cristal (na ordem das dezenas de  $\mu\text{m}$ ) que interage com a amostra.



**Figura 16- Formação da onda de evanescência, quando se atinge o ângulo crítico.**

Consequentemente, nas regiões do espectro onde a amostra absorve, ou seja, nas frequências de radiação que são absorvidas pelas ligações químicas da amostra, haverá uma

alteração nas ondas evanescentes,<sup>10</sup> que por sua vez afetará o feixe refletido que é direcionado para o detetor, onde se produz o interferograma e posteriormente o espectro IV.





## **Capítulo II**

### **Objetivos**





## 2- Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é a caracterização de toda a gama de MPs da empresa, recorrendo à espectroscopia por FTIR-ATR. Como já referido, a espectroscopia de IV é uma ferramenta muito útil e prática para a identificação de grupos funcionais químicos. Desta forma a empresa fica com uma informação sólida sobre determinadas características das MPs que utiliza na produção dos diferentes produtos que disponibiliza aos consumidores e empresas.

A caracterização será feita com recurso às várias tabelas de correlação encontradas na bibliografia e comparando (quando possível) com bases de dados. Não havendo muito material de consulta disponível, estaremos a construir uma nova “base de dados” para a empresa.

Adicionalmente serão também efetuadas algumas caracterizações de produtos finais, ou seja, verificar se é possível observar uma relação entre o espectro das MPs e o espectro do produto e assim testar a nova “base de dados”.





## **Capítulo III**

### **Discussão**



Este capítulo dedica-se à análise e caracterização de algumas matérias-primas, escolhidas de forma a identificar e explicar a atribuição das várias bandas características. Os dados de caracterização relativos às restantes matérias-primas (espetros e tabelas de correlação) encontram-se no capítulo VI.

### 3.1- Constituintes

Como já referido os detergentes são produtos complexos, sendo a sua constituição muito variada. No entanto os constituintes dos detergentes podem ser divididos por grupos conforme a sua aplicação no processo de limpeza. Neste trabalho será usada a divisão indicada pela própria empresa (ácidos e bases, corantes, diversos, perfumes, quelantes, solventes e tensioativos).

Em cada um destes grupos existem determinadas bandas correspondentes a grupos funcionais que são mais ou menos espectáveis.

Por exemplo, para o grupo dos tensioativos possuímos várias subdivisões em anfotéricos, aniónicos, catiónicos e não-iónicos. Todos eles têm uma propriedade em comum, o carácter anfipático das moléculas, que resulta da existência na sua estrutura de uma parte hidrofóbica e uma parte hidrofílica. A parte hidrofóbica da molécula é geralmente uma cadeia de hidrocarbonetos e por isso vibrações devido a  $\nu\text{C-H}$ ,  $\nu\text{C-C}$ ,  $\delta\text{C-H}$ ,  $\delta\text{C-C}$  são espectáveis. No entanto existem também tensioativos com outros grupos hidrofóbicos, *p.e.* polidimetilsiloxanos, neste caso é espectável bandas devido a  $\nu\text{C-Si}$ ,  $\nu\text{Si-O}$ ,  $\nu\text{Si-O-Si}$ .

A parte hidrofílica da molécula é o que distingue as diferentes subclasses de tensioativos. Os tensioativos não iónicos são compostos que não possuem carga em solução. Alguns dos grupos funcionais que conferem o carácter hidrofílico a esta subclasse são *p.e.* grupos éter ( $\nu\text{C-O-C}$ ,  $\nu\text{C-O}$ ) e éster ( $\nu\text{C=O}$ ,  $\nu\text{C-O}$ ). Já para os tensioativos catiónicos as aminas são os grupos funcionais mais abundantes, e por isso são espectáveis as vibrações  $\nu\text{N-H}$  e  $\nu\text{C-N}$ .

## 3.2- Tensioativos

### 3.2.1-Tensioativos não-iônicos

Os tensioativos não iônicos são compostos que não possuem carga em solução. Os principais compostos encontrados neste grupo de tensioativos são os éteres, álcoois, os alquilpoliglicosídeos (APG), e as alcanolamidas.<sup>1</sup>

O Antarox<sup>®</sup> FM33 é um tensioativo não-iônico com base num álcool etoxilado e propoxilado de cadeia longa (C<sub>10</sub>-C<sub>12</sub>). Podemos identificar no espectro (Figura 17) a presença do grupo hidroxilo através da banda de baixa intensidade a ~3470 cm<sup>-1</sup>, que corresponde à vibração νO-H. A ~1349 cm<sup>-1</sup> verifica-se uma banda que corresponde à vibração δO-H fora do plano. A banda de νC-O encontra-se a ~1250cm<sup>-1</sup>.

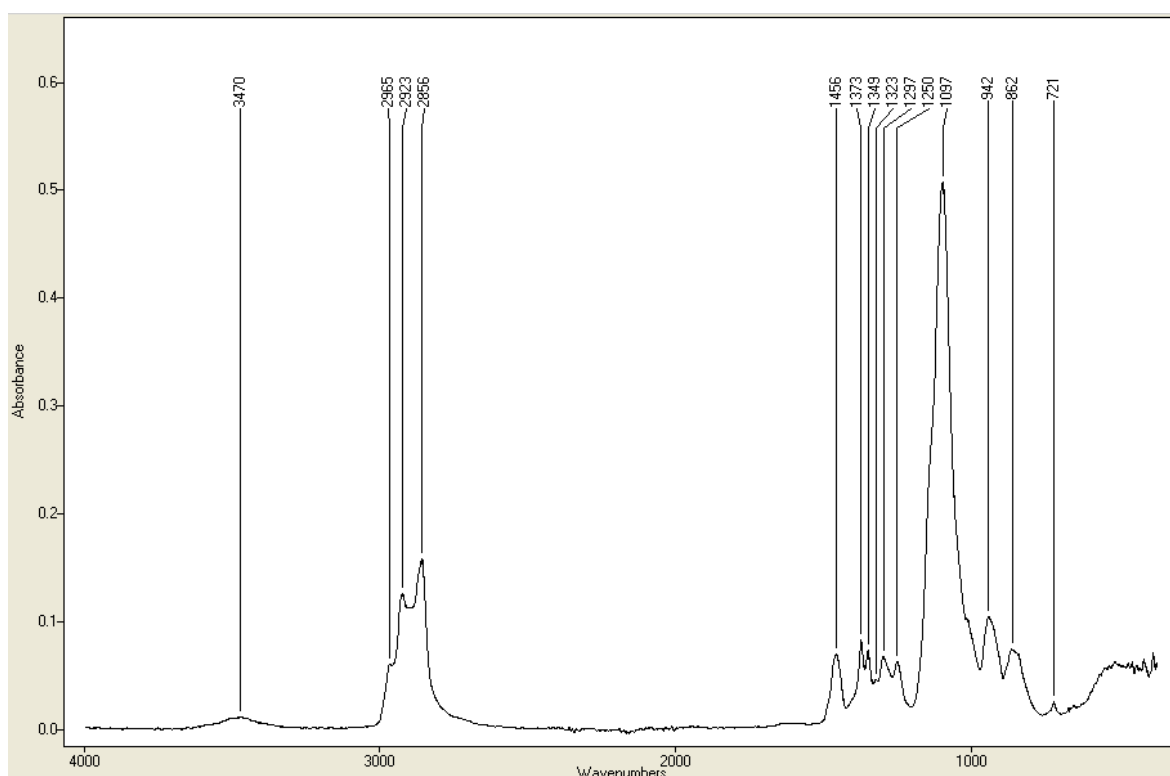


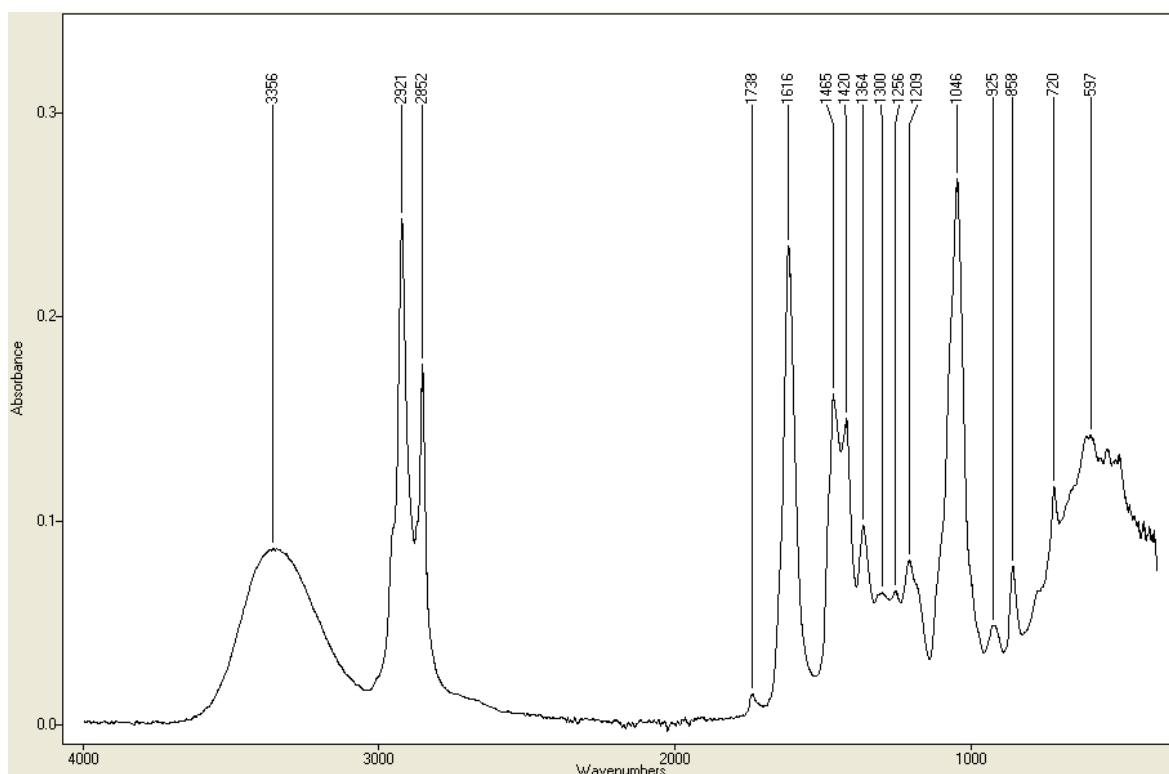
Figura 17- Espectro relativo ao Antarox<sup>®</sup> FM33.

A cadeia carbonada deste composto é identificada pelas bandas de νC-H assimétrico (para o grupo metilo a ~2965 cm<sup>-1</sup>, e para grupos metilénicos a ~2923 cm<sup>-1</sup>), simétrico (CH<sub>3</sub>/CH<sub>2</sub> ~2856 cm<sup>-1</sup>). E pelas bandas de vibração δC-H do tipo “tesoura” (~1456 cm<sup>-1</sup>),

“oscilação” ( $\sim 1373\text{ cm}^{-1}$ ), e “torção” ( $\sim 1295\text{ cm}^{-1}$ ), sendo a vibração de torção a  $\sim 721\text{ cm}^{-1}$  característica de cadeias carbonadas longas ( $C_n$ , quando  $n > 3$ ).<sup>8</sup>

As ligações relativas aos grupos funcionais éter são evidenciadas pelas vibrações de  $\nu C-O-C$  assimétrico a  $\sim 1097\text{ cm}^{-1}$ , e simétrico a  $\sim 863\text{ cm}^{-1}$ .

A Dietanolamida de Coco (DEA) é uma dialcanolamida, a sua estrutura apresenta uma cadeia carbonada longa identificada no espectro (Figura 18) pelas bandas de  $\nu C-H$  assimétrico (a  $\sim 2921\text{ cm}^{-1}$ ), simétrico ( $\sim 2852\text{ cm}^{-1}$ ) dos grupos metilénicos. Outras bandas como as da  $\delta C-H$  do tipo “tesoura” ( $\sim 1465\text{ cm}^{-1}$ ), “oscilação” ( $\sim 1364\text{ cm}^{-1}$ ), e “torção” ( $\sim 1301\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 720\text{ cm}^{-1}$ ) são vibrações da mesma parte da molécula, o que comprova a presença da cadeia carbonada apolar na MP.

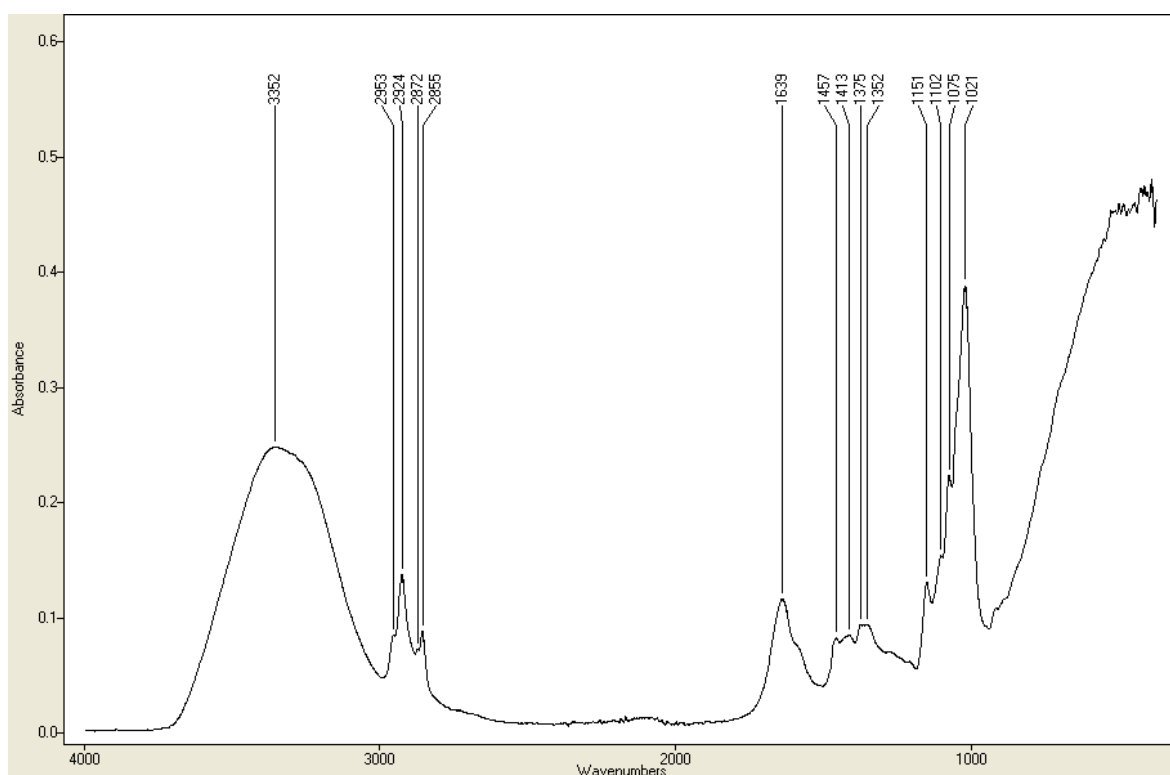


**Figura 18- Espectro da DEA.**

Sendo este composto uma amida terciária, verificamos ausência das bandas de  $\nu N-H$  e da amida II ( $\delta N-H$ ), no entanto a banda característica da amida I ( $\nu C=O$ ) está presente ( $\sim 1616\text{ cm}^{-1}$ ), assim como a banda de  $\nu C-N$  ( $\sim 1420\text{ cm}^{-1}$ ). Ligado a este grupo estão dois álcoois primários, identificados pelas bandas correspondentes à vibração  $\nu O-H$  ( $\sim 3356\text{ cm}^{-1}$

<sup>1</sup>),  $\delta$ O-H no plano ( $\sim 1364 \text{ cm}^{-1}$ ),  $\delta$ O-H fora do plano ( $610 \text{ cm}^{-1}$ ), e as bandas de  $\nu$ C-O assimétrico ( $\sim 1046 \text{ cm}^{-1}$ ) e simétrico ( $\sim 858 \text{ cm}^{-1}$ ).

O Glucopton<sup>®</sup> 215 UP pertence à família dos APGs, o que significa que é constituído por glucose com uma cadeia alifática ligada ao carbono anomérico, formando um acetal. Esta MP apresenta uma cadeia alifática longa ( $\text{C}_{8-10}$ ), e as bandas características de  $\nu$ C-H assimétrico ( $\sim 2954 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 2923 \text{ cm}^{-1}$ ) e simétrico ( $\sim 2872 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 2855 \text{ cm}^{-1}$ ) dos grupos metilo e metilénico, assim como as bandas de  $\delta$ C-H do tipo “tesoura” ( $\sim 1457 \text{ cm}^{-1}$ ) e “oscilação” ( $\sim 1375 \text{ cm}^{-1}$ ) estão presentes (Figura 19).



**Figura 19-** Espetro relativo ao Glucopton<sup>®</sup> 215 UP, onde se verifica a presença dominante das bandas características da água.

A  $\sim 3352 \text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 1352 \text{ cm}^{-1}$  verificam-se as bandas correspondentes às vibrações  $\nu$ O-H e  $\delta$ O-H dos grupos hidroxilo da piranose, mas também da água (no caso de  $\nu$ O-H), já que a  $\sim 1639 \text{ cm}^{-1}$  comparece a banda relativa à vibração  $\delta$ H-O-H.

As bandas correspondentes às várias vibrações da estrutura piranosídica encontram-se no intervalo compreendido entre os  $1200 - 1000 \text{ cm}^{-1}$ , estas bandas correspondem às vibrações das ligações C-O-H e C-O-C ( $\nu$ C-O).<sup>7</sup> Outras bandas relativas à estrutura



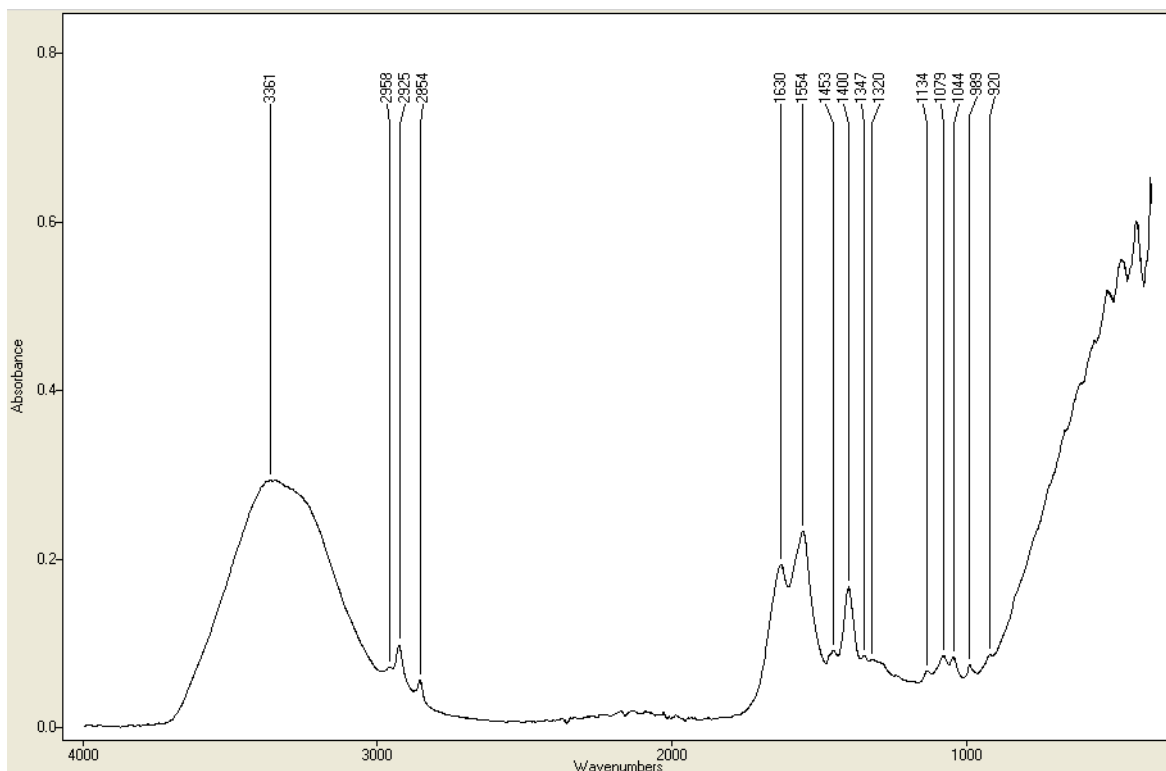
piranosídica seriam espectáveis ( $\sim 950-800\text{ cm}^{-1}$ ),<sup>7</sup> no entanto a presença da banda larga relativa às vibrações características da água ocultam-nas.

Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes tensioativos não iónicos da empresa encontram-se nos anexos.

### 3.2.2- Tensioativos aniónicos

Nos tensioativos aniónicos, tal como o nome indica, a parte hidrofílica possui uma carga negativa. Esta carga negativa deve-se normalmente à presença de grupos carboxilato, sulfato, sulfonato ou fosfato.

O Protelan<sup>®</sup> AGL 95 é um composto baseado em glutamato (de sódio) funcionalizado com uma amida alifática de cadeia longa (C<sub>11</sub>). Analisando o seu espectro (Figura 20) podemos verificar que se trata de composto bastante diluído, sendo as bandas típicas da água proeminentes em todo o espectro ( $\sim 3360\text{ cm}^{-1}$   $\nu\text{O-H}$ ,  $\sim 1630\text{ cm}^{-1}$   $\delta\text{H-O-H}$ ,  $\sim 900-400\text{ cm}^{-1}$   $\delta\text{O-H}$ ), o que torna difícil a visualização de várias bandas típicas do composto. Contudo é possível observar as bandas de  $\nu\text{C-H}$  assimétrico e simétrico dos grupos metilo ( $\sim 2958\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 2872\text{ cm}^{-1}$  respetivamente) e metilénico ( $\sim 2925\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 2854\text{ cm}^{-1}$  respetivamente) relativas à cadeia alifática.

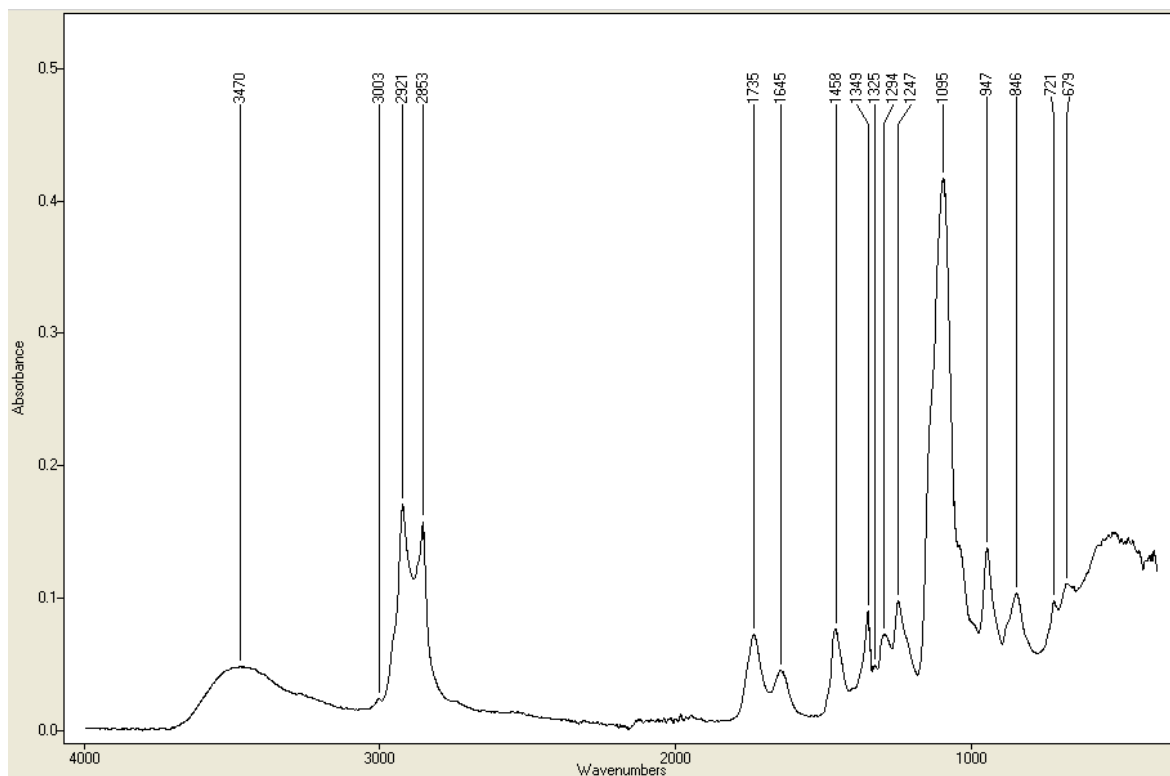


**Figura 20- Espectro do Protelan® AGL 95.**

As bandas correspondentes à amida primária podem estar dissimuladas por entre as bandas  $\nu$ O-H e  $\delta$ H-O-H correspondentes à água, nesses locais seriam também de se esperar as bandas de  $\nu$ N-H, Amida I (correspondente ao acoplamento das bandas  $\nu$ C=O e  $\delta$ N-H) e Amida II (correspondente à vibração  $\delta$ N-H).<sup>8</sup>

Neste espectro a inexistência de uma banda forte a  $\sim 1730\text{ cm}^{-1}$  confirmam a ausência do grupo funcional carbonilo,<sup>7,8</sup> relativo aos ácidos carboxílicos. Porém, e como espectável, a presença de duas bandas relativamente fortes a  $\sim 1554\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 1400\text{ cm}^{-1}$  confirmam a presença de sais de ácidos, correspondente à  $\nu\text{CO}_2^-$  assimétrica e simétrica do glutamato de sódio.<sup>8</sup>

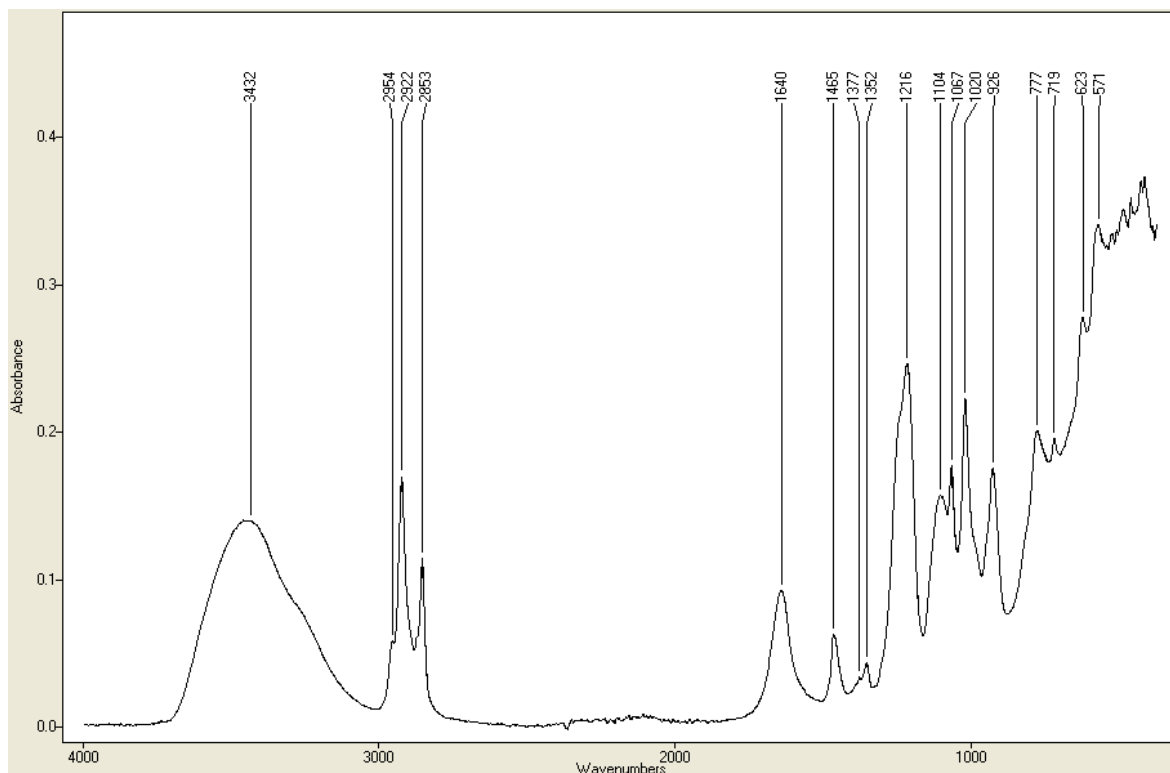
O Akypo® RO 90 VG é um ácido alquil-étercarboxílico, o seu espectro (Figura 21) confirma a presença do grupo carbonilo relativo ao ácido carboxílico através da banda larga (mas ténue) entre  $3600\text{-}2500\text{ cm}^{-1}$  correspondente ao  $\nu$ O-H, e da banda forte a  $\sim 1735\text{ cm}^{-1}$  que se deve à  $\nu$ C=O. No espectro a banda mais intensa localiza-se a  $\sim 1095\text{ cm}^{-1}$  e corresponde à  $\nu$ C-O-C assimétrica relativa a grupos éter.



**Figura 21- Espectro relativo ao Akypo® RO 90 VG.**

Esta matéria-prima é constituída por uma cadeia alifática longa ( $C_{16/18}$ ), que segundo o espectro apresenta pelo menos uma insaturação devido à banda a  $\sim 3003\text{ cm}^{-1}$  que corresponde à  $\nu\text{C-H}$  assimétrico de grupos metínicos, assim como a banda a  $\sim 1645\text{ cm}^{-1}$  onde poderá haver contribuições relativas à vibração  $\nu\text{C=C}$  e para além da  $\delta\text{H-O-H}$ . As bandas a  $\sim 2921\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 2853\text{ cm}^{-1}$  identificam as  $\nu\text{C-H}$  assimétrico e simétrico dos grupos metilénicos. As vibrações relativas ao grupo metílico são vestigiais, e as suas bandas assimétricas e simétricas apresentam-se a  $\sim 2952\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 2968\text{ cm}^{-1}$ . A  $\delta\text{C-H}$  do tipo “tesoura” e “torção” encontram-se a  $\sim 1458\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 1294\text{ cm}^{-1}$ , respetivamente. E como esperado, a banda relativa à  $\delta\text{C-H}$  de cadeias alifáticas longas está presente a  $721\text{ cm}^{-1}$ .

O lauril éter sulfato de sódio (LES) apresenta uma cadeia alifática saturada longa ( $C_{12}$ ). E como previsto, as bandas características das  $\nu\text{C-H}$  assimétrico e simétrico dos grupos metilo ( $\sim 2954\text{ cm}^{-1}$  e a vestigial banda a  $\sim 2873\text{ cm}^{-1}$ ) e metilénicos ( $\sim 2922\text{ cm}^{-1}$  e  $2853\text{ cm}^{-1}$ ) estão presentes (Figura 22). A  $\delta\text{C-H}$  a  $\sim 719\text{ cm}^{-1}$  confirma a existência da longa cadeia alifática. Assim como a banda da  $\delta\text{C-H}$  do tipo “tesoura” a  $\sim 1465\text{ cm}^{-1}$  e da banda de baixa intensidade relativa à  $\delta\text{C-H}$  do tipo “oscilação” a  $\sim 1377\text{ cm}^{-1}$ .



**Figura 22- Espectro do LES.**

A  $\sim 1104 \text{ cm}^{-1}$  verifica-se uma banda relativa à  $\nu\text{C-O-C}$  assimétrico dos grupos funcionais éter. A  $\sim 1216 \text{ cm}^{-1}$  verifica-se uma banda de grande intensidade correspondente à  $\nu\text{SO}_2$  assimétrico e a  $\sim 1067 \text{ cm}^{-1}$  a respetiva vibração simétrica característica de sais de sulfatos alquílicos primários.<sup>8</sup>

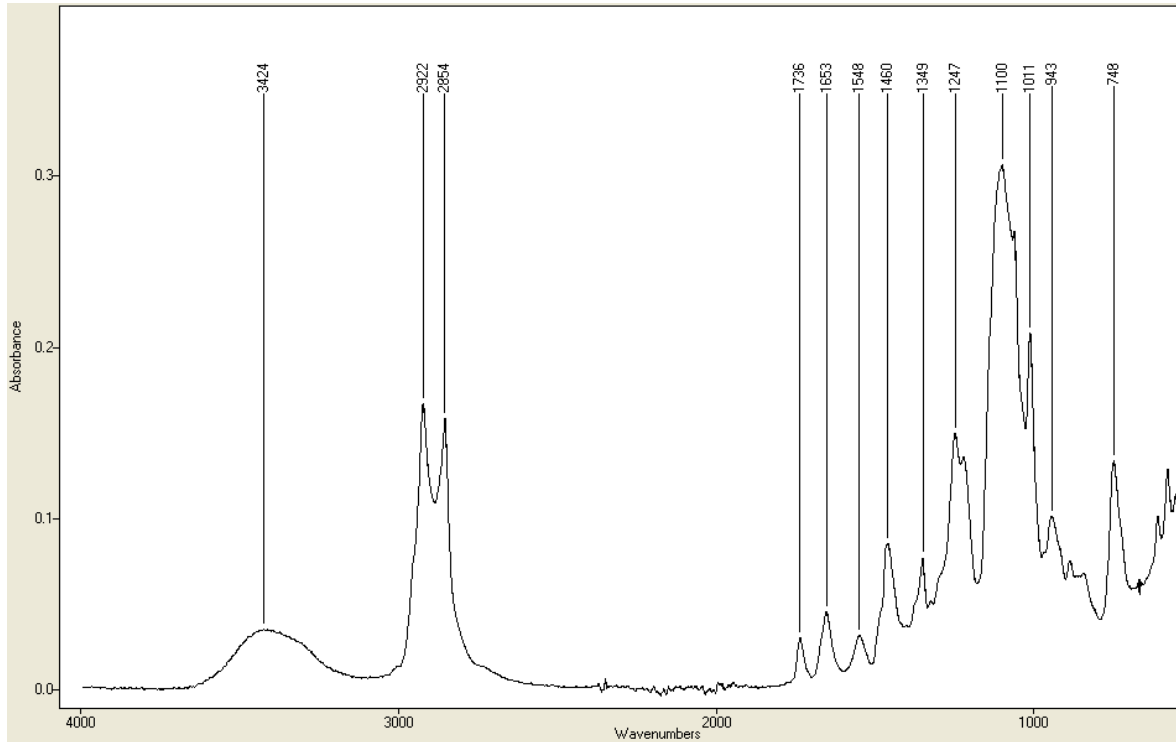
Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes tensoativos aniónicos da empresa encontram-se nos anexos.

### 3.2.3- Tensioativos catiónicos

Oposta à classe anterior, a classe dos tensoativos catiónicos apresenta carga residual positiva, carga conferida maioritariamente por grupos amina e compostos quaternários de amónio. Esta classe é normalmente usada para conferir propriedades especiais aos detergentes, nomeadamente como amaciador, agente anti estático ou até bactericida.<sup>1</sup>

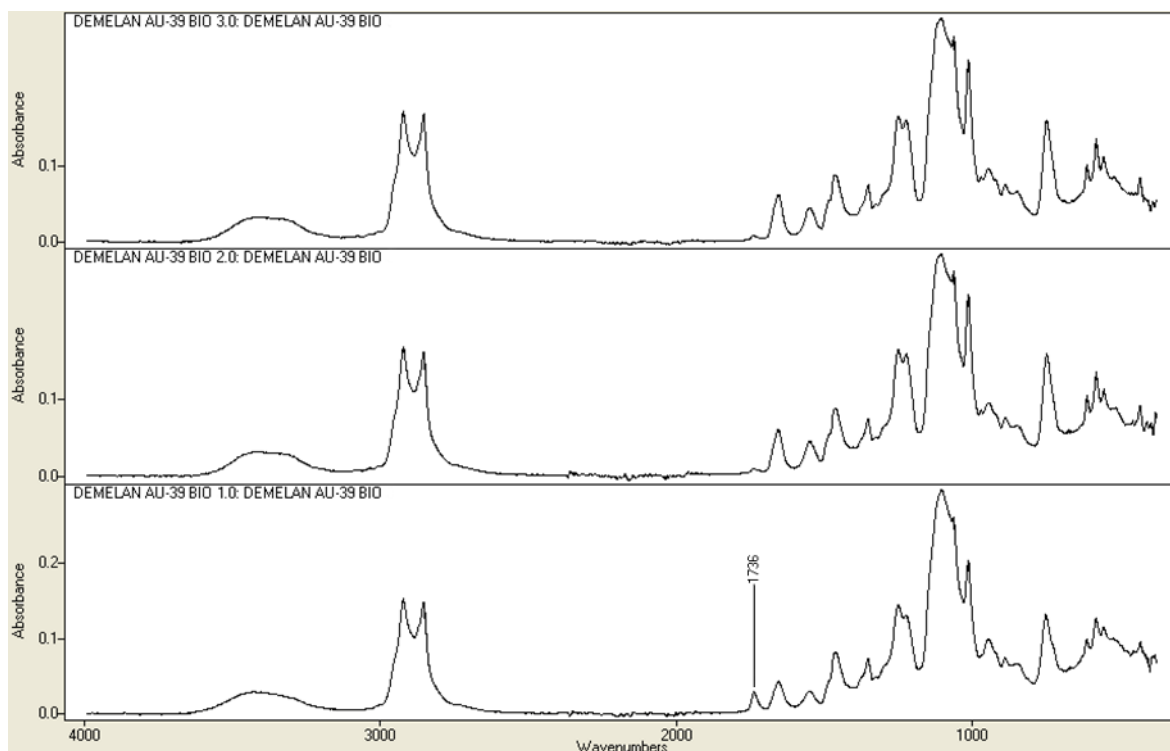
O DEMELAN<sup>®</sup> AU-39 BIO é composto por álcoois e aminas alifáticas etoxiladas. O seu espectro ([Figura 23](#)) identifica a presença do grupo hidroxilo através da banda larga a

$\sim 3424\text{ cm}^{-1}$  relativa à  $\nu\text{O-H}$ , da banda a  $\sim 1349\text{ cm}^{-1}$  relativa à  $\delta\text{O-H}$  e a  $\sim 1061\text{ cm}^{-1}$  a banda intensa indicativa da  $\nu\text{C-O}$ . A presença da banda intensa a  $\sim 1100\text{ cm}^{-1}$  resulta da  $\nu\text{C-O-C}$  assimétrica indicadora dos grupos éter.



**Figura 23- Espectro do DEMELAN® AU-39 BIO.**

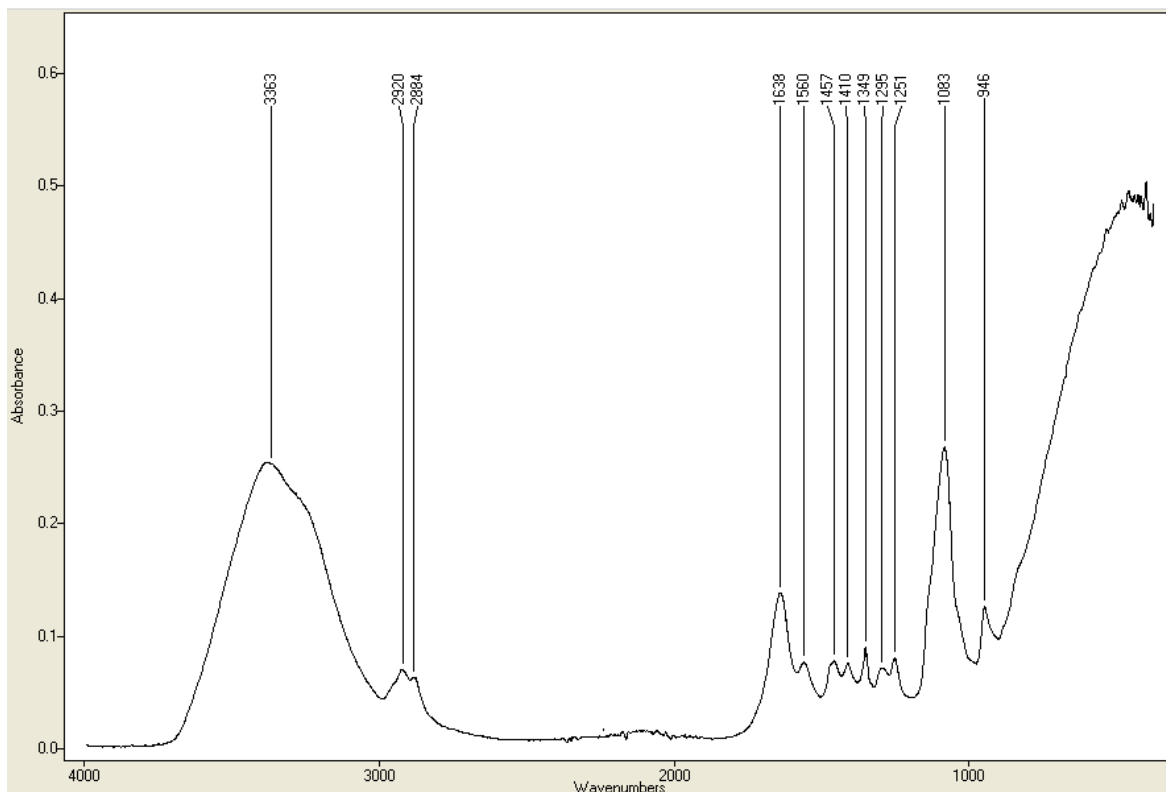
No espectro do primeiro lote é observada uma banda a  $\sim 1736\text{ cm}^{-1}$  que será reveladora de um grupo carbonilo ( $\nu\text{C=O}$ ), talvez devido a contaminação da matéria-prima, já que esta banda é vestigial nos restantes lotes (Figura 24).



**Figura 24- Espectros dos três lotes de DEMELAN<sup>®</sup>AU-39 BIO.**

A cadeia alifática é desvendada pela presença das bandas da  $\nu$ C-H assimétrico e simétrico de grupos metilénicos ( $\sim 2922\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 2854\text{ cm}^{-1}$ , respetivamente), e pelas  $\delta$ C-H do tipo “tesoura” ( $\sim 1460\text{ cm}^{-1}$ ).

O POLYQUART<sup>®</sup> H81 é baseado em PEG e numa poliamina, a presença de água é um fator dominante no seu espectro (Figura 25). No entanto é possível observar as bandas das  $\nu$ C-H assimétrico e simétrico de grupos metilénicos ( $\sim 2920\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 2878\text{ cm}^{-1}$ , respetivamente), e as bandas de  $\delta$ C-H do tipo “tesoura” e “torção” ( $\sim 1457\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 1295\text{ cm}^{-1}$ , respetivamente).

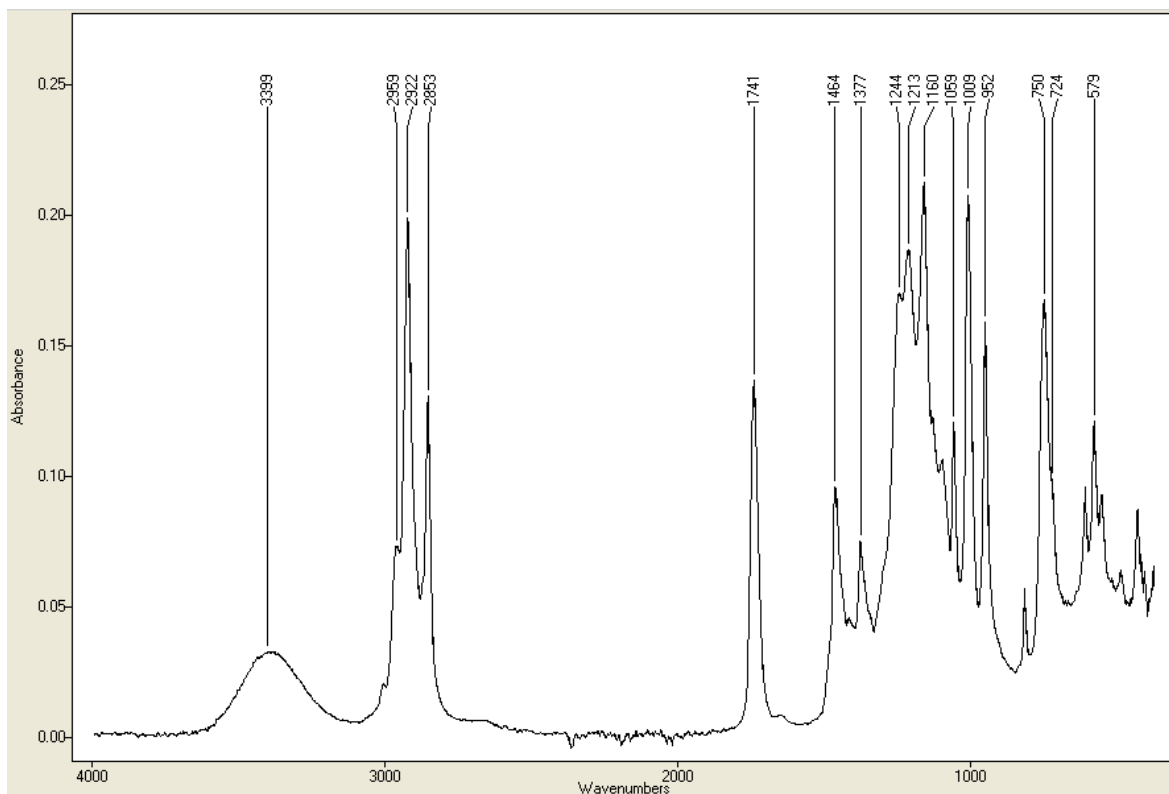


**Figura 25- Espectro do POLYQUART® H81**

A  $1083\text{ cm}^{-1}$  verifica-se uma banda de grande intensidade correspondente à  $\nu\text{C-O-C}$  assimétrica das ligações éter do PEG. E a  $1560\text{ cm}^{-1}$  a banda correspondente à  $\delta\text{N-H}$  do grupo amina, seria espetável uma banda relativa à  $\nu\text{N-H}$ , contudo a  $\nu\text{O-H}$  relativa à água estará provavelmente a ocultá-la.

O TETRANYL® AT-1 é composto por um sal quaternário de amónio e sulfato. A  $\sim 3399\text{ cm}^{-1}$  verifica-se uma banda larga, e devido à ausência das bandas características da água, podemos atribuir à  $\nu\text{O-H}$  de grupos hidroxilo. A  $\sim 3005\text{ cm}^{-1}$  surge uma banda de baixa intensidade que poderia resultar da  $\nu\text{C-H}$  de um grupo aromático ou metínico, no entanto as  $\nu\text{C=C}$  não estão presentes, o que leva a crer que se trata de uma vibração não fundamental.

Posteriormente verificamos as  $\nu\text{C-H}$  assimétricas e simétricas das cadeias alifáticas ( $\sim 2957\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 2922\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 2853\text{ cm}^{-1}$ ). Surgem também três bandas da  $\delta\text{C-H}$ , a do tipo “tesoura” a  $\sim 1464\text{ cm}^{-1}$ , do tipo “oscilação” a  $\sim 1377\text{ cm}^{-1}$ , e finalmente a banda indicadora de cadeias alifáticas longas a  $\sim 725\text{ cm}^{-1}$ .



**Figura 26- Espectro do TETRANYL® AT1.**

Entre  $1270\text{-}1150\text{ cm}^{-1}$  surgem bandas que podem corresponder às  $\nu\text{SO}_2$  do sulfato, ou às  $\nu\text{C-O-C}$  assimétrico dos grupos éster ( $\nu\text{C=O}$  do grupo éster a  $\sim 1740\text{ cm}^{-1}$ ). A  $\sim 1059\text{ cm}^{-1}$  verifica-se uma banda intensa correspondente à  $\nu\text{C-O}$  de um álcool primário.

Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes tensoativos catiónicos da empresa encontram-se nos anexos.

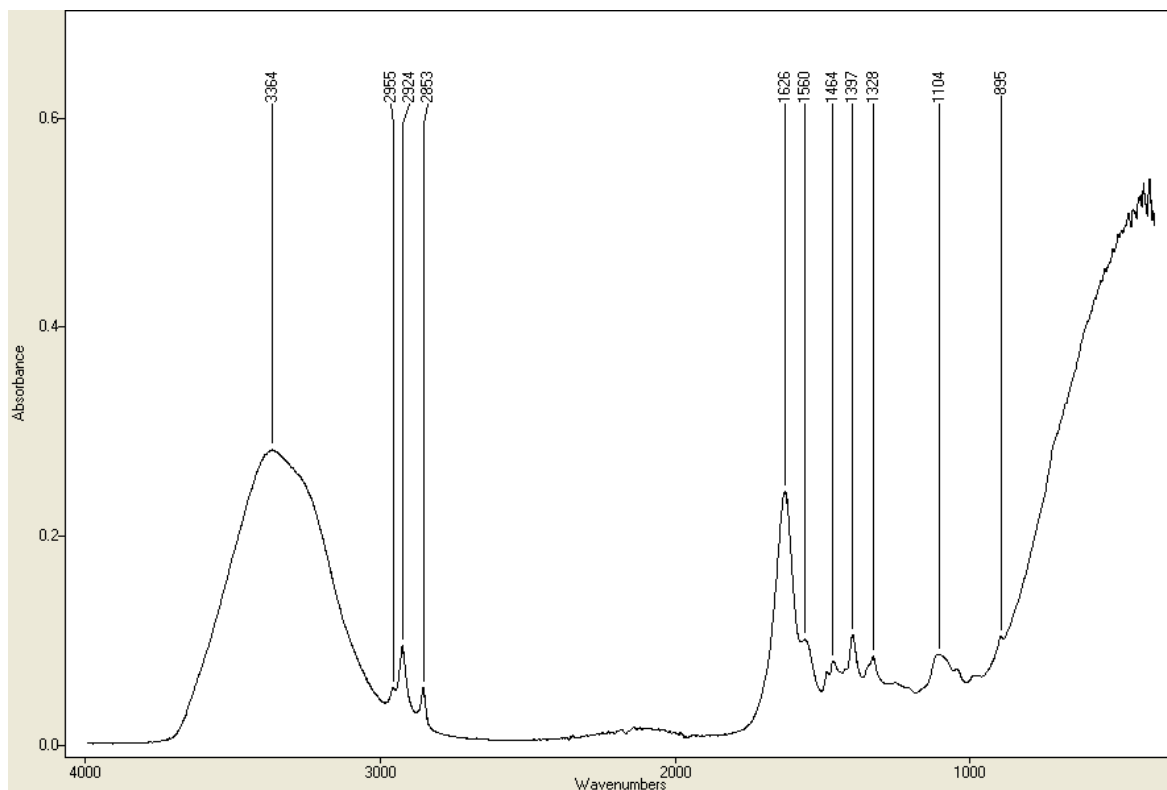
### 3.2.4- Tensoativos anfotéricos

Os tensoativos anfotéricos são compostos que apresentam na sua estrutura zonas com carga oposta (locais catiónicos e locais aniónicos). A carga destas moléculas varia com o pH, manifestando a forma zwitteriónica (*i.e.* molécula eletricamente neutra) a um determinado valor de pH (*i.e.* ponto isoelétrico). Os principais tensoativos desta classe são as betainas, N-aquil aminoácidos e os derivados de ácidos de etilenodiamina.

A SINOR® TAÍNA é baseada numa betaína. O seu espectro ([Figura 27](#)) é dominado pelas bandas características do solvente (a água) que devem esconder a banda relativa à  $\nu\text{N-H}$  da amida secundária.



No entanto as bandas relativas à  $\nu$ C-H assimétrica e simétrica de grupos metilo e metilénicos ( $\sim 2955\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 2873\text{ cm}^{-1}$ ;  $\sim 2924\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 2853\text{ cm}^{-1}$ ), e  $\delta$ C-H do tipo “tesoura” ( $\sim 1464\text{ cm}^{-1}$ ) são proeminentes e identificam a presença da cadeia alifática.

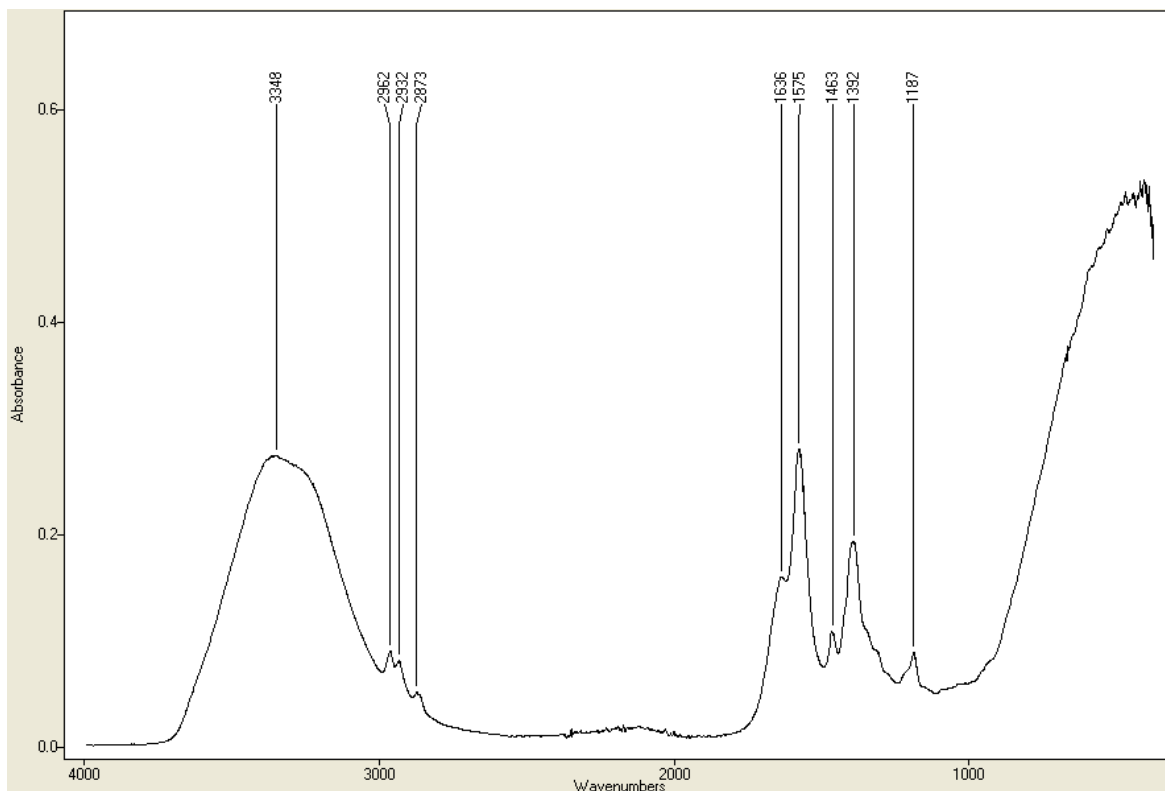


**Figura 27- Espectro da SINOR® TAÍNA.**

A banda de grande intensidade a  $1626\text{ cm}^{-1}$  corresponde à  $\nu$ C=O (amida I) do grupo amida, no entanto devido à sua intensidade e localização, a banda correspondente à  $\delta$ N-H (amida II) pode estar camuflada.

As duas bandas a  $\sim 1560\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 1397\text{ cm}^{-1}$  correspondem à  $\nu$ CO<sub>2</sub><sup>-</sup> assimétrico e simétrico e identificam a presença do sal de ácido.

O AMPHOTENSID® EH é um carboxilato de alquilamina. O espectro (Figura 28) é mais uma vez dominado pelas bandas características da água. Tal como o anterior é possível observar as bandas  $\nu$ C-H assimétrica e simétrica de grupos metilo e metilénicos e a banda  $\delta$ C-H do tipo “tesoura”, relativas à cadeia alifática.



**Figura 28- Espectro do AMPHOTENSID® EH.**

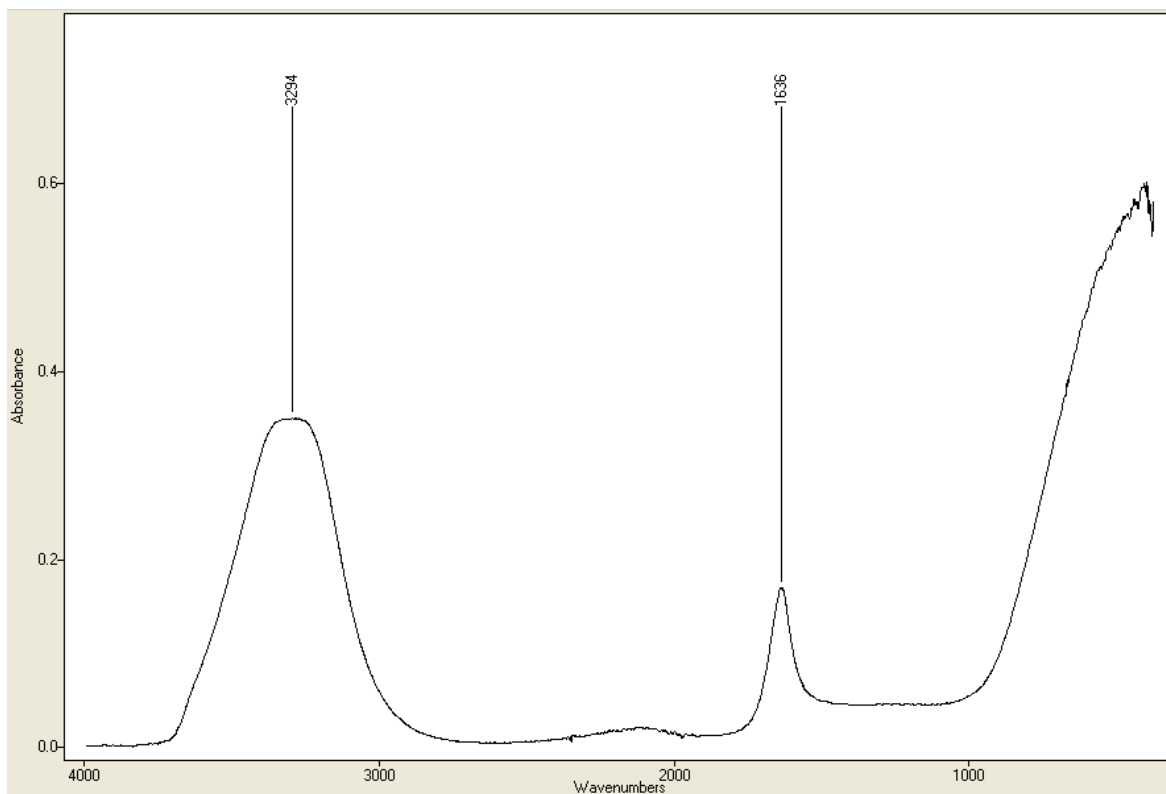
Apresentando na sua constituição uma amina secundária, seria espectável a existência das bandas  $\nu$ N-H e  $\delta$ N-H, contudo estas devem estar camufladas, a primeira devido à banda  $\nu$ O-H da água, e a segunda devido à banda  $\nu$ CO<sub>2</sub><sup>-</sup> assimétrico a  $\sim$ 1575 cm<sup>-1</sup> (banda  $\nu$ CO<sub>2</sub><sup>-</sup> simétrico a  $\sim$ 1397 cm<sup>-1</sup>) correspondente ao carboxilato.

Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes tensoativos anfotéricos da empresa encontram-se em anexo no capítulo III.

### 3.3- Solventes

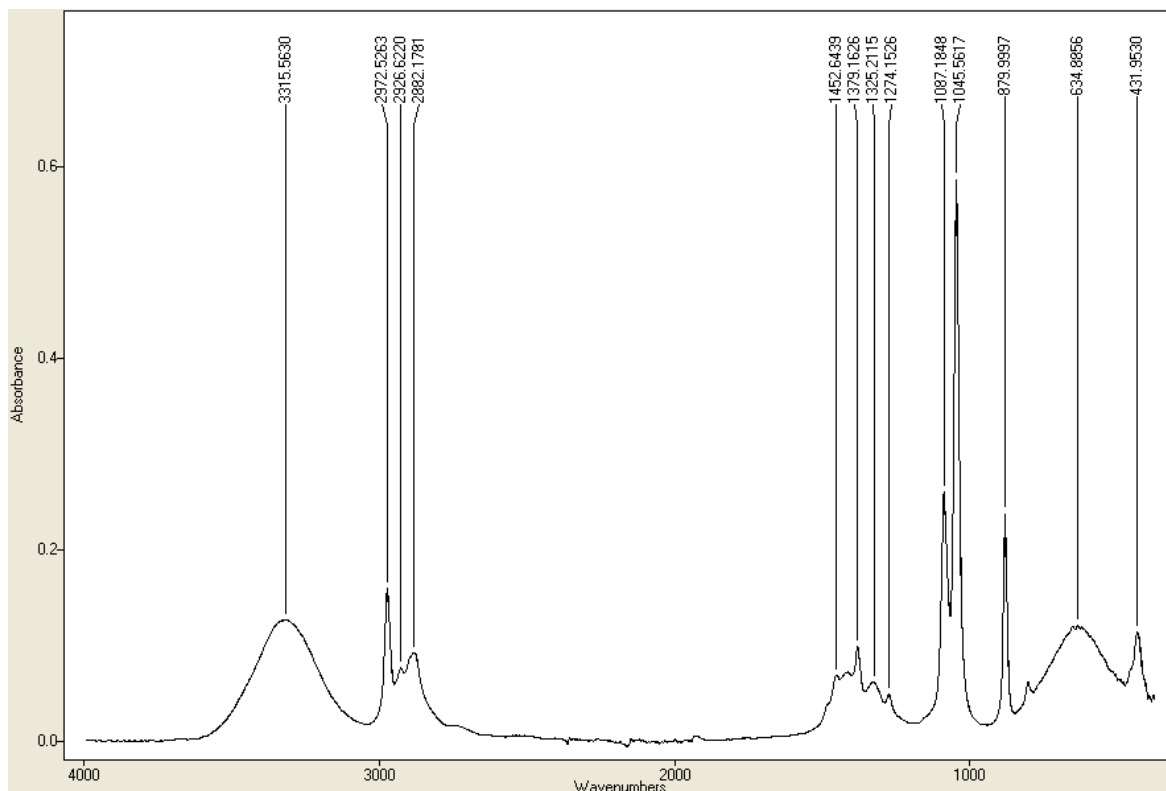
Os solventes são por norma os constituintes maioritários na formulação de detergentes, os principais solventes usados são a água, os álcoois e os éteres glicólicos.

A água é o solvente mais utilizado, e como visto nas anteriores matérias-primas, é também a principal fonte de ocultação de muitas bandas características devido às suas bandas largas (resultante das ligações por pontes de hidrogénio). No infravermelho médio a água apresenta três bandas (Figura 29), a banda larga relativa à  $\nu$ O-H a  $\sim$ 3300 cm<sup>-1</sup>, a banda a  $\sim$ 1636 cm<sup>-1</sup> relativa à  $\delta$ H-O-H, e uma larga banda entre os 900-350 cm<sup>-1</sup> relativa à  $\delta$ O-H.



**Figura 29- Espectro da água.**

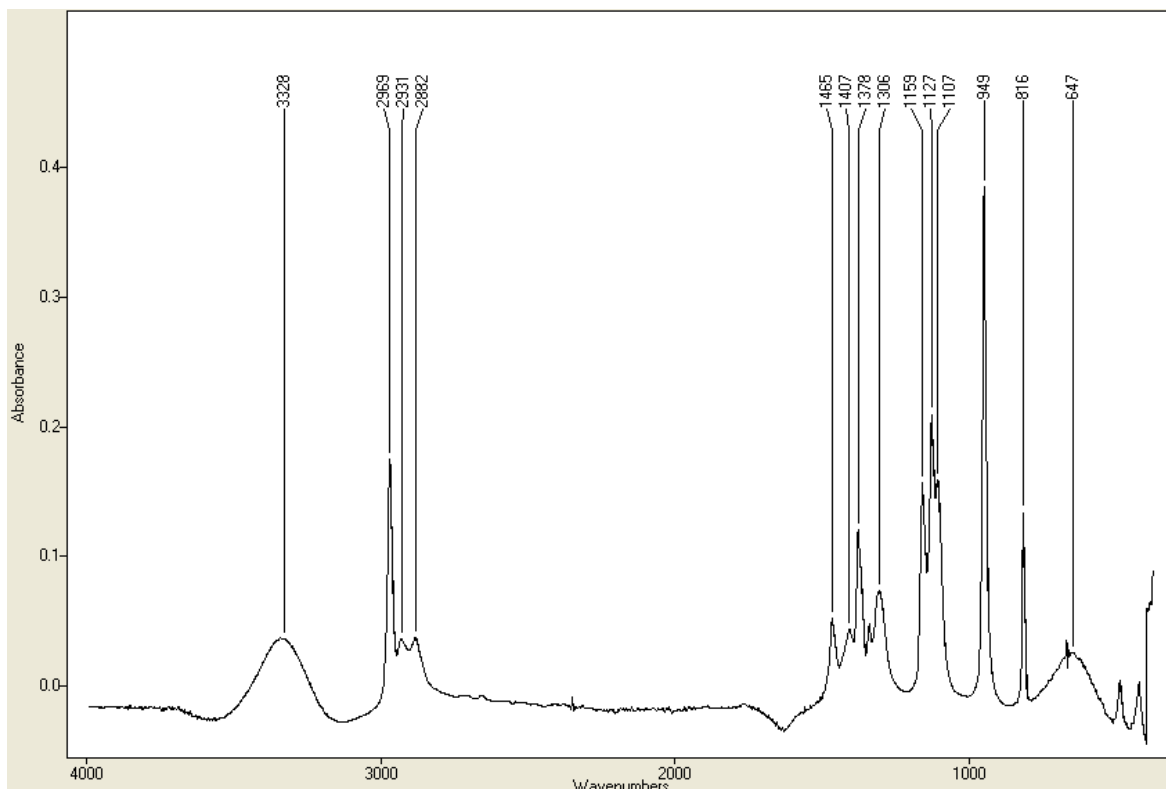
O etanol é um álcool primário, e o seu espectro (tal como a água) apresenta a banda larga a  $\sim 3328\text{ cm}^{-1}$ , (mas) referente à  $\nu\text{O-H}$  do grupo hidroxilo. As bandas relativas ao grupo etilo apresentam-se entre os  $2990\text{-}2800\text{ cm}^{-1}$  ( $\nu\text{C-H}$  assimétricos e simétricos do grupo metílico e metilénico), a  $\sim 1452\text{ cm}^{-1}$  ( $\delta\text{C-H}$  “tesoura”), a  $\sim 1379\text{ cm}^{-1}$  ( $\delta\text{C-H}$  “oscilação”) e a  $\sim 1274\text{ cm}^{-1}$  ( $\delta\text{C-H}$  “torção”).



**Figura 30- Espectro do etanol.**

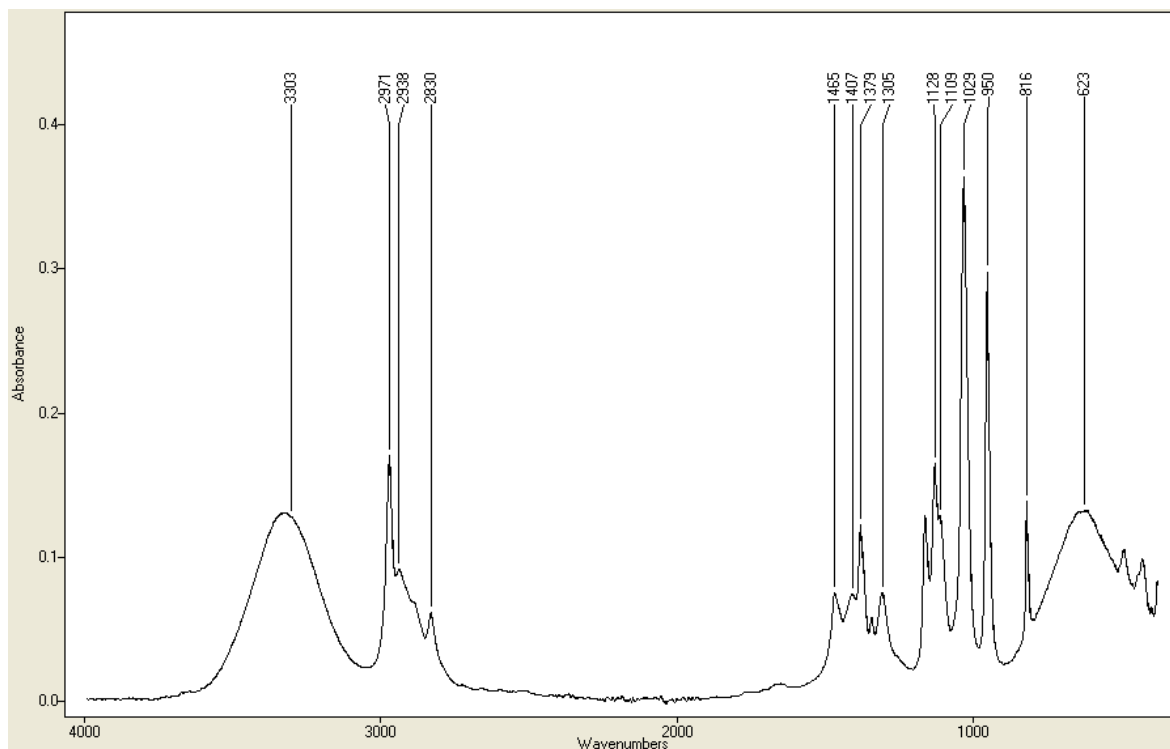
As bandas relativas ao grupo hidroxilo são as mais intensas, (a  $\sim 1087\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 1045\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 879\text{ cm}^{-1}$ ) e correspondem às diferentes  $\nu\text{C-O}$ , e  $\delta\text{O-H}$  (banda larga entre  $800\text{-}450\text{ cm}^{-1}$ ).<sup>8</sup>

O álcool isopropílico (IPA) apresenta um espectro muito idêntico ao do etanol ([Figura 31](#)), no entanto devido ao facto de ser um álcool secundário as suas bandas relativas às  $\nu\text{C-O}$  encontram-se a frequências superiores ( $\sim 1160$ ,  $\sim 1128$  e  $\sim 1109\text{ cm}^{-1}$ ). Uma banda intensa a  $\sim 950\text{ cm}^{-1}$  deve-se à vibração da cadeia propílica ( $\nu\text{CH}_3\text{-C-CH}_3$ ).<sup>11</sup>



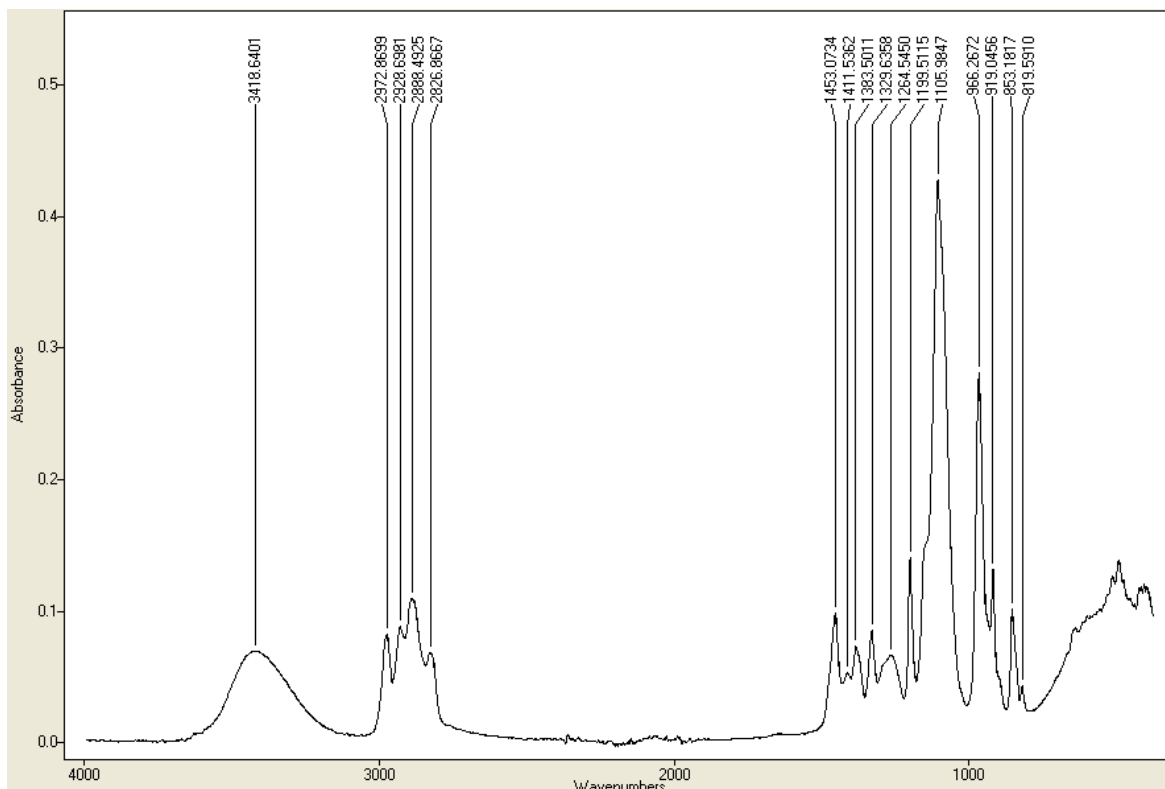
**Figura 31- Espectro do IPA.**

Contudo num dos lotes analisados verificaram-se diferenças significativas no seu espectro (Figura 32), contrariando os espectros encontrados na bibliografia e em bases de dados.<sup>7,11,12</sup> O aparecimento da banda a  $\sim 1029\text{ cm}^{-1}$  sugere a presença de um álcool primário ( $\nu\text{C-O}$ ). As bandas correspondentes às  $\nu\text{C-H}$  também indicam uma alteração na cadeia alifática (possível extensão) devido a um aparecimento e aumento expressivo de bandas relativas às vibrações de grupos metilénicos (a  $\sim 2938$  e  $\sim 2830\text{ cm}^{-1}$ ). Pode-se concluir que não é só IPA que está presente neste lote.



**Figura 32-** Espetro do primeiro lote de IPA analisado, uma banda intensa ocorre a  $\sim 1029\text{ cm}^{-1}$ , assim como alterações nas bandas de estiramento da cadeia alifática, indicando algum tipo de contaminação.

O PM Solvent é composto por 1-metoxi-2-propanol, o seu espectro (Figura 33) apresenta bandas idênticas à do propanol, nomeadamente as bandas correspondentes às  $\nu\text{C-O}$ , e  $\delta\text{O-H}$ , mas a existência de uma banda muito intensa a  $\sim 1105\text{ cm}^{-1}$  e uma de intensidade média a  $\sim 919\text{ cm}^{-1}$  indicam a presença do grupo éter ( $\nu\text{C-O-C}$  assimétrico e simétrico, respetivamente).



**Figura 33- Espectro do metoxi-2-propano.**

Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes solventes da empresa encontram-se nos anexos.

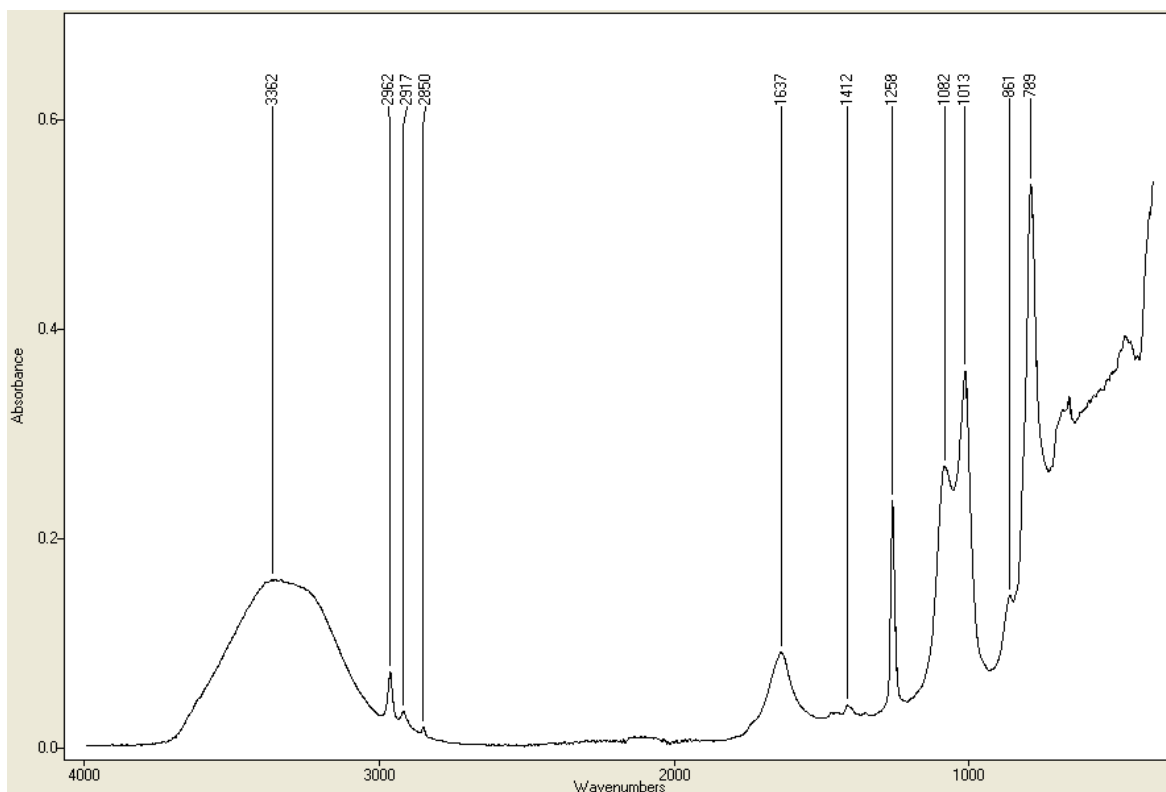
### 3.4- Diversos

Na categoria dos diversos, a empresa insere vários componentes minoritários dos detergentes, ou seja aditivos. Estes correspondem a todos os compostos que entram na formulação dos detergentes com a finalidade de cumprir determinados objetivos da especialidade de cada detergente. Nesta secção estão agentes desinfetantes (*p.e.* ACTICIDE® DDQ 50 e AKYPO® GENE JOD F), agentes de anti-redeposição (polímeros acrílicos, *p.e.* Cellesh 100), reguladores de espuma (*p.e.* AF 9030E), enzimas, etc.

O AF 9030E é um agente anti espuma. A espuma tem pouca significância na eficiência de um detergente, no entanto tem grande importância na opinião da maioria dos consumidores, já que esta propriedade é normalmente percebida como bom indicador da performance de um detergente. No entanto, excesso de espuma pode na realidade provocar

deficiência no processo de lavagem, dificultando o enxaguamento, e drenagem das máquinas de lavar.<sup>1,4</sup>

O espectro do AF 9030E (Figura 34) apresenta as bandas entre 2990-2840  $\text{cm}^{-1}$  que confirmam a presença de grupos metílicos, mas também metilénicos (provavelmente de outro componente). A banda intensa a  $\sim 1258 \text{ cm}^{-1}$  é característica da  $\delta\text{C-H}$  simétrica de grupos metilo ligados a silício, e a respetiva vibração assimétrica ocorre a  $\sim 1412 \text{ cm}^{-1}$ .<sup>7,8</sup>



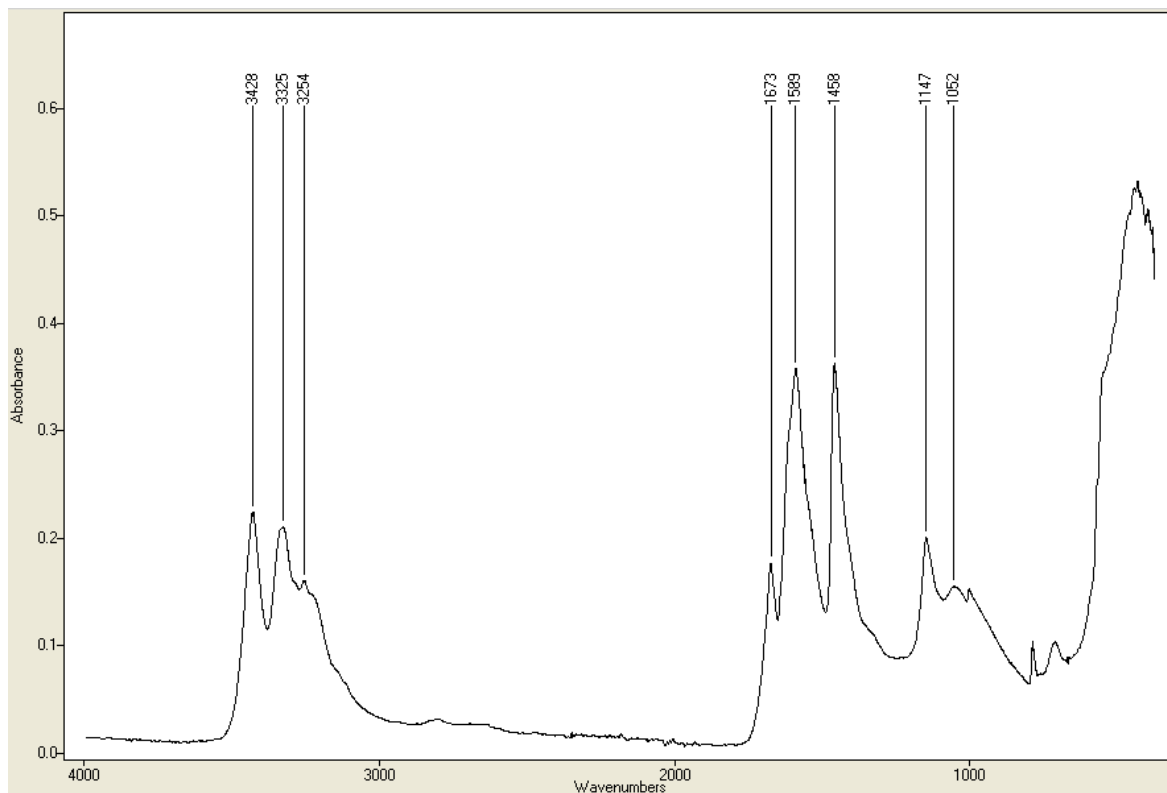
**Figura 34- Espectro do agente anti espuma AF9030E.**

Sendo baseado principalmente em polidimetilsiloxano, identificamos as bandas intensas a  $\sim 1080$  e  $\sim 1012 \text{ cm}^{-1}$  como correspondentes às  $\nu\text{Si-O}$ . As bandas são muito idênticas às dos éteres, no entanto a inexistência de várias vibrações características de  $\delta\text{C-H}$  (*p.e.* “tesoura”, “oscilação”), corroboram com a análise. Outra banda intensa ocorre a  $\sim 789 \text{ cm}^{-1}$ , e corresponde à  $\nu\text{Si-O}$ .<sup>8,13</sup>

A ureia é usada nas formulações como um agente hidrótopo, que previne a separação de fase e precipitação de compostos menos solúveis. O seu espectro (Figura 35) apresenta a  $\sim 3428$  e  $\sim 3325 \text{ cm}^{-1}$  as bandas características das  $\nu\text{N-H}$  (assimétrico e simétrico,



respetivamente) de grupos  $\text{-NH}_2$ , a banda larga a  $3254\text{ cm}^{-1}$  deve-se provavelmente a diferentes graus de ligações por pontes de hidrogénio.<sup>8</sup>



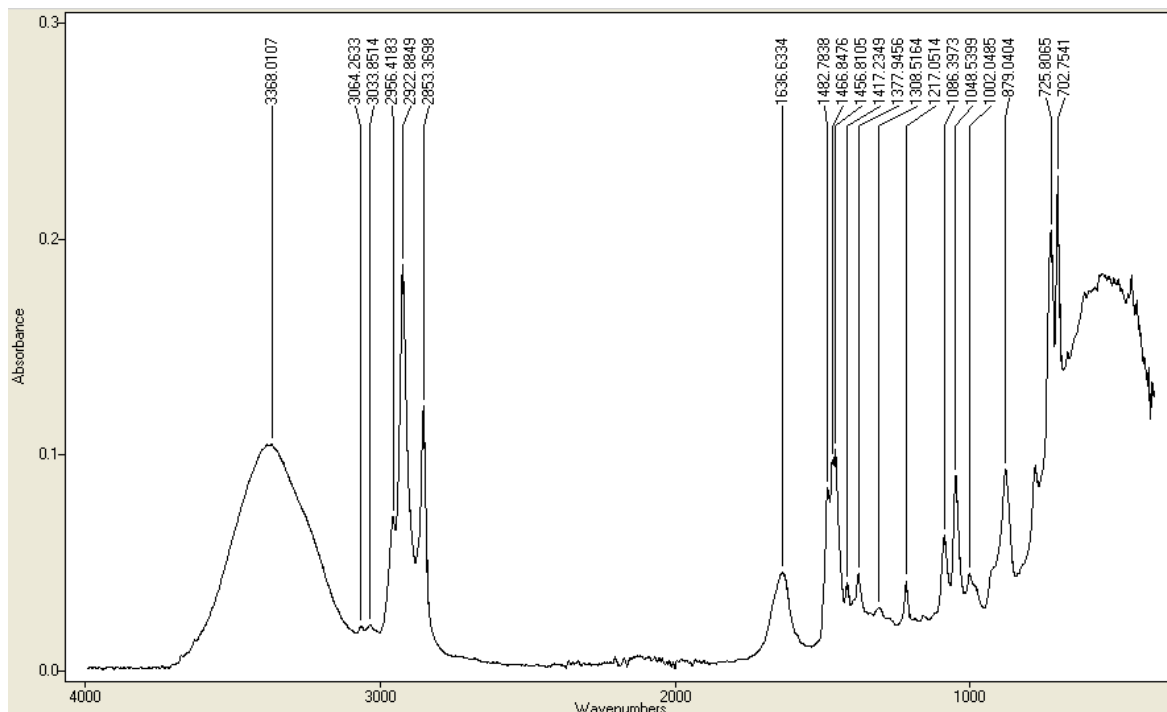
**Figura 35- Espectro da ureia.**

As bandas a  $\sim 1673$ ,  $\sim 1589$  e  $\sim 1458\text{ cm}^{-1}$  correspondem (respetivamente) às bandas amida I, II e III ( $\nu\text{C-N}$ ). Por fim as bandas inferiores a  $1200\text{ cm}^{-1}$  devem-se às várias  $\delta\text{N-H}$  (a banda intensa  $\sim 1147\text{ cm}^{-1}$  deve-se à  $\delta\text{N-H}$  do tipo “oscilação”).<sup>8</sup>

O ACTICIDE® BAC 80 é um tensoativo catiónico baseado num sal quaternário de amónio, mas é usado principalmente como agente biocida. Esta classe de compostos é captada pelos microrganismos e promove a rotura de membranas celulares o que leva à sua destruição.<sup>1</sup>

Uma particularidade deste composto é a presença de um anel aromático mono substituído, que é identificado pelas bandas de  $\nu\text{C-H}$  (aromático) a  $\sim 3064\text{ cm}^{-1}$  e  $\sim 3033\text{ cm}^{-1}$ , pelas bandas relativas à vibração do anel ( $\nu\text{C=C}$   $\sim 1486$  e  $1456\text{ cm}^{-1}$ , outras podem estar escondidas na banda da água  $\sim 1634\text{ cm}^{-1}$ ), e pelas bandas intensas das  $\delta\text{C-H}$  no plano ( $\sim 1086$

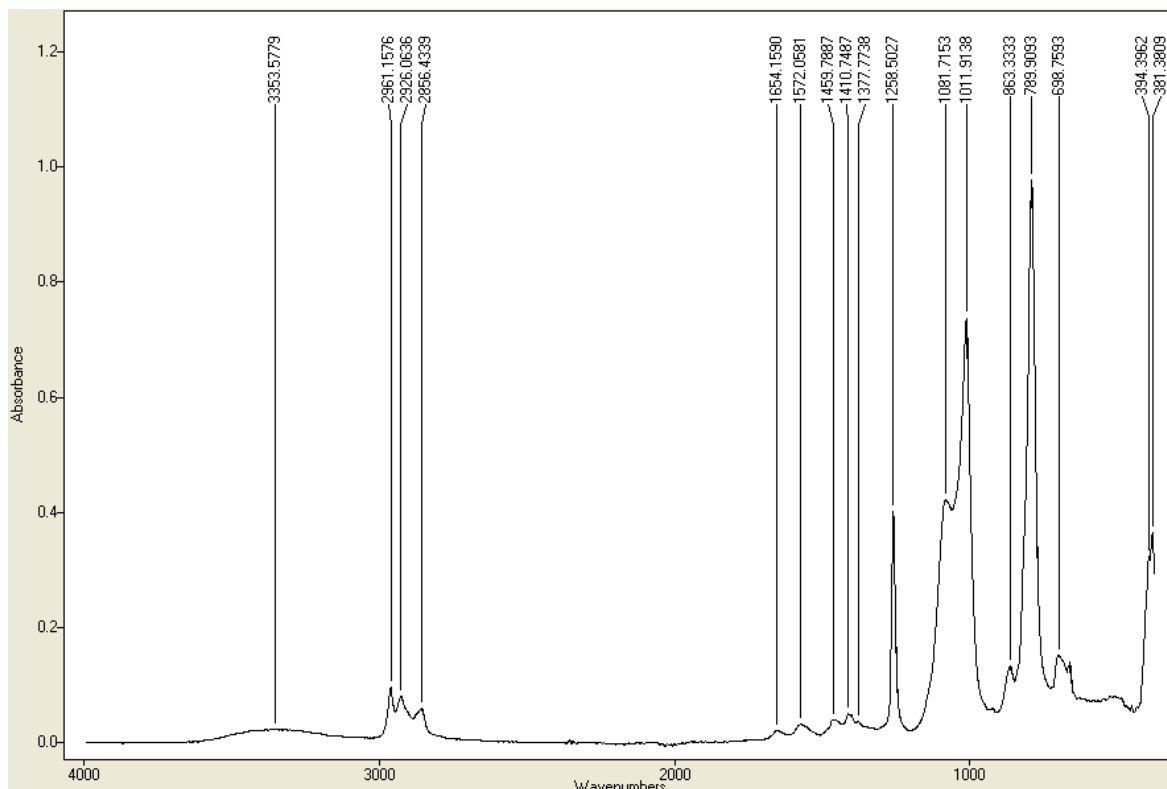
e  $\sim 1048\text{ cm}^{-1}$ ) e fora do plano ( $\sim 726$  e  $702\text{ cm}^{-1}$ ).<sup>7,8</sup> Relativamente às ligações N-C do sal observa-se uma banda a  $879\text{ cm}^{-1}$  que corresponderá à  $\nu\text{NC}_4$  no plano (Figura 36).<sup>7</sup>



**Figura 36- Espectro do ACTICIDE® BAC 80.**

Em algumas aplicações pretende-se que os detergentes garantam um acabamento final hidrofóbico (*p.e.* em detergentes e condicionadores auto), o uso tensoativos com base em silicone promovem este efeito.<sup>14</sup>

O TEGO® Polish Q70 é um aditivo composto por cadeias longas de silicone quaternário. O seu espectro apresenta quatro bandas muito intensas (Figura 37).



**Figura 37- Espectro do TEGO® Polish Q70.**

A banda a  $\sim 1258\text{ cm}^{-1}$  corresponde à  $\nu\text{C-Si}$  simétrico dos grupos metálicos ( $\sim 1410\text{ cm}^{-1}$   $\nu\text{C-Si}$  assimétrico). As bandas a  $\sim 1081$  e  $\sim 1011\text{ cm}^{-1}$  correspondem à  $\nu\text{Si-O-Si}$ . E a banda a  $\sim 789\text{ cm}^{-1}$  deve-se às vibrações  $\delta\text{C-Si}$  e  $\delta\text{C-H}$  do tipo “balanço”.<sup>8</sup> A banda a  $\sim 2926\text{ cm}^{-1}$  é indicadora da presença de grupos metilénicos, o que prova que a matéria-prima apresenta cadeias alifáticas mais longas que as metálicas.

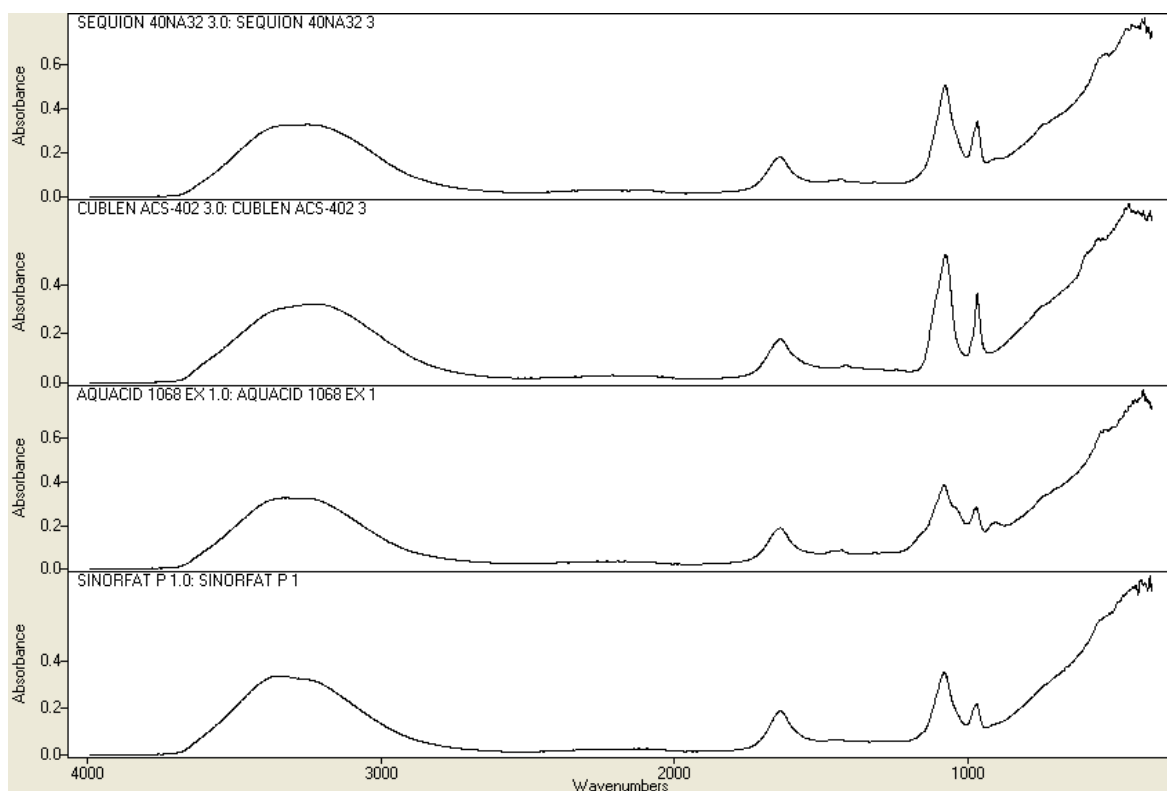
Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes compostos usados como aditivos pela empresa encontram-se nos anexos.

### 3.5- Quelantes

Os quelantes evitam a adsorção dos tensoativos aniónicos a óxidos metálicos ou a complexação a outros sais presentes na sujidade ou água, que potencialmente limitam o poder de limpeza do detergente.

A empresa apresenta quatro MPs compostas por derivados de ácido fosfónico (AQUACID® 1068EX, CUBLEN® ACS-402, SEQUION® 40 NA32 e SINOR® FAT P), os seus espectros são muito semelhantes (Figura 38). São matérias-primas muito diluídas, e isso

reflete-se na predominância das bandas da água, no entanto as bandas O-H são mais largas, e estendem-se desde os 3660 até aos 2700  $\text{cm}^{-1}$  (devido a fortes ligações por pontes de hidrogénio) e ocultam as bandas relativas às  $\nu\text{C-H}$ . Apenas duas bandas se destacam (comparativamente às da água) destes espectros e correspondem às  $\nu\text{P=O}$  ( $\sim 1080 \text{ cm}^{-1}$ ) e  $\nu\text{P-O-C}$  assimétricas ( $\sim 970 \text{ cm}^{-1}$ ).



**Figura 38- Espectros relativos às MPs: AQUACID<sup>®</sup> 1068EX, CUBLEN<sup>®</sup> ACS-402, SEQUION<sup>®</sup> 40NA32 e SINOR<sup>®</sup> FAT P.**

Os espectros e tabelas de correlação relativos aos restantes quelantes da empresa encontram-se nos anexos.

### 3.6- Perfumes

As fragâncias são um elemento essencial dos detergentes, já que na ótica do consumidor, por muito bom que seja o detergente se este não deixa um aroma agradável, também é pouco provável que volte a comprar o mesmo produto.

Os perfumes são misturas complexas de compostos orgânicos voláteis, complexidade essa também traduzida nos seus espectros, já que são observadas diversas bandas dos vários constituintes.

O FGR MARSELHA é um exemplo de um perfume que apresenta mais de 10 constituintes. No entanto grande parte da sua composição corresponde a citronelal (30/40%) e de um fenil éter (40/50%). Por essa razão é possível identificar no seu espectro bandas destes constituintes. (Figura 39).

Ao fenil éter pode-se atribuir as bandas de  $\nu\text{C-H}$  aromático (também haverá contribuição de  $\nu\text{C-H}$   $\text{sp}^2$  de outros compostos) entre  $3010\text{-}3070\text{ cm}^{-1}$ , as bandas  $\nu\text{C=C}$  do anel aromático ( $\sim 1585\text{ cm}^{-1}$ ,  $\sim 1485\text{ cm}^{-1}$ ), e principalmente as bandas intensas da  $\nu\text{C-O-C}$  ( $\sim 1232\text{ cm}^{-1}$ ) e  $\delta\text{C-H}$  a  $\sim 690$  e  $\sim 748\text{ cm}^{-1}$  (indicador de anel aromático monosubstituído).

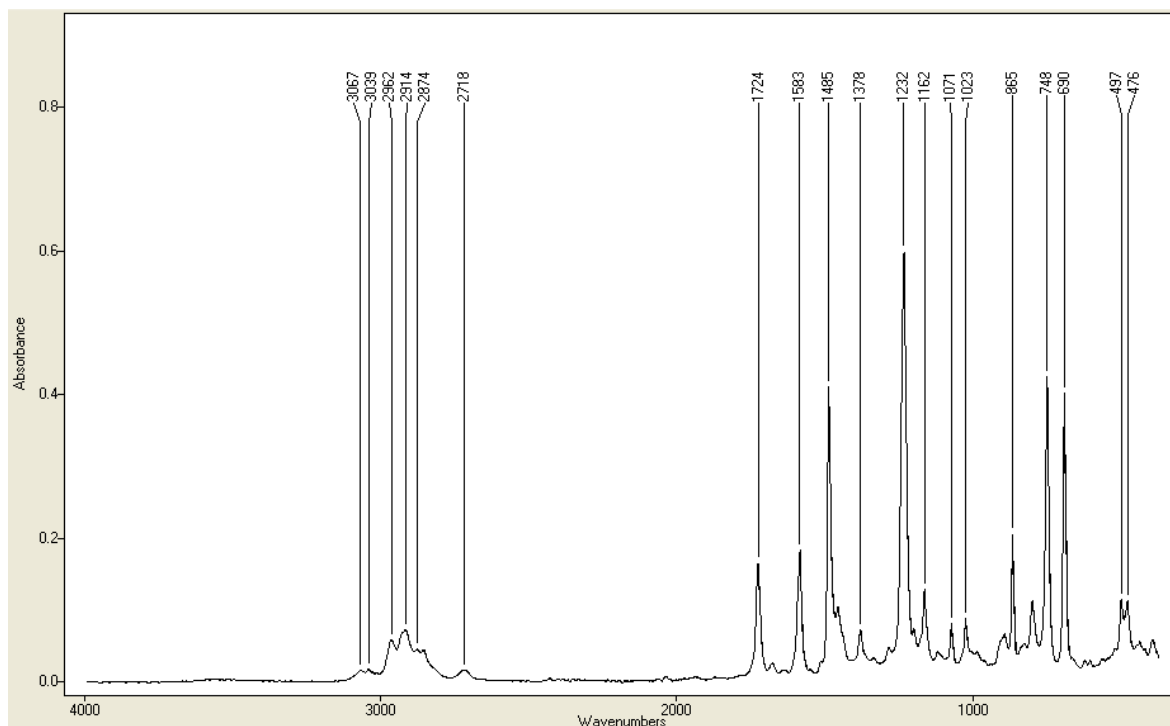


Figura 39- Espectro do perfume FGR MARSELHA.

O citronelal apresenta um grupo funcional aldeído que pode ser identificado pela banda  $\nu\text{C=O}$  a  $\sim 1724\text{ cm}^{-1}$ . Uma das características dos aldeídos são as bandas de ressonância de Fermi, que ocorrem normalmente  $\sim 2750$  e  $\sim 2850\text{ cm}^{-1}$ , neste espectro observa-se uma banda a  $\sim 2720\text{ cm}^{-1}$  e a segunda banda estará provavelmente camuflada por entre as bandas  $\nu\text{C-H}$  simétrico dos grupos metílicos e metilénicos.

Já para a maioria dos restantes perfumes os seus constituintes estão pouco (e igualmente) concentrados, o que limita a caracterização, sendo apenas possível fazer a atribuição de algumas bandas características mais intensas (ver capítulo VI), no entanto a identificação dos grupos presentes é muito limitada. Na presença de vários tipos de álcoois e éteres é difícil confirmar qual o tipo de vibração envolvida, *p.e.* para  $\nu\text{C-O}$  ( $\nu\text{C-C-O}$  ou  $\nu\text{C-O-C}$ ). Os espectros apresentam-se quase como somatórios das várias bandas de todos os compostos em solução. Uma identificação de um composto em particular é muito difícil nestas circunstâncias.

O mesmo se verificou para a análise de alguns produtos da empresa, onde para além da complexidade também se verifica a elevada contribuição da água que esconde várias bandas importantes.



## **Capítulo IV**

### **Conclusão**





## 4- Conclusão

A espectroscopia de infravermelho é uma técnica simples e rápida de análise estrutural de compostos químicos. A introdução do FTIR-ATR elevou a resolução e simplificou a técnica diminuindo substancialmente o tempo de análise.

A caracterização das MPs é relativamente simples quando se tratam de composições básicas, em que um composto é muito concentrado. No entanto quando a composição é muito variada e com concentrações semelhantes (*p.e.* os perfumes), a atribuição de bandas torna-se muito complexa sendo possível apenas definir que tipos de vibrações são possíveis. A caracterização torna-se ainda mais complexa na zona “*fingerprint*”, devido aos vários tipos de vibrações possíveis e acoplamentos típicos de cada estrutura molecular.

Para além da composição complexa, MPs muito diluídas também pecam pela camuflagem de bandas por parte dos solventes e conseqüente perda de informação. Por exemplo, a identificação de bandas importantes de amins e amidas é muitas vezes camuflada pelos solventes. A subtração com o espectro da água utilizando o software OPUS, pouco ajuda já que as bandas são largas, sendo subtraídas também bandas importantes dos compostos. Facto que nos foi possível verificar ao longo deste trabalho. Outro fenómeno perigoso da subtração espectral é a formação de bandas fictícias inerentes à subtração, que podem induzir a erros de caracterização.

Podemos, no entanto, concluir que conseguimos, com sucesso, caracterizar as MPs usadas pela Mistolin<sup>®</sup>, e demonstrar as potencialidades do FTIR-ATR como técnica para controlo de qualidade.

A avaria e (demorada) reparação do equipamento causaram alguns contratemplos, que para além da perda de tempo para análise experimental, obrigaram à repetição de muitas análises. Desta forma ficou muito pouco tempo para a análise dos produtos.

Das análises efetuadas a alguns produtos da empresa, verificam-se os problemas de camuflagem anteriormente referidos, ou os espectros são essencialmente o espectro da água, ou então são espectros complexos em que é praticamente impossível indicar a que composto da formulação pertence a banda em causa. Há que salientar que este objetivo necessitava de mais tempo para ser otimizado.





## **Capítulo V**

### **Procedimento Experimental**



## 5- Procedimento experimental

Todo o trabalho experimental foi efetuado no espectrómetro da empresa, trata-se de um FTIR-ATR Bruker<sup>®</sup> Alpha-P com o acessório ATR Platinum Diamond 1. O FTIR-ATR utiliza o software OPUS 6.5.97, e cada espectro tem por base 16 scans da amostra com uma resolução de 4 cm<sup>-1</sup>.

Após limpeza com IPA foi efetuada uma leitura atmosférica, de forma a subtrair posteriormente qualquer banda responsável pelos gases presentes em atmosfera.

E procede-se à caracterização da amostra. Após obtenção do espectro é usada a opção "Atmospheric Compensation" e é gravado o espectro. Foram efetuadas três medições de diferentes lotes, de forma a validar a exatidão do espectro.





## **Capítulo VI**

### **Bibliografía**





## 6- Bibliografia

- <sup>1</sup> U. Zoller, G. Broze in *Handbook of Detergents Part A: Proprieties*, Marcel Dekker, Inc; New York, 1999; Vol.82, Cap. 1.
- <sup>2</sup> L. Spitz in *Soap Manufacturing Technology*, AOCS Press; Illinois, 2009, Cap. 1.
- <sup>3</sup> J. Toedt, D. Koza, K. V. Cleef-Toedt in *Chemical Composition of Everyday Products*, Greenwood Press, Westport, 2005, Cap. 1.
- <sup>4</sup> F. Ullmann in *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Wiley-VCH, 2002, 6<sup>th</sup> ed.
- <sup>5</sup> U. Zoller, G. Broze in *Handbook of Detergents Part B: Environmental Impact*, Marcel Dekker, Inc; New York, 2004; Cap. 2.
- <sup>6</sup> B. C. Smith in *Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy*, CRC Press; Boca Raton, 2011, 2nd ed.
- <sup>7</sup> P. Larkin in *Infrared and Raman Spectroscopy: Principles and Spectral Interpretation*, Elsevier Inc.; Oxford, 2011.
- <sup>8</sup> G. Socrates in *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies*, Wiley-VCH; New York, 2001, 3rd ed.
- <sup>9</sup> D. Lin-Vien in *The Handbook of Infrared and Raman Characteristic Frequencies of Organic Molecules*, Academic Press Ltd.; 1991.
- <sup>10</sup> J. M. Hollas in *Modern Spectroscopy*, John Wiley & Sons Ltd; West Sussex, 2004, 4th ed.
- <sup>11</sup> B. C. Smith in *Infrared Spectral Interpretation: A Systematic Approach*, CRC Press LLC; Boca Raton, 1998.
- <sup>12</sup> <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C67630&Type=IR-SPEC&Index=3#IR-SPEC>  
data de acesso: 14/03/2014.
- <sup>13</sup> D. W. Mayo, F. A. Miller, R. W. Hannah in *Course notes on the interpretation of infrared and Raman spectra*, , John Wiley & Sons Inc., New Jersey, 2003.
- <sup>14</sup> U. Zoller in *Handbook of Detergents Part F: Production* CRC Press LLC; Boca Raton, 2009.
- <sup>15</sup> M. Hoppela, D. Baurechtb, E. Holperc, D. Mahrhauser, C. Valenta, *Int. J. Pharm.* **2014**, 88.
-





## **Capítulo VII**

### **Anexos**



## 7.1- Tensioativos não-iônicos

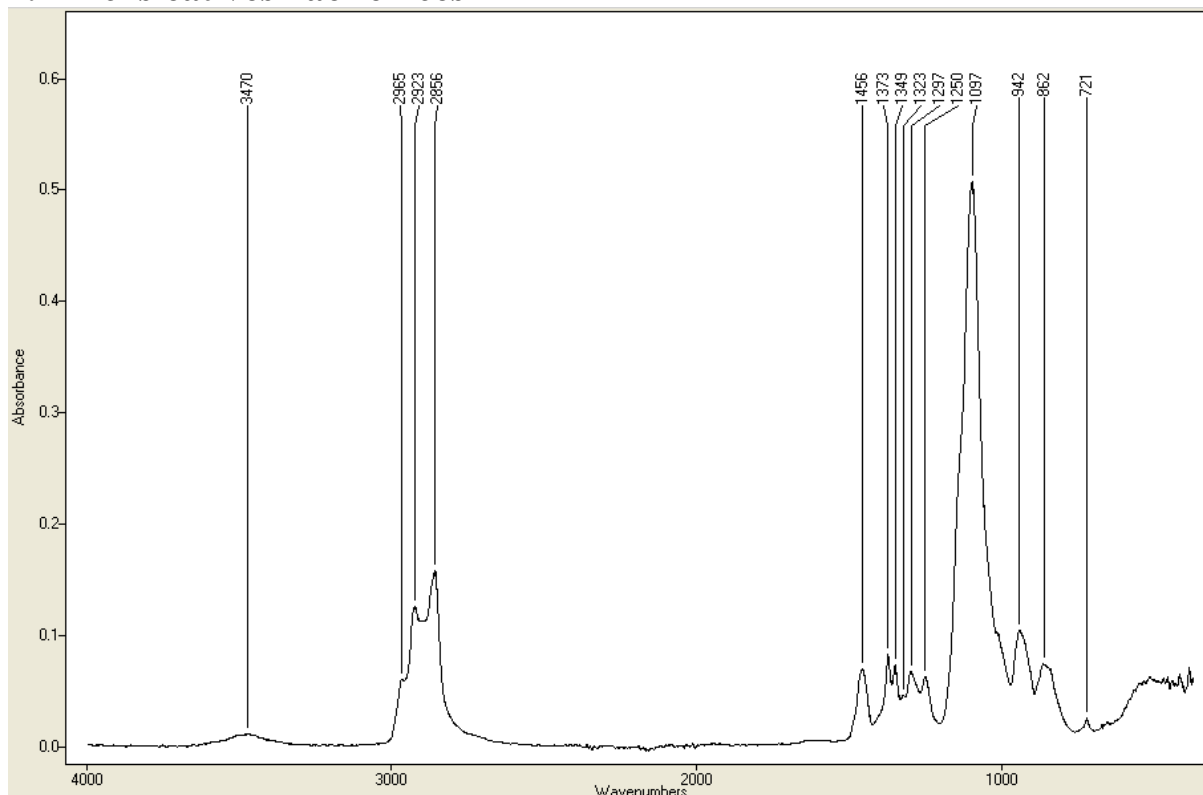
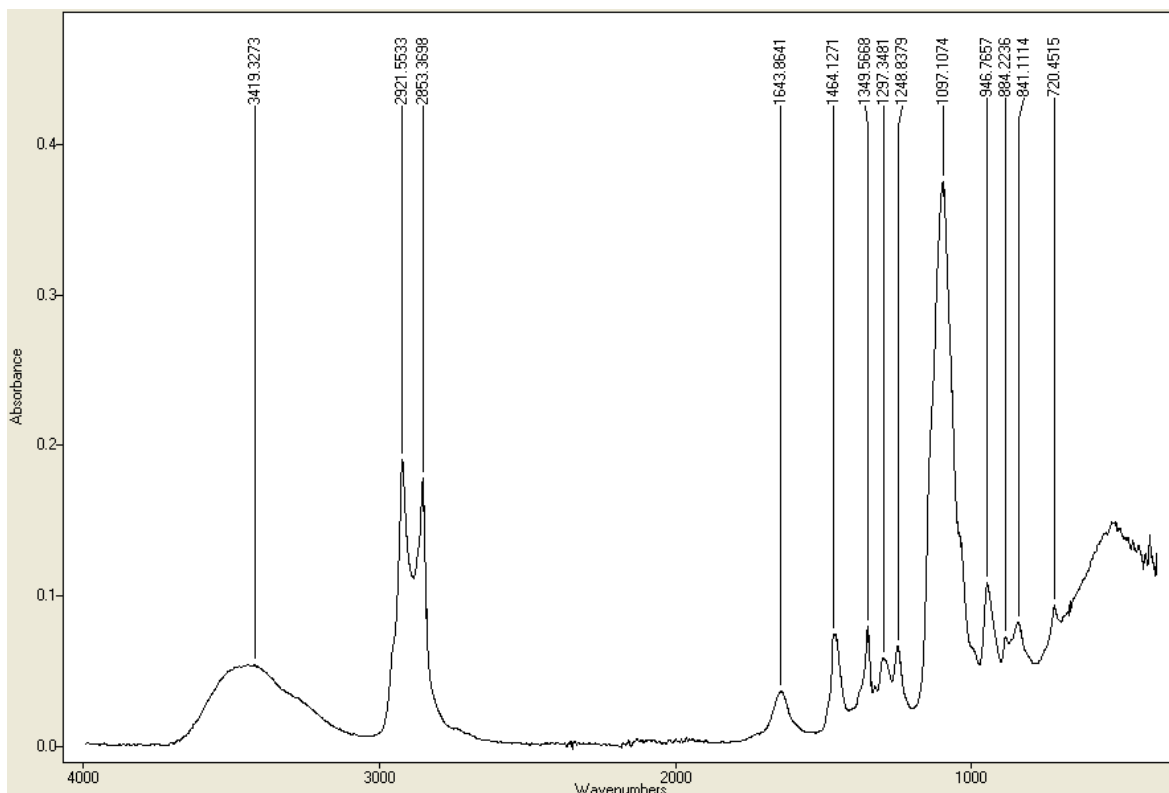


Figura 40- Espectro do Antarox® FM33.

Tabela 2- Tabela de correlação para o Antarox® FM33.

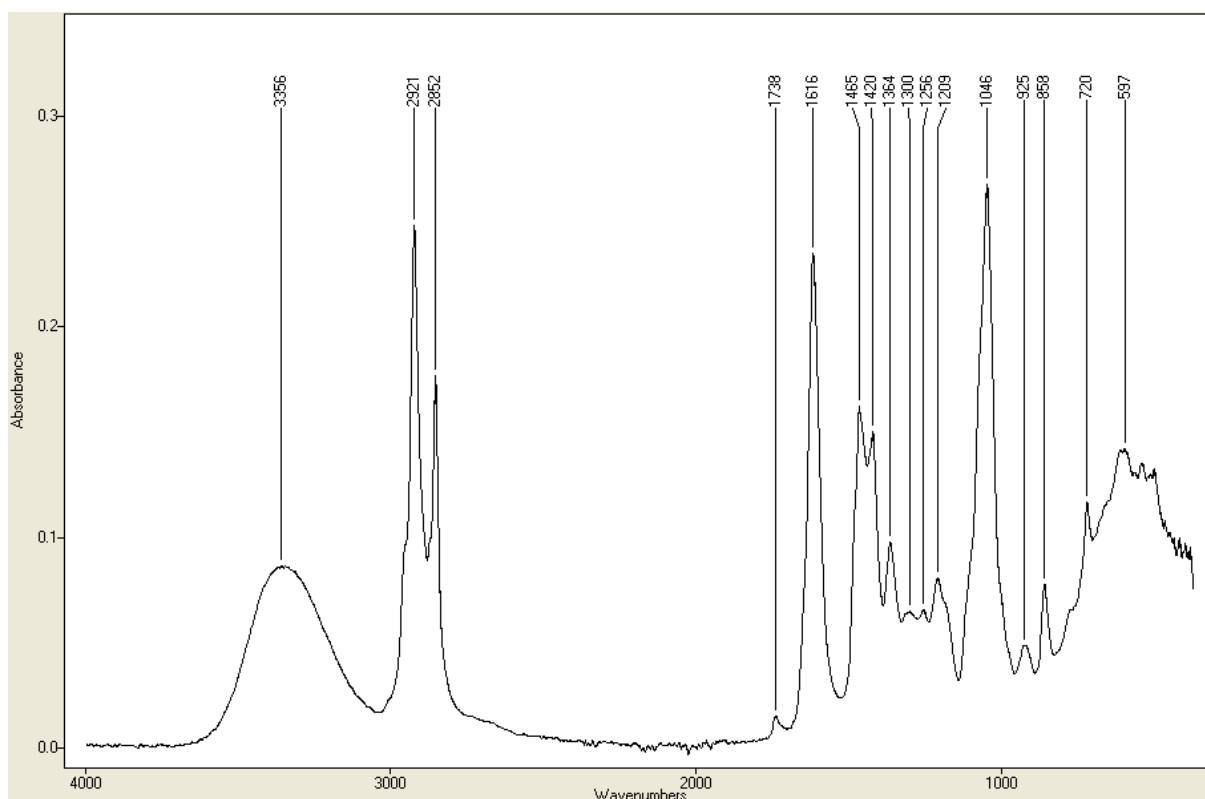
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
721,6876	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
863,1710	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
942,5323	$\delta\text{CH}_2$
1097,2315	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1250,3127	$\nu\text{C-O}$
1297,1477	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,1277	$\delta\text{O-H}$
1373,1203	$\delta\text{CH}_2$ “oscilação”
1456,8678	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
2856,7680	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2923,5674	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
2965,6965	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$



**Figura 41- Espectro do DEMELAN® LT7/90.**

**Tabela 3- Tabela de correlação para o DEMELAN® LT7/90.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
720,1365	$\delta(\text{CH}_2)_n$ , $n > 3$
840,5864	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
946,8517	$\delta\text{CH}_2$
1096,9356	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1248,9716	$\nu\text{C-O}$
1297,0522	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,5668	$\delta\text{O-H}$
1464,0030	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
1643,8355	$\delta\text{H-O-H}$
2853,3698	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2921,5342	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3435,4736	$\nu\text{O-H}$



**Figura 42- Espectro da dietanolamida de côco.**

**Tabela 4- Tabela de correlação para a dietanolamida de côco.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
610,7689	δO-H
720,2415	δ(CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> , n>3
858,9281	νC-C-O simétrico
1046,7215	νC-C-O simétrico
1256,5793	νC-O
1301,2618	δCH <sub>2</sub> “torção”
1364,0473	δO-H
1420,7189	Amida III
1465,7165	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1616,1154	Amida I
2852,3150	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2921,5915	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3357,5202	νO-H

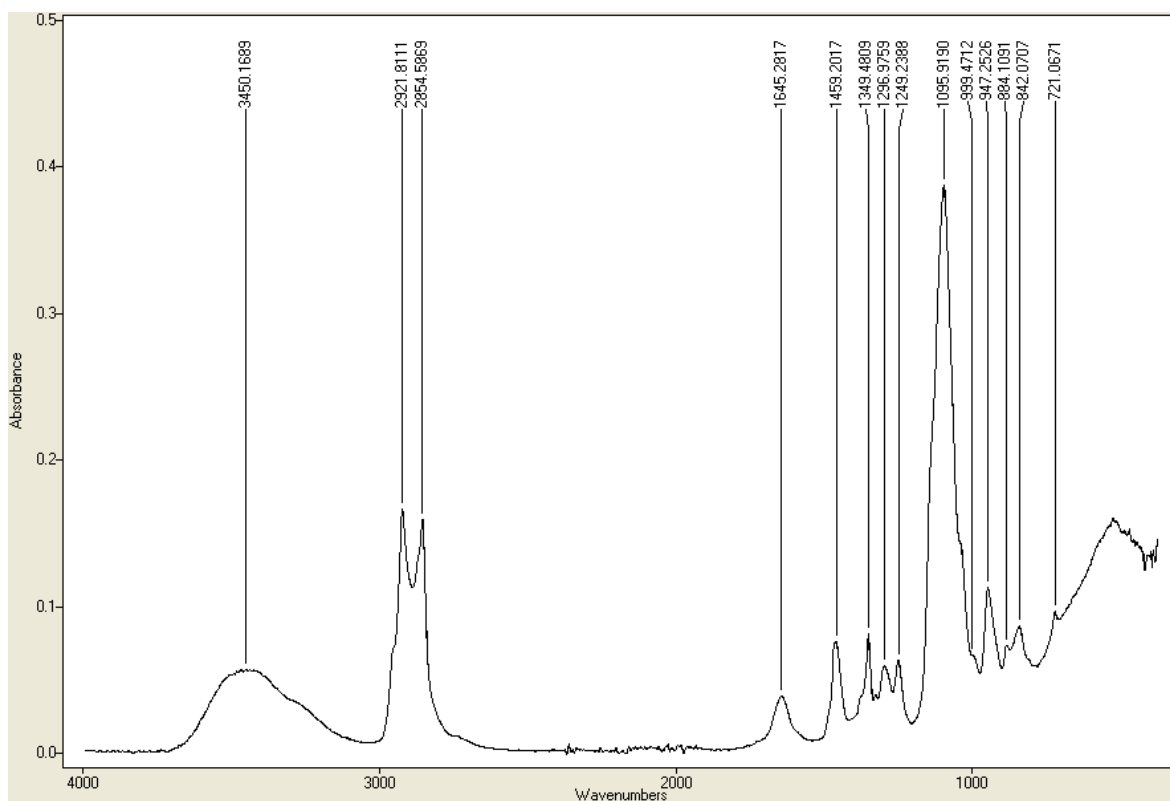
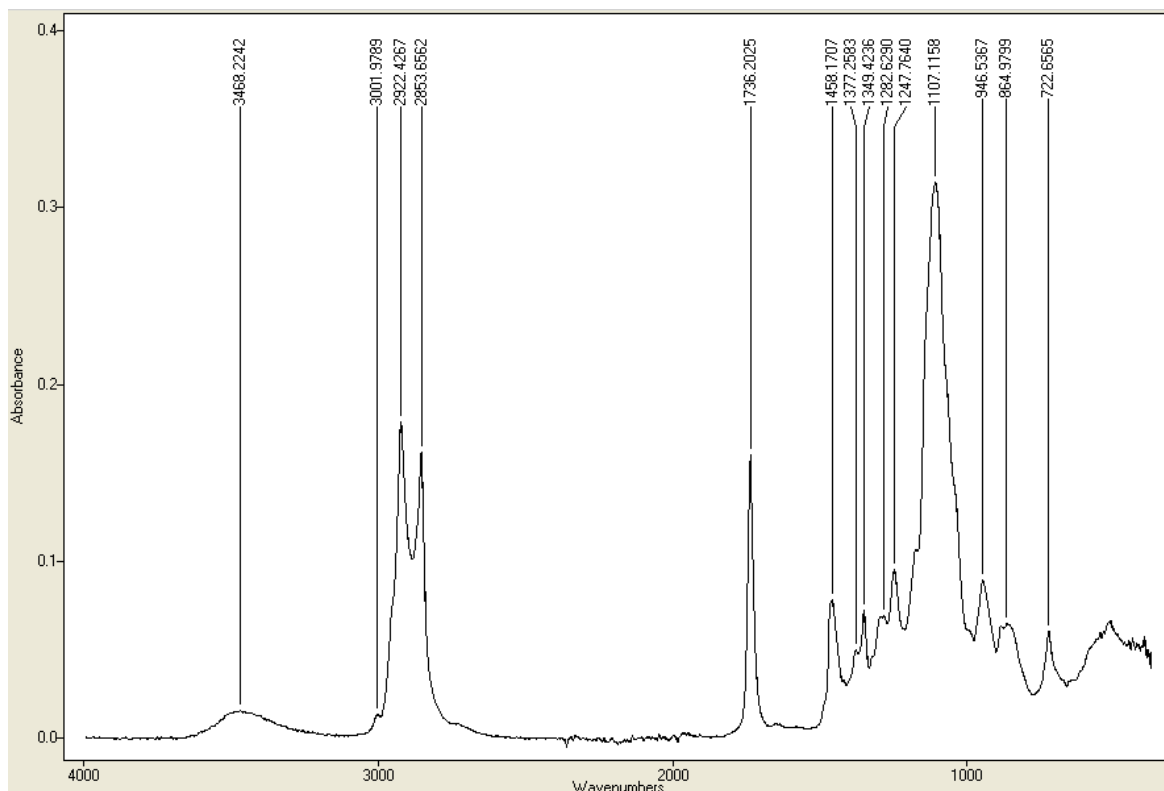


Figura 43-Espectro do EMPILAN® KCL 7-90.

Tabela 5- Tabela de correlação para o EMPILAN® KCL 7-90.

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
720,5230	$\delta(\text{CH}_2)_n$ , $n > 3$
841,7223	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
1095,8331	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1249,1434	$\nu\text{C-O}$
1297,2575	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,4809	$\delta\text{O-H}$
1459,5215	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
1643,8212	$\delta\text{H-O-H}$
2854,5105	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2921,8874	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3448,8468	$\nu\text{O-H}$

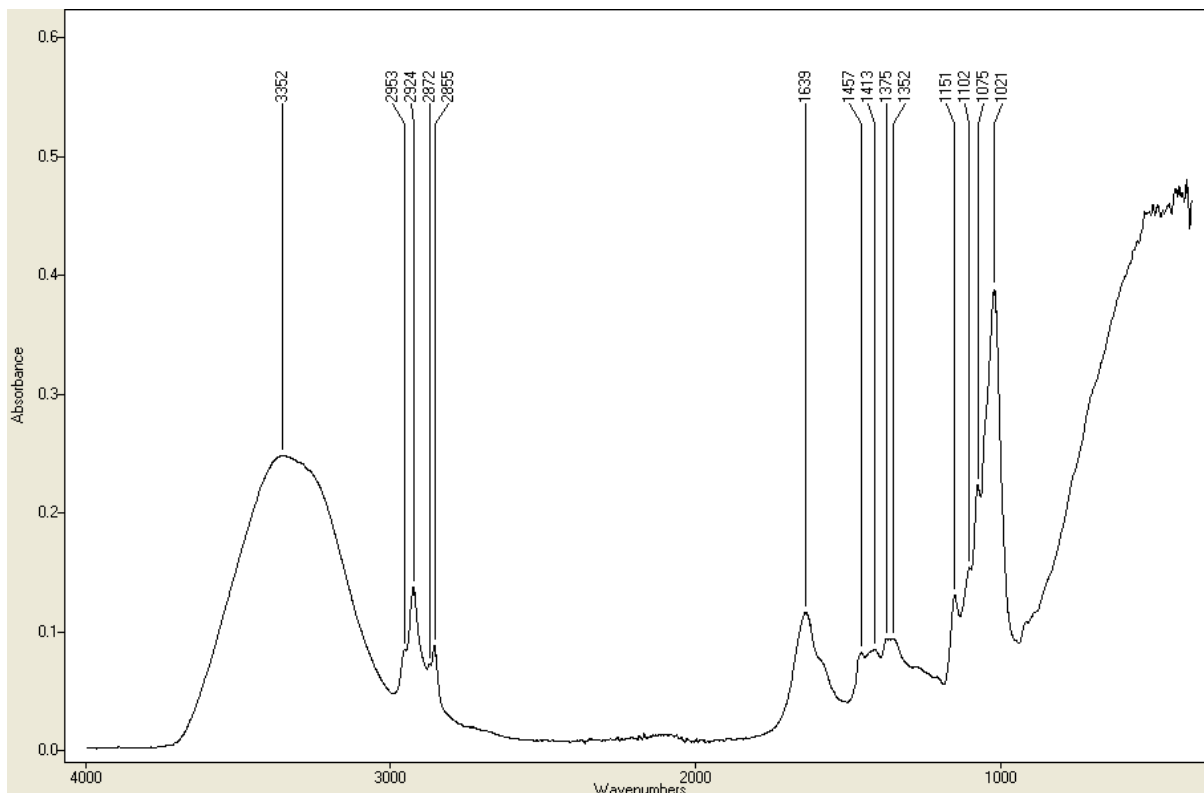




**Figura 44- Espectro do EUMULGIN® PTL5.**

**Tabela 6- Tabela de correlação para o EUMULGIN® PTL5.**

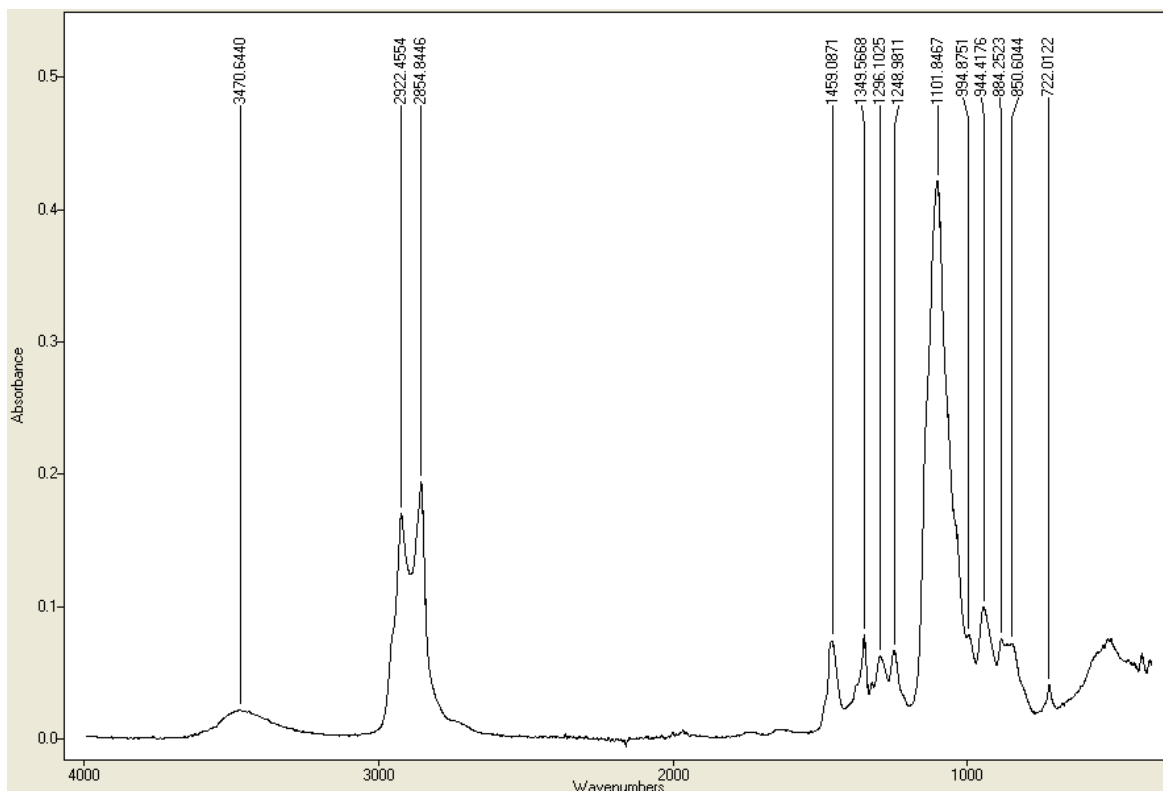
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
722,7042	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
859,7442	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
1107,1158	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1247,4968	$\nu\text{C-O}$
1293,3915	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,3472	$\delta\text{O-H}$
1458,4380	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
1736,1452	$\nu\text{C=O}$
2853,6275	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2922,3074	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3456,8173	$\nu\text{O-H}$



**Figura 45-Espectro do GLUCOPON® 215 UP.**

**Tabela 7- Tabela de correlação para o GLUCOPON® 215 UP.**

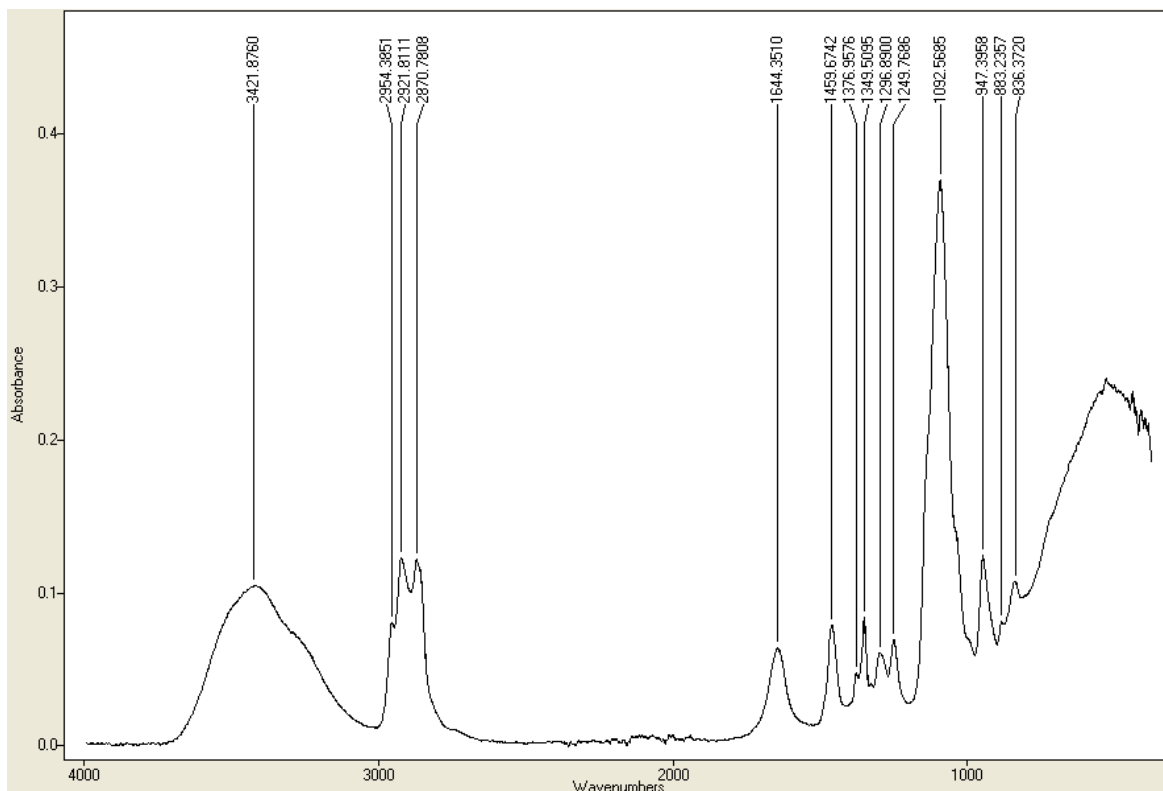
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1021,2445	vC-O-C/C-C-O
1075,7970	vC-O-C/C-C-O
1151,0204	vC-O-C/C-C-O
1375,7215	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1457,2878	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1639,5822	δH-O-H
2855,1500	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2924,0447	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2953,9269	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3344,8390	vO-H



**Figura 46-Espectro do IMBENTIN™ C91/060.**

**Tabela 8- Tabela de correlação para o IMBENTIN™ C91/060.**

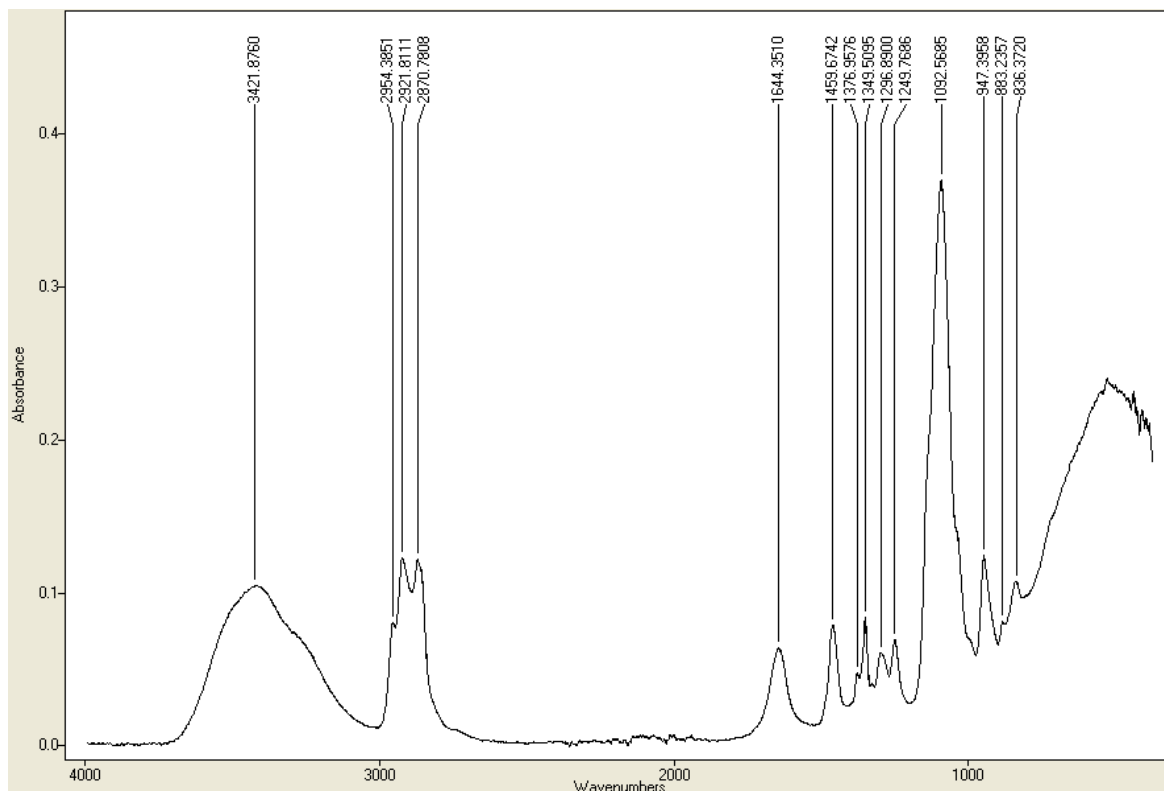
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
721,8404	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
847,8171	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
1101,7131	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1248,8284	$\nu\text{C-O}$
1296,2886	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,5477	$\delta\text{O-H}$
1458,9439	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
2854,8351	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2922,3074	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3463,9191	$\nu\text{O-H}$



**Figura 47-Espectro do MARLIPAL® 31-985.**

**Tabela 9- Tabela de correlação para o MARLIPAL® 31-985.**

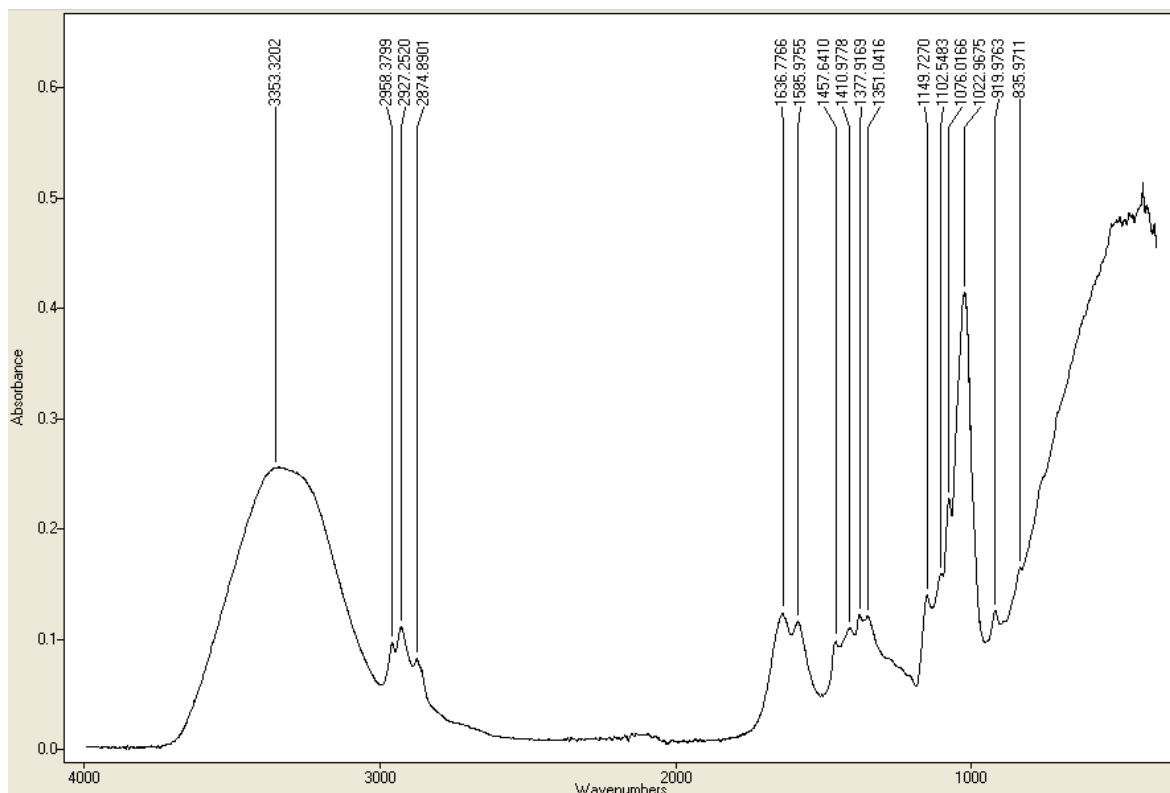
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
838,0520	$\nu$ C-O-C simétrico
947,1667	$\delta$ CH
1092,3346	$\nu$ C-O-C assimétrico
1249,7161	$\nu$ C-O
1296,4461	$\delta$ CH <sub>2</sub> “torção”
1349,5191	$\delta$ O-H
1377,0388	$\delta$ CH <sub>2</sub> “oscilação”
1459,1683	$\delta$ CH <sub>2</sub> “tesoura”
1643,6398	$\delta$ H-O-H
2870,7140	$\nu$ C-H simétrico sp <sup>3</sup>
2921,6774	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2954,3087	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3416,1964	$\nu$ O-H



**Figura 48-Espectro do MARLOX® OP1.**

**Tabela 10- Tabela de correlação para o MARLOX® OP1.**

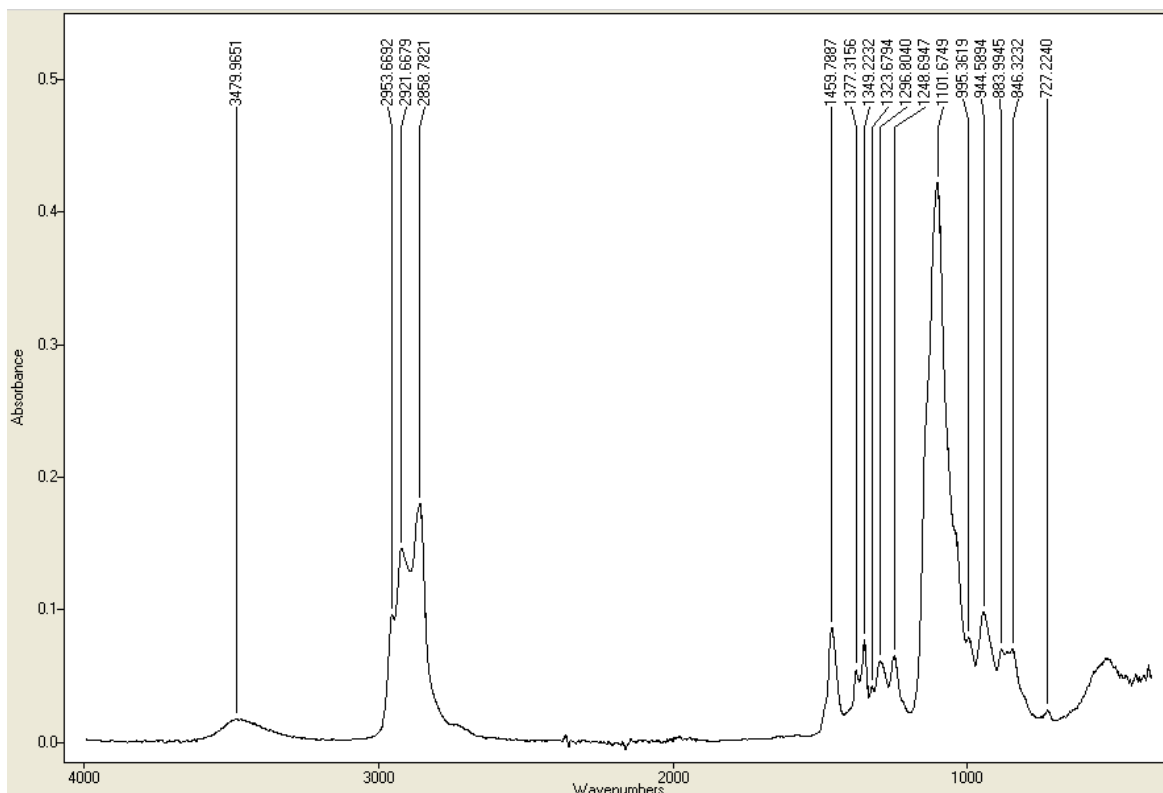
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
722,5944	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
862,7940	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
943,9975	$\delta\text{CH}$
1098,1097	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1250,3413	$\nu\text{C-O}$
1296,8136	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,2709	$\delta\text{O-H}$
1373,3685	$\delta\text{CH}_2$ “oscilação”
1457,4023	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
2857,6319	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2923,0568	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
2953,0750	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3483,8310	$\nu\text{O-H}$



**Figura 49-Espectro do TEGOTENS® G826C.**

**Tabela 11- Tabela de correlação para o TEGOTENS® G826C.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1022,8004	$\nu$ C-O-C/C-C-O
1076,0166	$\nu$ C-O-C/C-C-O
1103,0781	$\nu$ C-O-C/C-C-O
1149,8511	$\nu$ C-O-C/C-C-O
1351,0130	$\delta$ O-H
1377,8310	$\delta$ CH <sub>2</sub> “oscilação”
1411,0303	$\nu$ CO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1458,3569	$\delta$ CH <sub>2</sub> “tesoura”
1586,5721	$\nu$ CO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1638,4614	$\delta$ H-O-H
2874,8042	$\nu$ C-H simétrico sp <sup>3</sup>
2927,9202	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2958,3608	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3340,0042	$\nu$ O-H



**Figura 50-Espectro do TRIDAC® ISO-6.**

**Tabela 12- Tabela de correlação para o TRIDAC® ISO-6.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
726,6751	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
847,2396	$\nu\text{C-O-C}$ simétrico
944,6896	$\delta\text{CH}$
1101,6558	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1248,8284	$\nu\text{C-O}$
1296,2122	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1349,3568	$\delta\text{O-H}$
1377,3284	$\delta\text{CH}_2$ “oscilação”
1459,6933	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
2858,4623	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2921,5247	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
2953,7646	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3468,3721	$\nu\text{O-H}$





## 7.2- Tensioativos aniônicos.

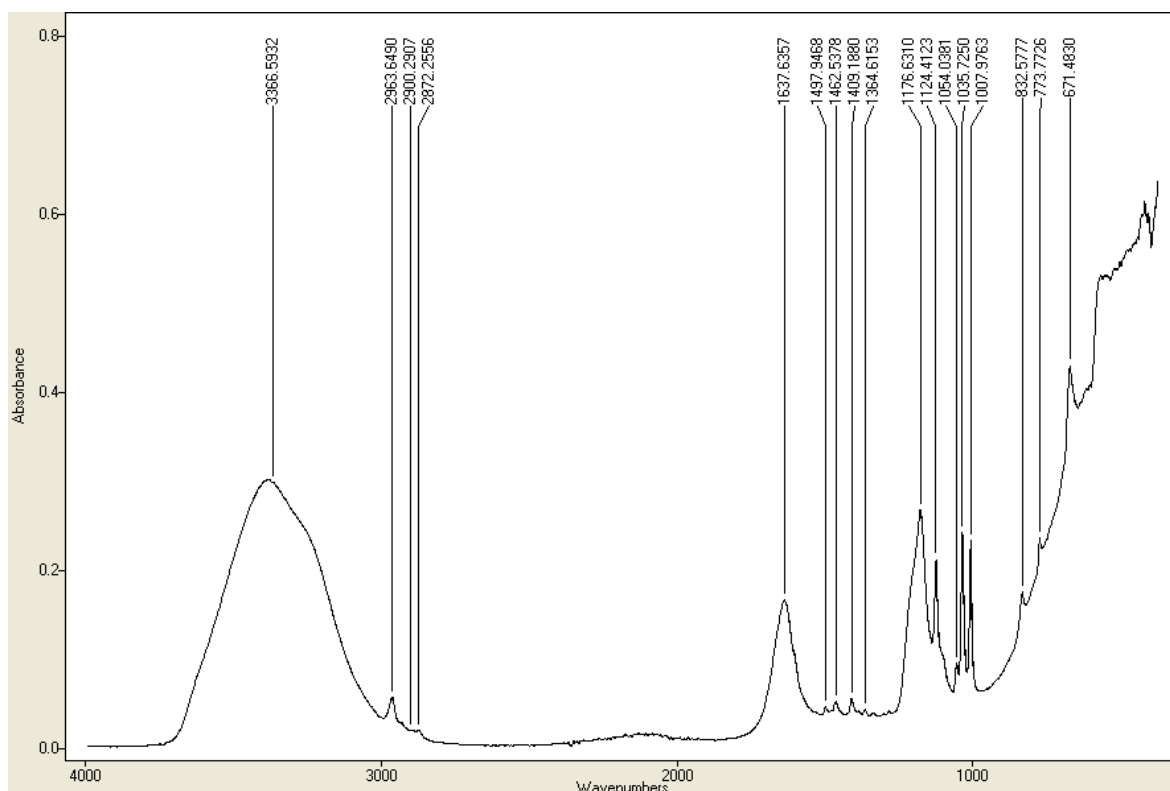


Figura 51- Espectro do cumeno sulfonato de sódio.

Tabela 13- Tabela de correlação para o cumeno sulfonato de sódio.

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
832,4918	$\delta$ CH
1007,9763	$\nu$ S=O
1035,7250	$\nu$ S=O
1053,9760	$\nu$ S-O simétrico
1124,4028	$\nu$ S-O simétrico
1176,4878	$\nu$ S-O assimétrico
1301,5625	$\delta$ CH <sub>2</sub> "torção"
1385,6870	$\delta$ CH <sub>2</sub> "oscilação"
1462,6810	$\delta$ CH <sub>2</sub> "tesoura"
1497,6080	$\nu$ C=C
1603,0000	$\nu$ C=C
1637,4734	$\delta$ H-O-H
2872,9524	$\nu$ C-H simétrico sp <sup>3</sup>
2963,2290	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3378,3771	$\nu$ O-H

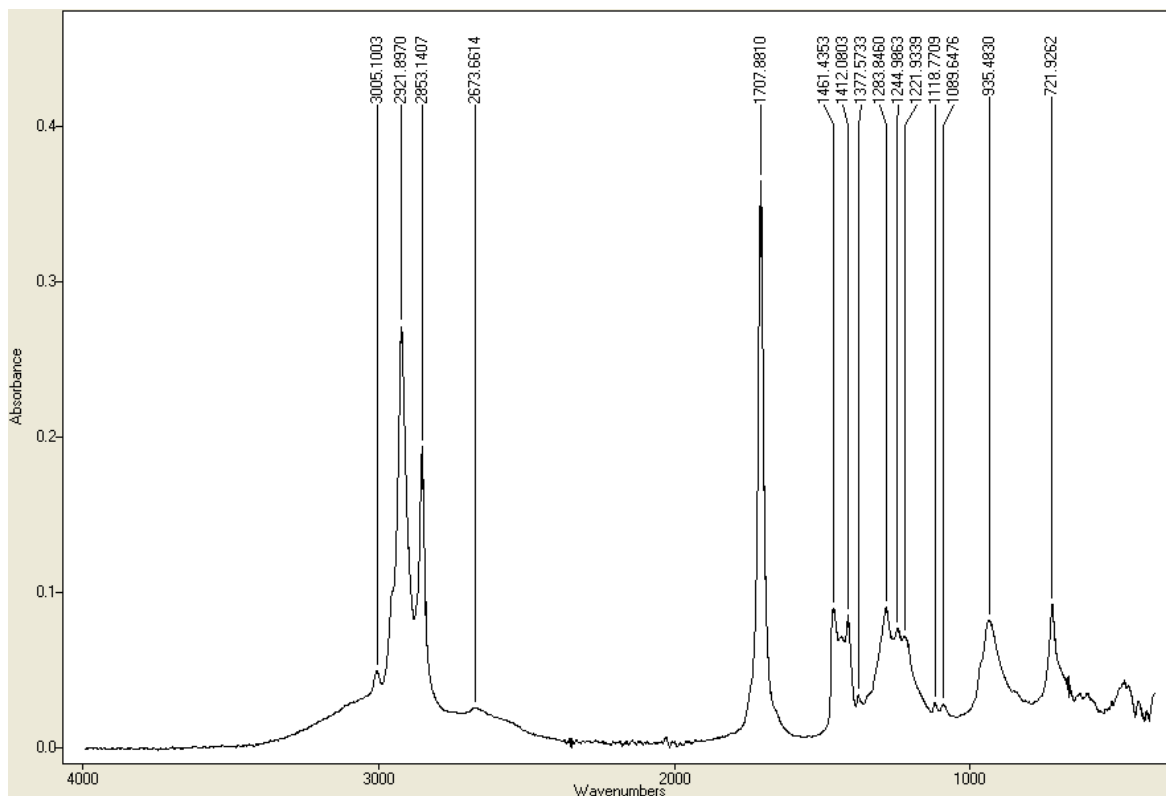
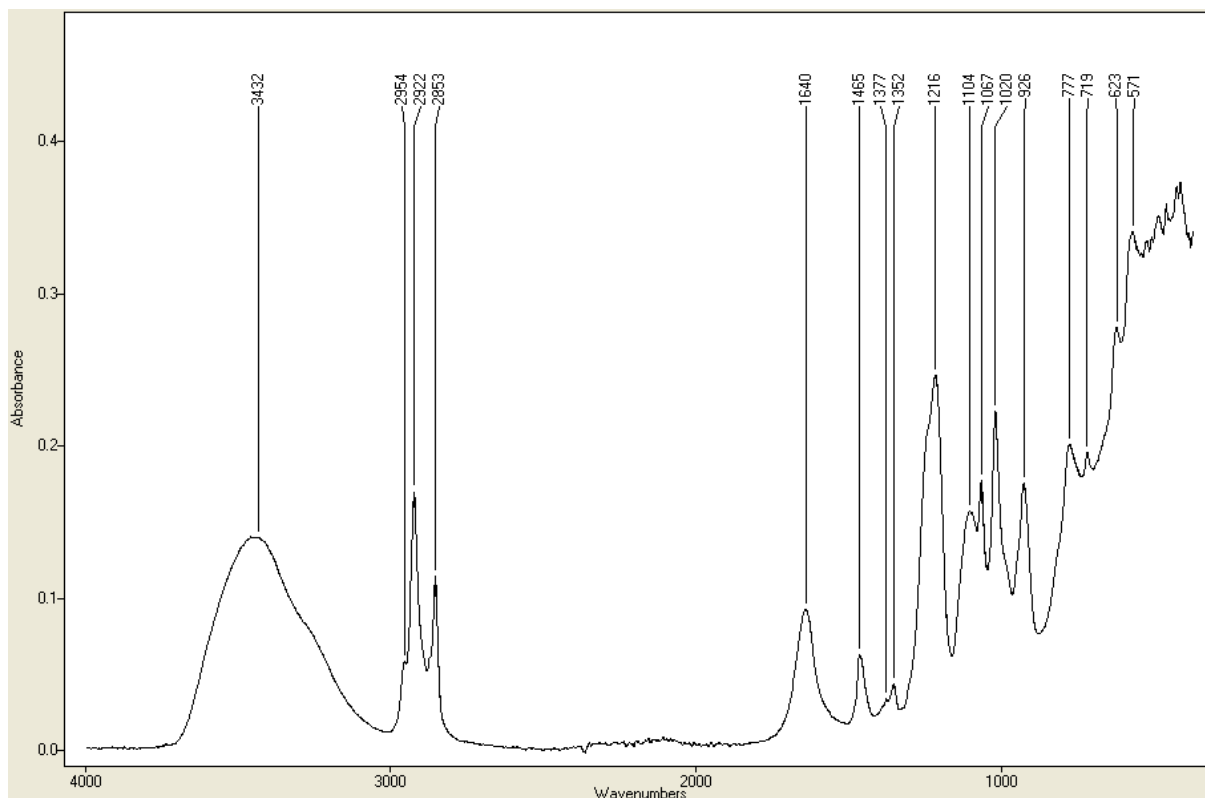


Figura 52-Espectro do CYPAFRAK® OL-75.

Tabela 14- Tabela de correlação para o CYPAFRAK® OL-75.

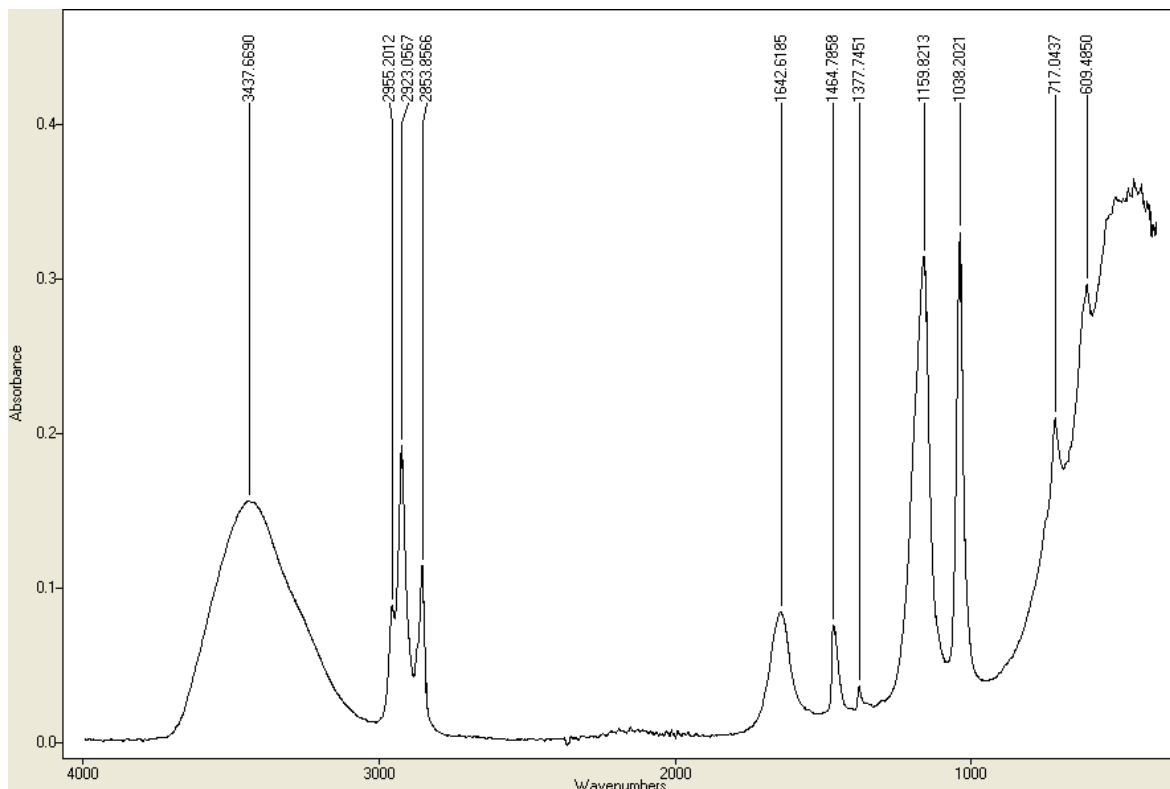
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
722,3176	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
934,6716	$\delta\text{CH}$
1283,6694	$\delta\text{CH}_2$ “torção”
1377,6210	$\delta\text{CH}_2$ “oscilação”
1460,5667	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
1707,9097	$\nu\text{C}=\text{O}$
2853,1025	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2855,1253	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3005,4678	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^2$



**Figura 53- Espectro do LES.**

**Tabela 15- Tabela de correlação para o LES.**

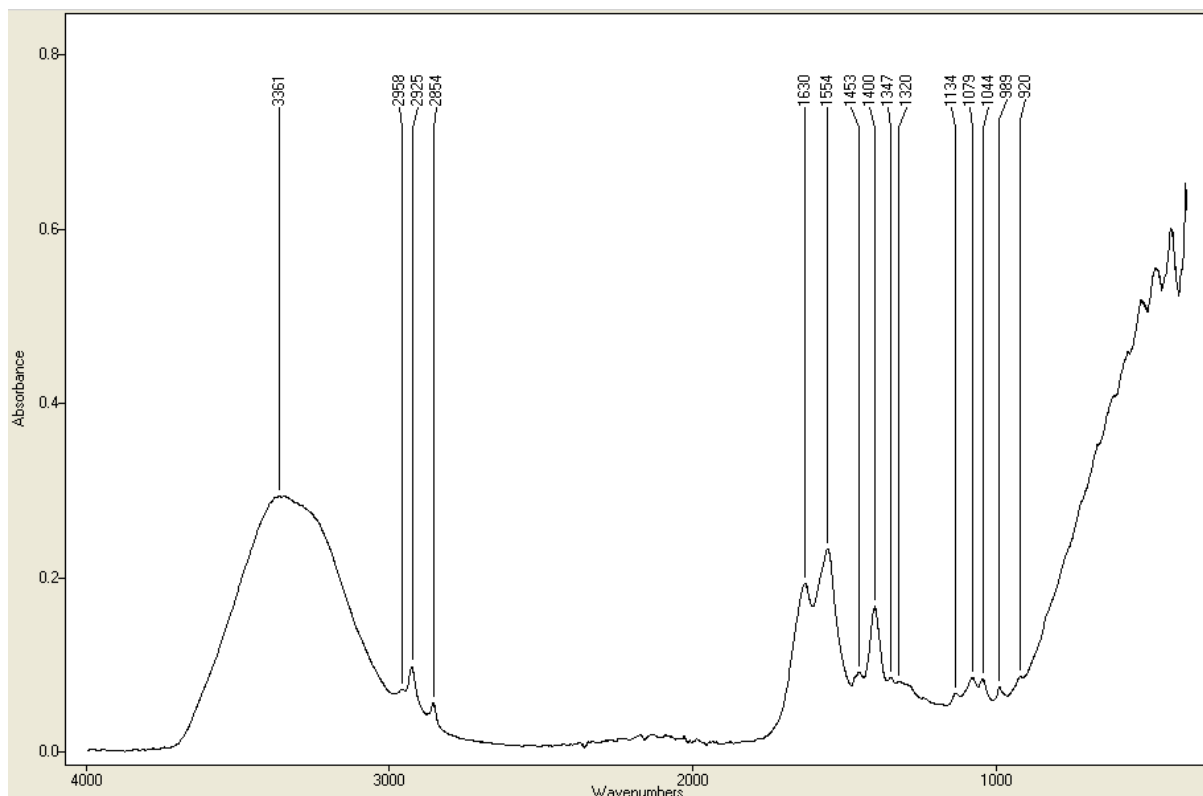
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
719,9551	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
926,6438	$\delta\text{CH}$
1067,1011	$\nu\text{SO}_2$ simétrico <sup>15</sup>
1103,7320	$\nu\text{C-O-C}$ assimétrico
1216,8128	$\nu\text{SO}_2$ assimétrico <sup>15</sup>
1352,5355	$\delta\text{O-H}$
1377,6115	$\delta\text{CH}_2$ “oscilação”
1464,2321	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
1638,1177	$\delta\text{H-O-H}$
2853,1789	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2954,7860	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3453,6768	$\nu\text{O-H}$



**Figura 54- Espectro do MARLON®.**

**Tabela 16- Tabela de correlação para o MARLON®.**

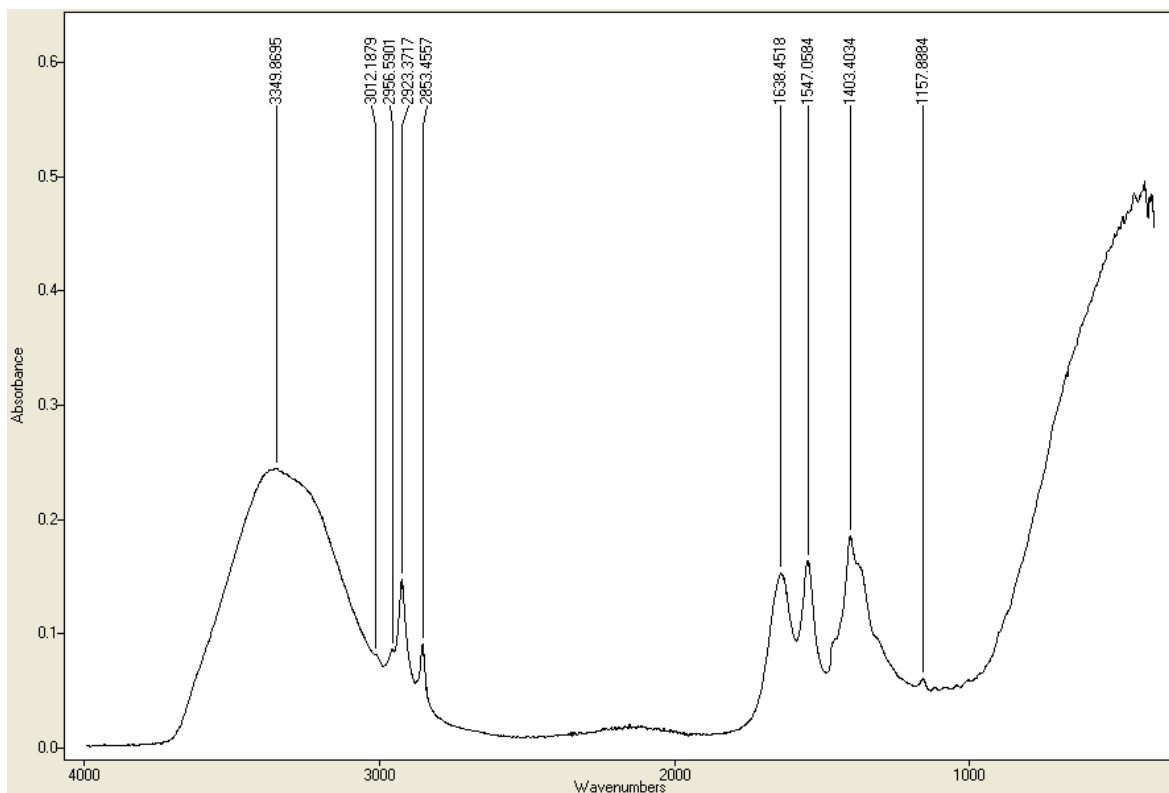
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
717,1965	$\delta(\text{CH}_2)_n, n>3$
1038,0494	$\nu\text{SO}_3$ simétrico
1159,7545	$\nu\text{SO}_3$ assimétrico
1377,8119	$\delta\text{CH}_2$ “oscilação”
1465,0340	$\delta\text{CH}_2$ “tesoura”
1642,6185	$\delta\text{H-O-H}$
2854,1430	$\nu\text{C-H}$ simétrico $\text{sp}^3$
2923,0185	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
2955,4208	$\nu\text{C-H}$ assimétrico $\text{sp}^3$
3440,7761	$\nu\text{O-H}$



**Figura 55-Espectro do PROTELAN® AGL95.**

**Tabela 17- Tabela de correlação para o PROTELAN® AGL95.**

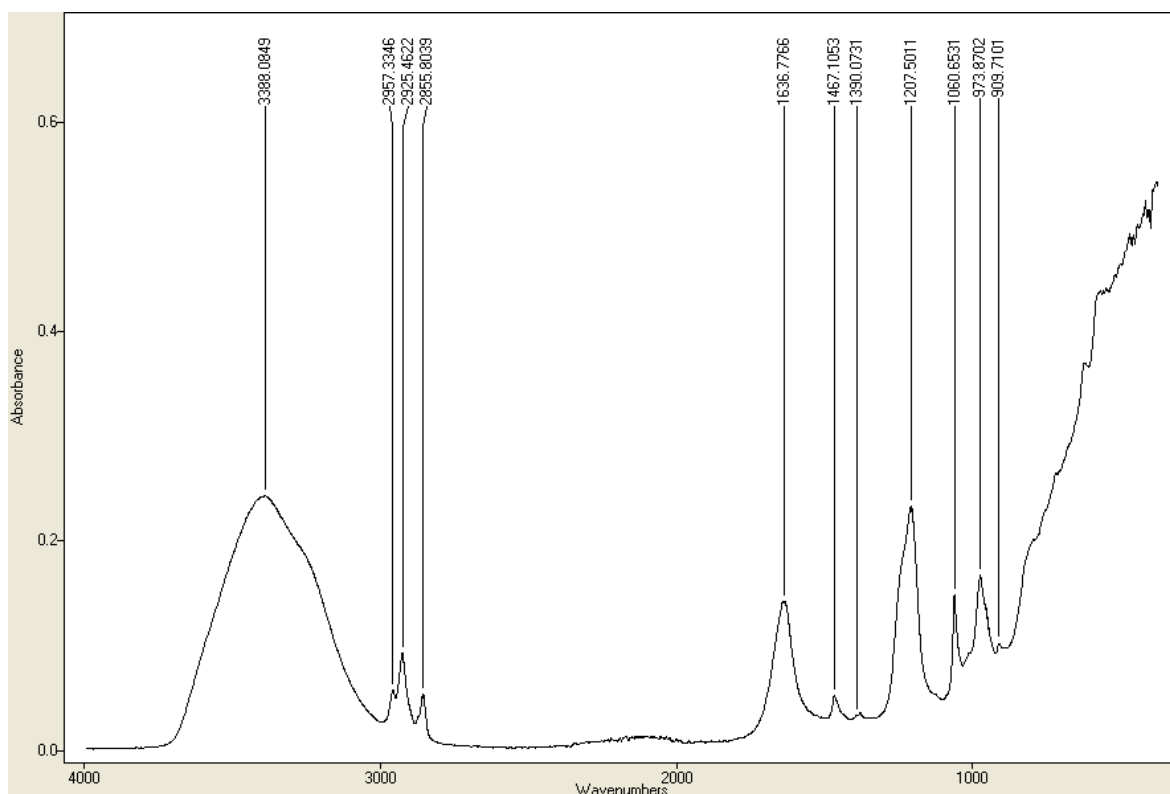
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1400,9216	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1453,2882	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1554,9526	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1630,4909	δH-O-H
2854,5678	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2925,2093	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2958,1889	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3363,4480	vO-H



**Figura 56- Espectro do sabão.**

**Tabela 18- Tabela de correlação para o sabão.**

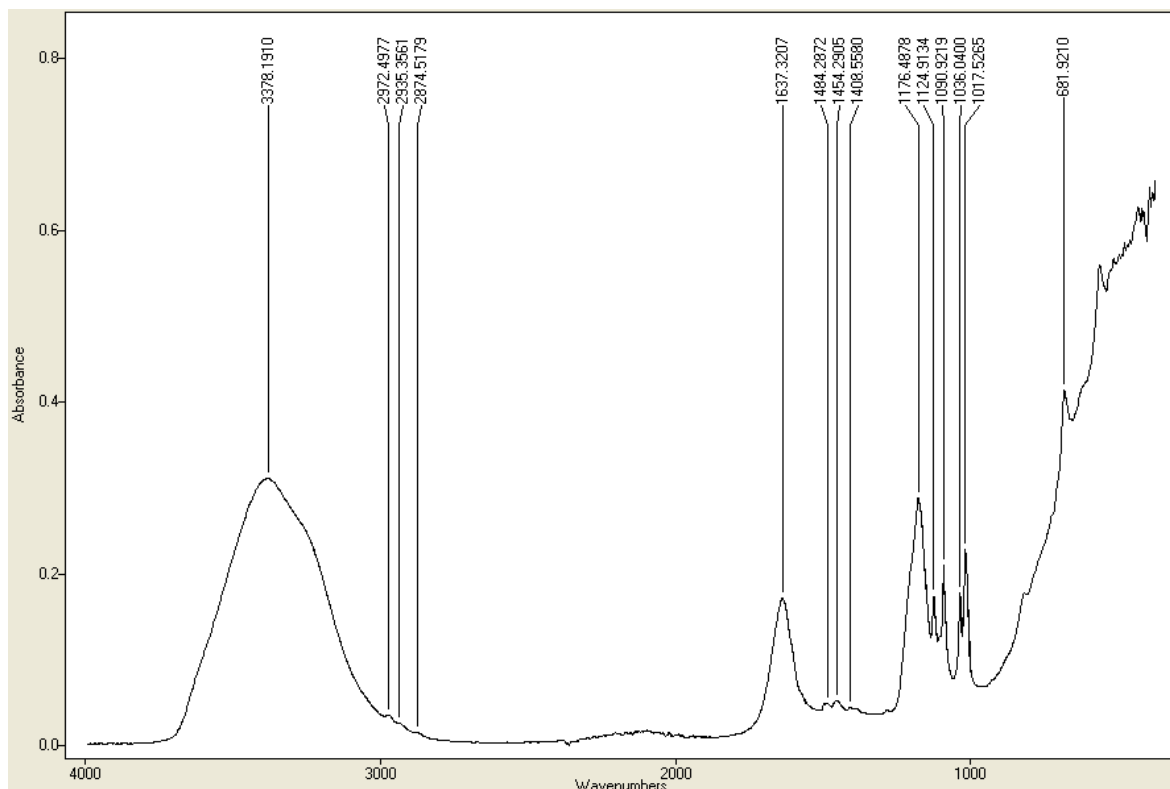
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1403,4798	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1547,3161	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1638,7382	δH-O-H
2853,3793	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2923,3527	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,2989	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3359,8684	vO-H



**Figura 57- Espectro do SULFETAL 4069.**

**Tabela 19- Tabela de correlação para o SULFETAL 4069.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1060,6149	vSO <sub>2</sub> simétrico
1207,3006	vSO <sub>2</sub> assimétrico
1378,5565	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1466,6997	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1636,8100	δH-O-H
2855,8325	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2925,4431	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2957,3919	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3387,5456	vO-H



**Figura 58- Espectro do xileno sulfonato de sódio.**

**Tabela 20- Tabela de correlação para o xileno sulfonato de sódio.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1036,0591	vSO <sub>3</sub> simétrico
1176,5641	vSO <sub>3</sub> assimétrico
1453,6414	vC=C
1484,3540	vC=C
1494,6680	vC=C
1637,4544	δH-O-H
2875,6443	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2936,2653	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2973,9629	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3383,9517	vO-H



### 7.3- Tensioativos catiónicos.

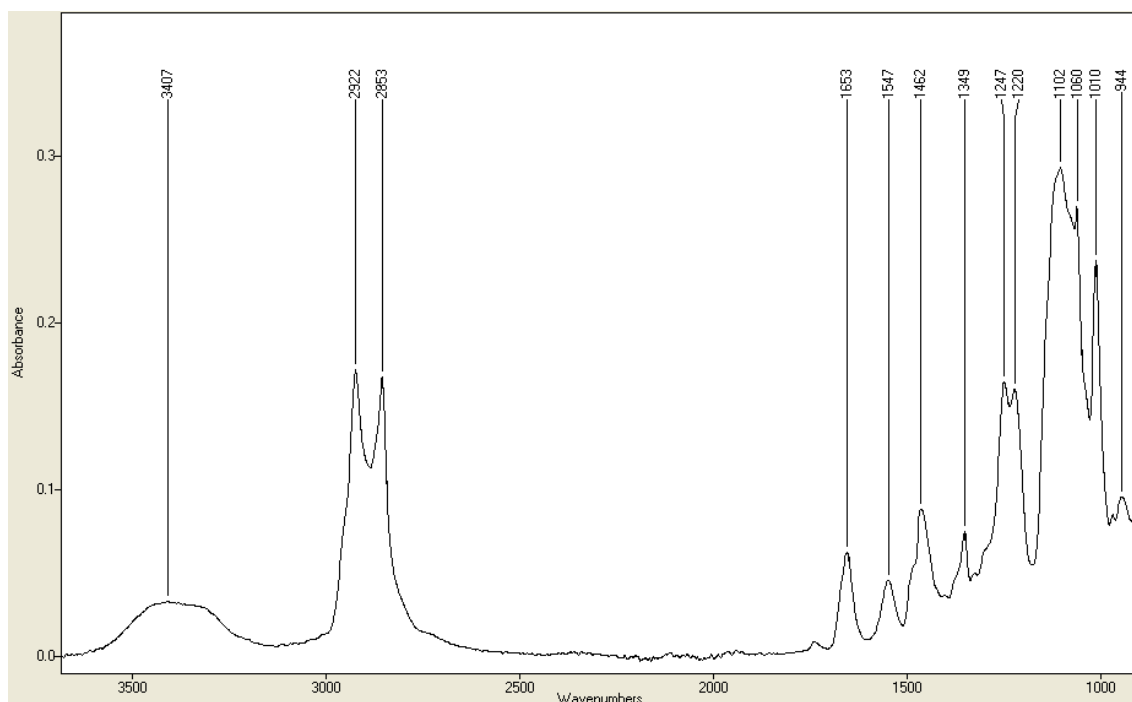
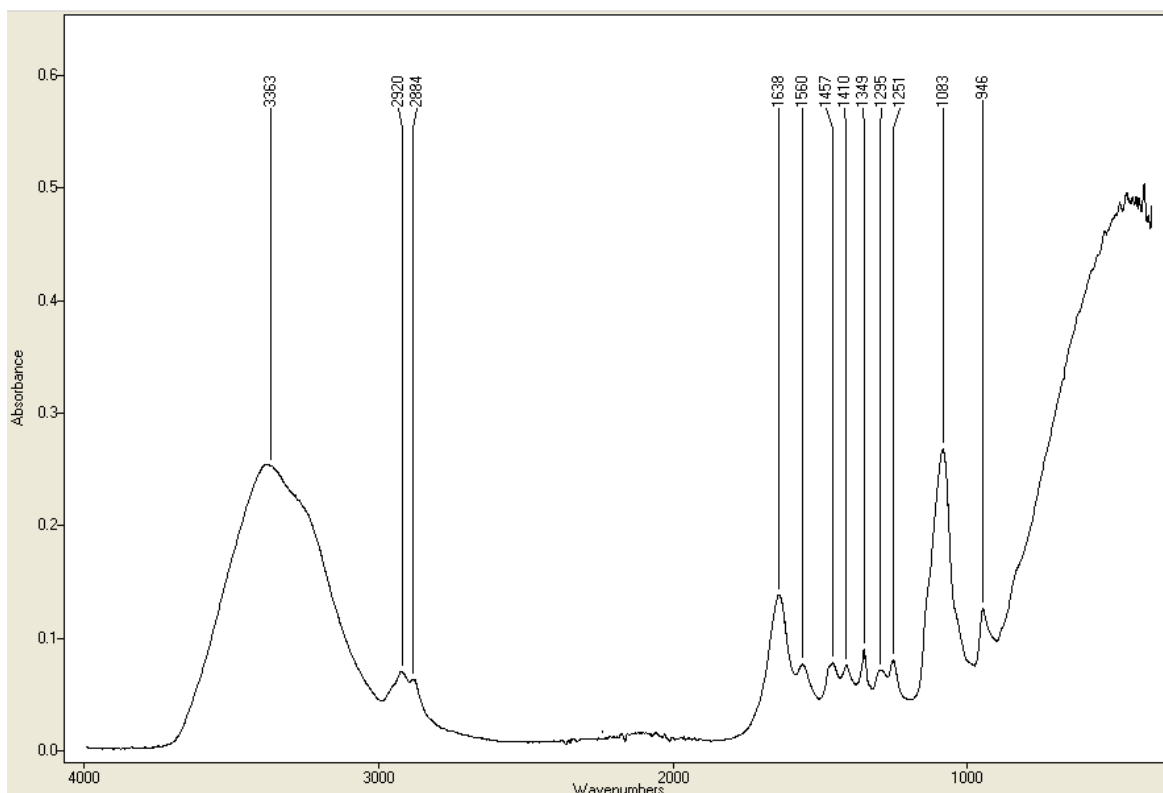


Figura 59- Espectro do Demelan® AU-39/Bio.

Tabela 21- Tabela de correlação para o Demelan® AU-39/Bio.

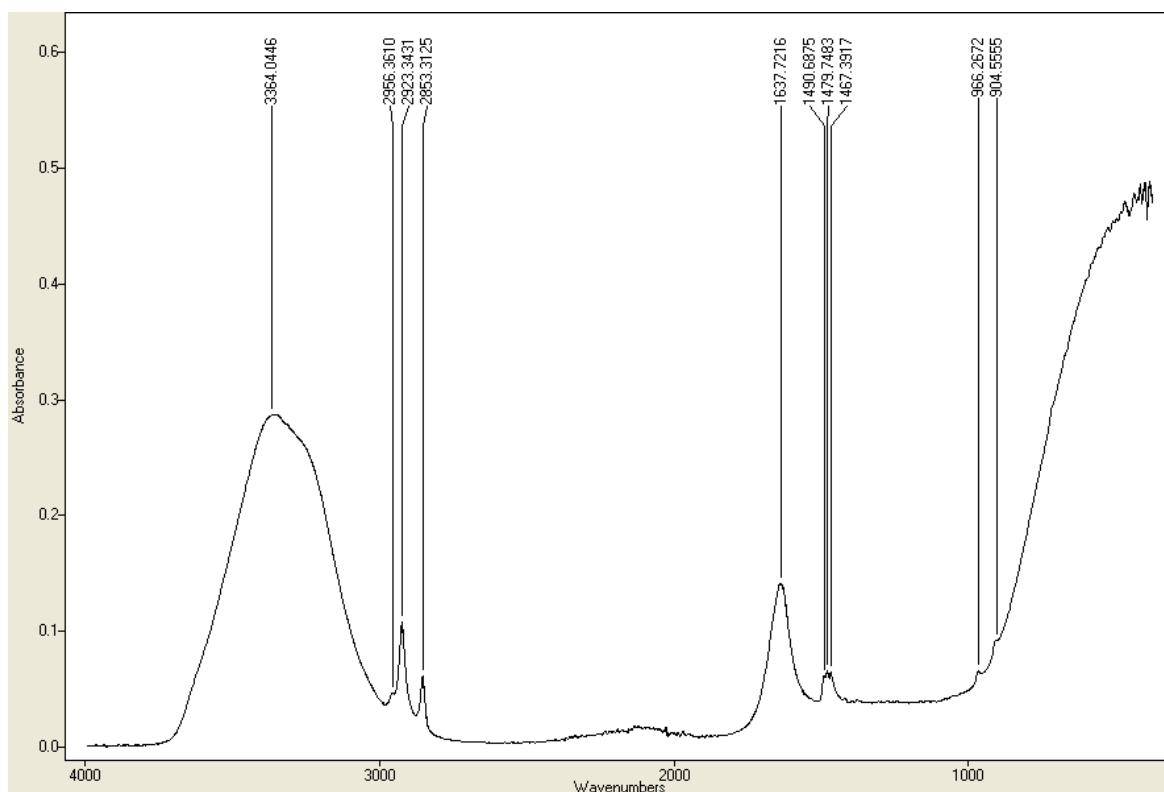
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
844,2709	vC-O-C simétrico
1011,6847	vC-C-O assimétrico
1100,4817	vC-O-C assimétrico
1247,7640	vC-O
1349,8627	δO-H
1460,1132	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1548,8291	δN-H
1652,9419	δH-O-H
2854,1907	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2922,7035	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3415,2991	vO-H



**Figura 60-Espectro do Dehyquart® H 81.**

**Tabela 22- Tabela de correlação para o Dehyquart® H 81.**

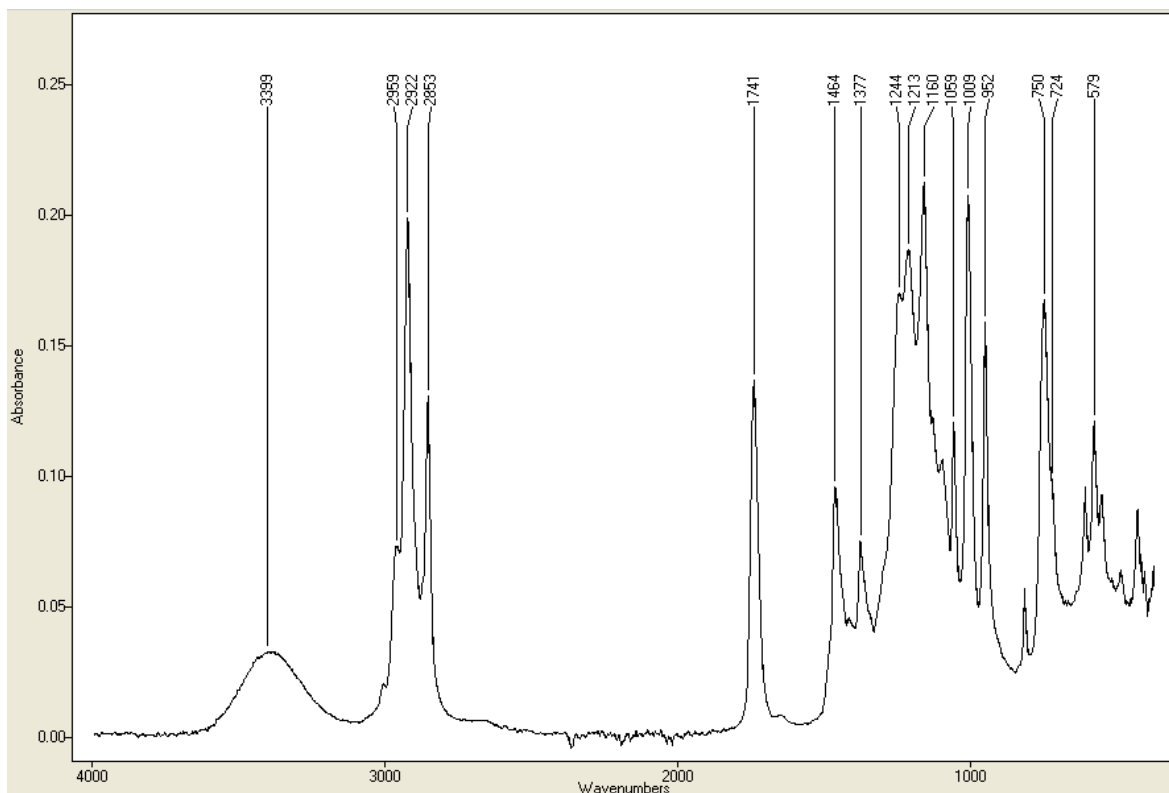
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1082,9228	vC-O-C assimétrico
1251,7875	vC-O
1293,2722	δCH <sub>2</sub> “torção”
1350,1062	δO-H
1456,8869	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1561,0474	δN-H
1639,0532	δH-O-H
2879,9731	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2920,8851	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3380,2576	vO-H



**Figura 61- Espectro do QUARTAMIN® 60W30.**

**Tabela 23- Tabela de correlação para o QUARTAMIN® 60W30.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1467,3630	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1637,4830	δH-O-H
2853,2743	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2923,2954	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,2608	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3366,0730	vO-H

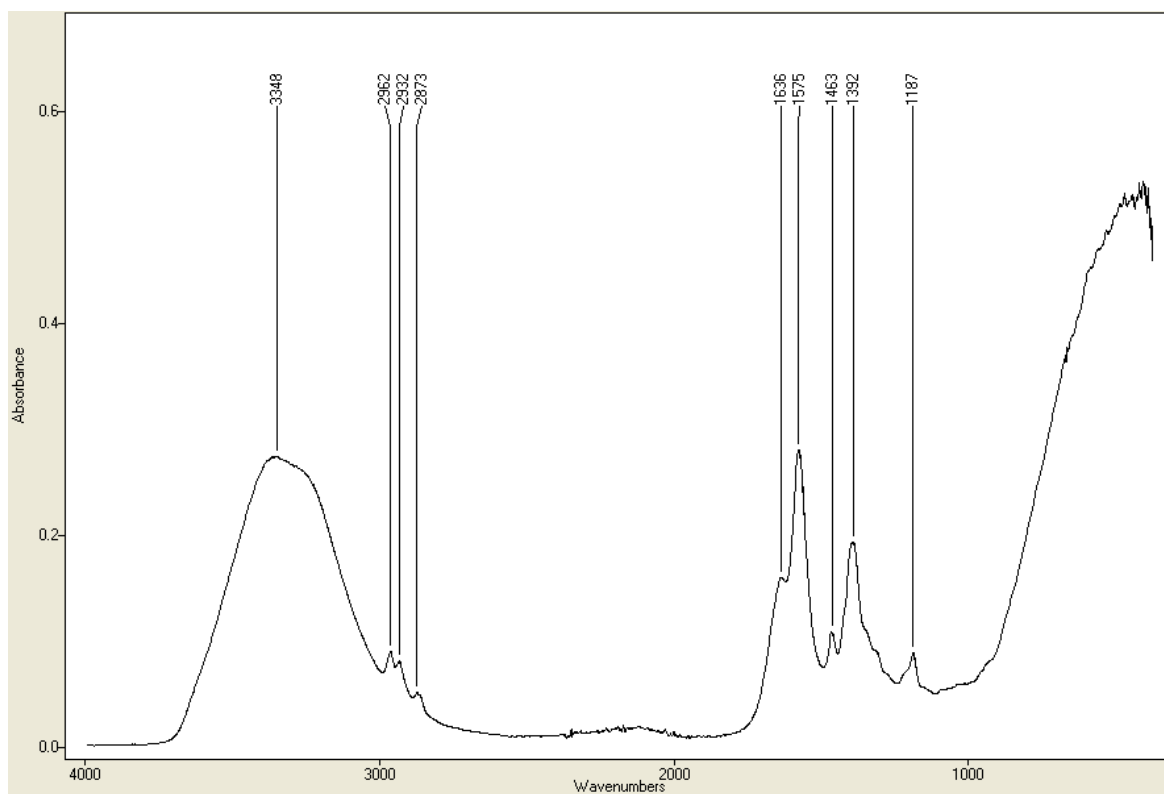


**Figura 62-Espectro do TETRANYL® AT1.**

**Tabela 24- Tabela de correlação para o TETRANYL® AT1.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1009,6611	vSO <sub>2</sub> simétrico
1059,0352	vC-C-O assimétrico
1160,9525	vC-O-C assimétrico
1213,4670	vSO <sub>2</sub> assimétrico
1244,7668	vSO <sub>2</sub> assimétrico
1377,6115	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1463,8169	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1741,0013	vC=O
2853,3125	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2922,7131	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2958,9955	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3005,5060	vC-H simétrico sp <sup>2</sup>
3402,4938	vO-H

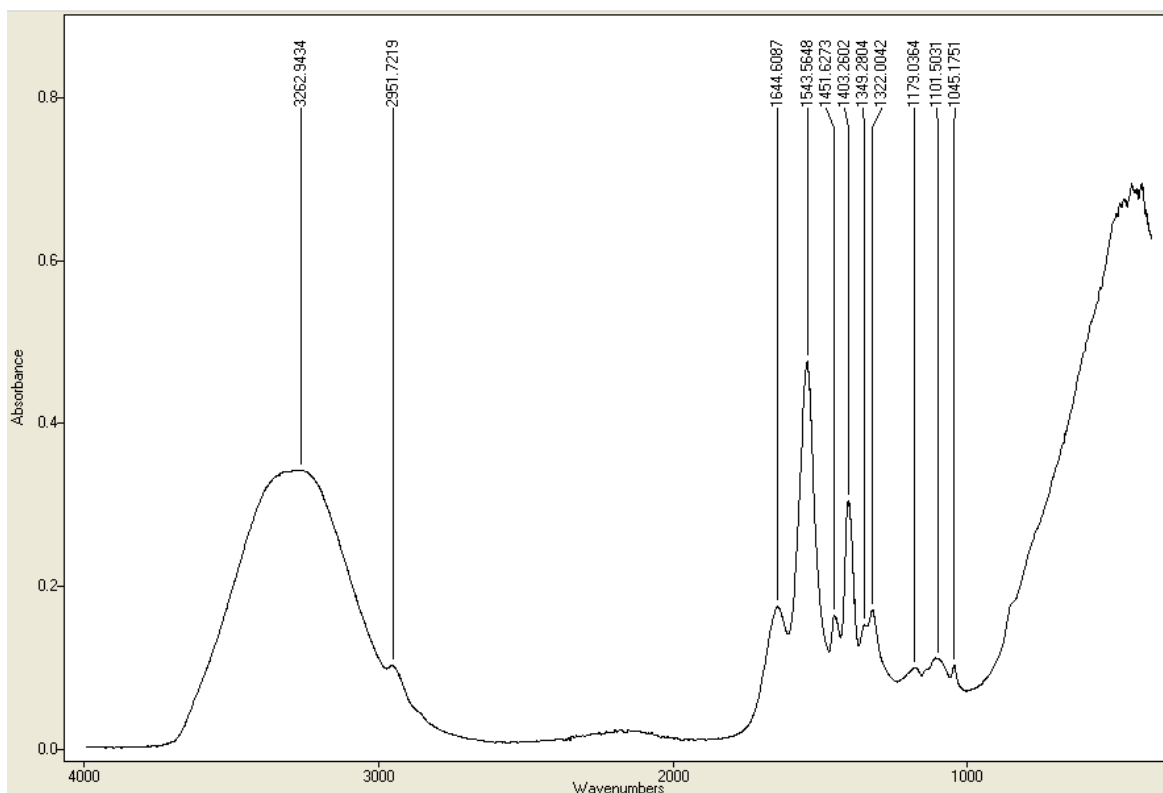
## 7.4- Tensioativos anfotéricos.



**Figura 63-Espectro do AMPHOTENSID® EH.**

**Tabela 25- Tabela de correlação para o AMPHOTENSID® EH.**

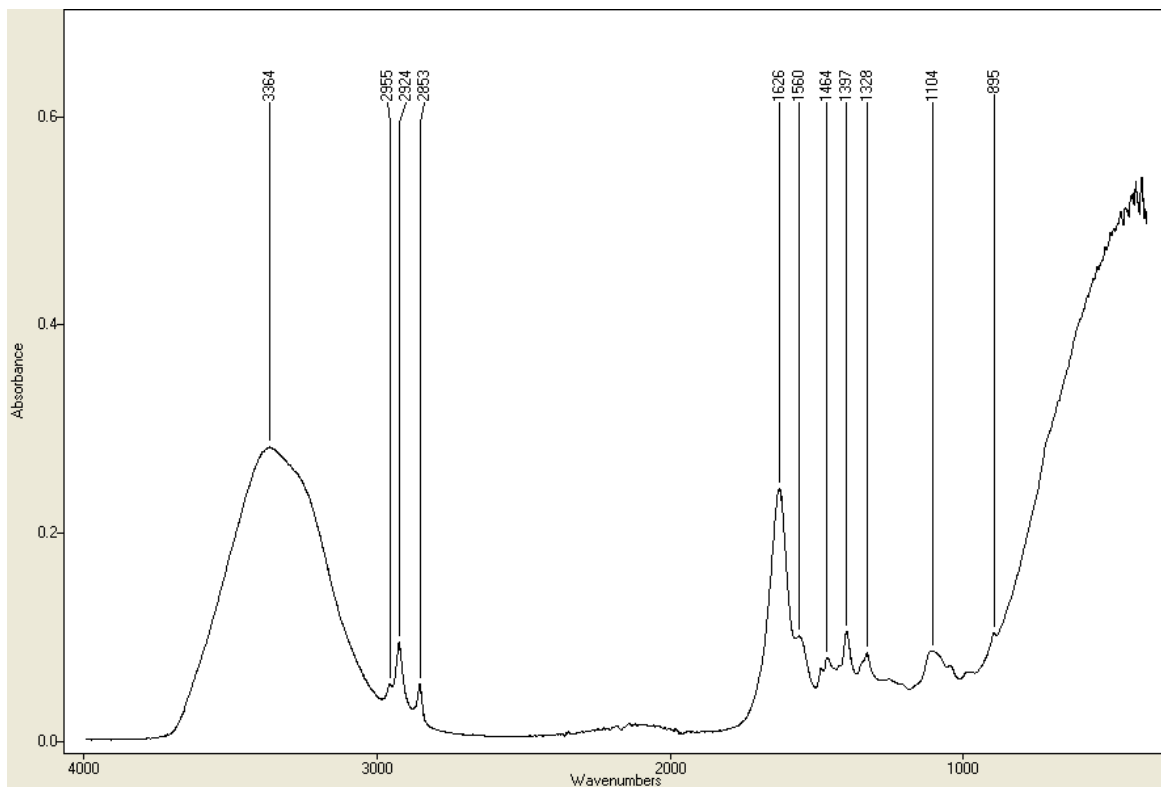
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1187,1262	vC-O
1391,6624	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1462,8719	δCH <sub>2</sub> "oscilação"
1574,9218	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1634,0514	δH-O-H
2873,6970	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2933,0366	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2962,2745	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3350,4422	vO-H



**Figura 64-Espectro do BEDET® TB.**

**Tabela 26- Tabela de correlação para o BEDET® TB.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1045,1751	vC-C-O assimétrico
1101,3217	vC-O-C assimétrico
1179,2846	vC-O
1321,7464	δCH <sub>2</sub> “torção”
1349,2900	δO-H
1403,2316	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1451,4841	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1543,5744	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
2952,9485	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3293,9615	vO-H



**Figura 65-Espectro da betaína.**

**Tabela 27- Tabela de correlação para a betaína.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1107,1731	vC-O-C assimétrico
1397,9339	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1464,1558	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1561,7060	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1627,3695	δH-O-H / Amida I
2853,7421	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2924,2165	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2955,8312	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3371,8337	vO-H





## 7.5- Solventes.

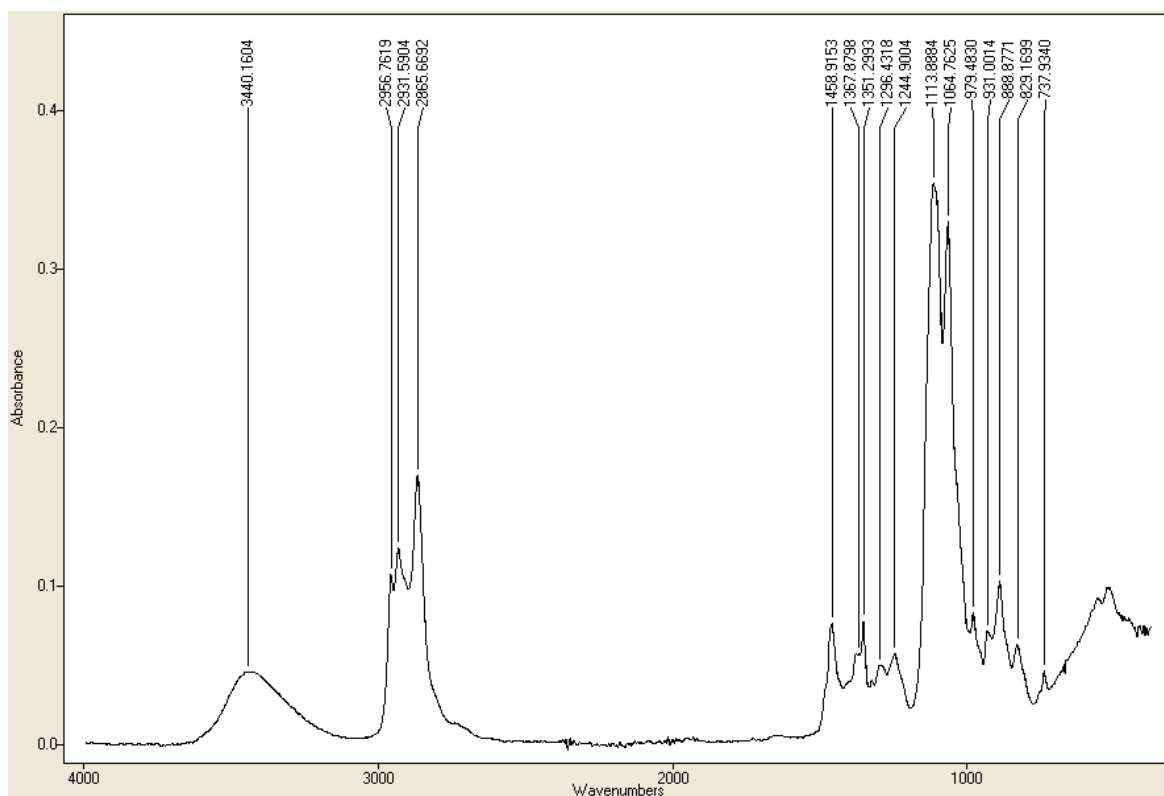
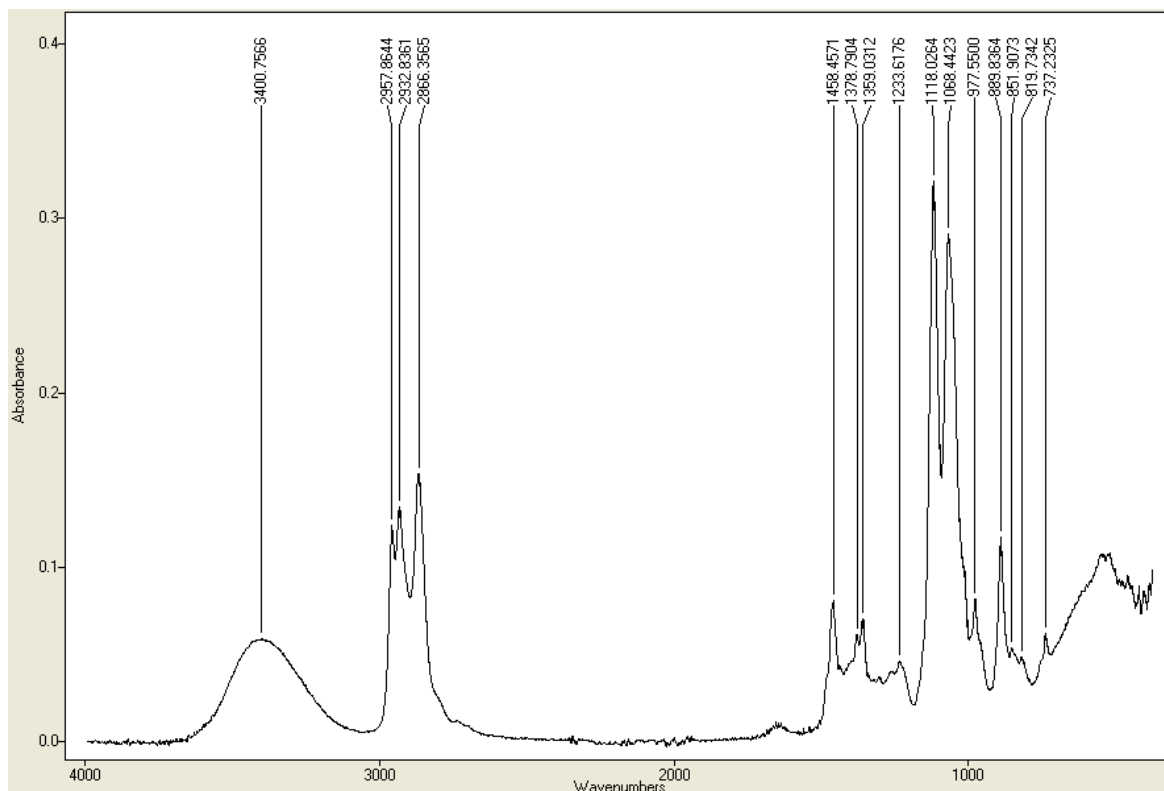


Figura 66- Espetro do BDG.

Tabela 28- Tabela de correlação para o BDG.

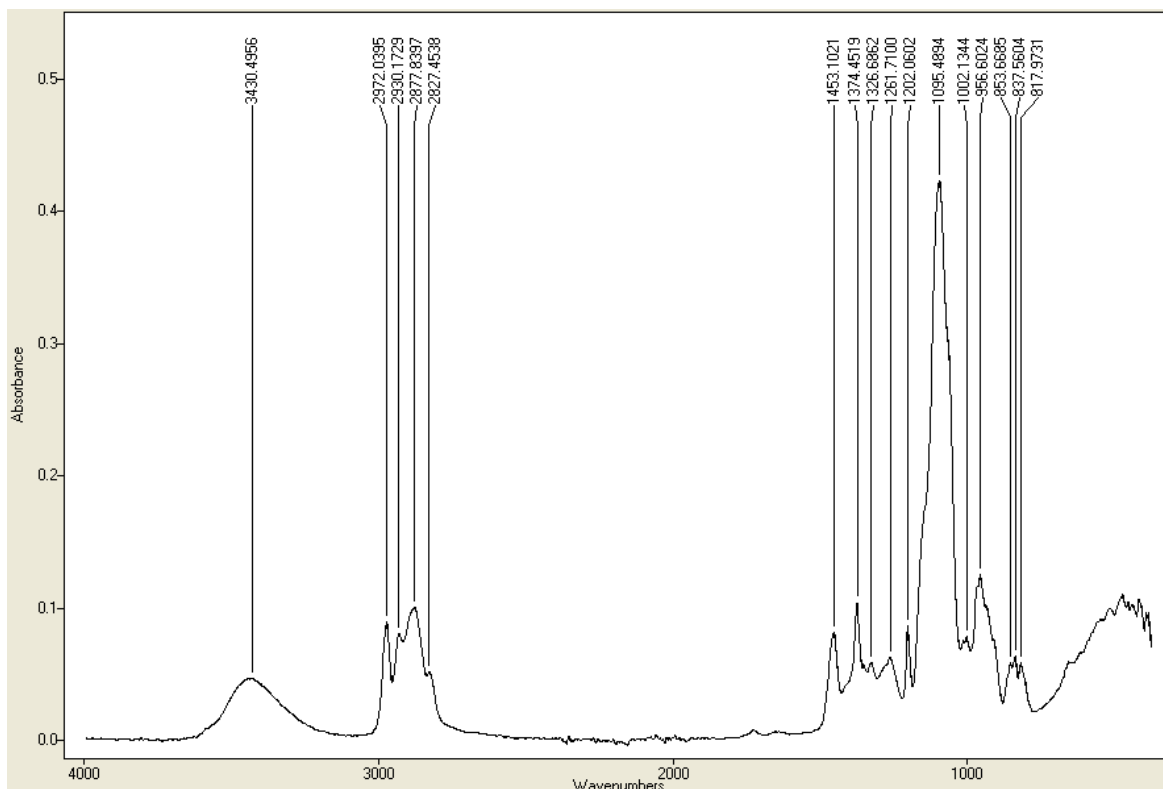
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
888,8866	vC-O-C simétrico
1064,6384	vC-C-O assimétrico
1113,9648	vC-O-C assimétrico
1244,8718	vC-O
1296,2743	δCH <sub>2</sub> “torção”
1351,3279	δO-H
1377,1581	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1458,6098	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2865,4115	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2931,5809	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,6665	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3404,1604	vO-H



**Figura 67- Espectro do BG.**

**Tabela 29- Tabela de correlação para o BG.**

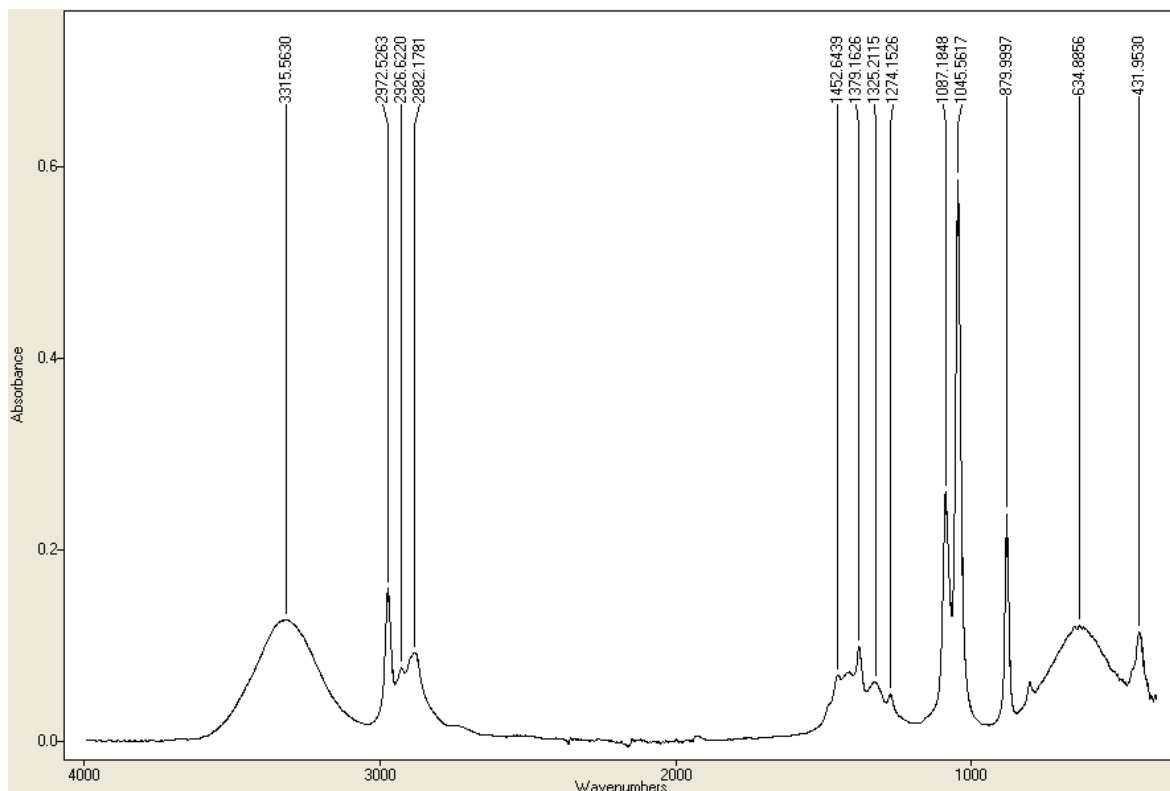
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
889,8555	vC-O-C simétrico
1068,3277	vC-C-O assimétrico
1117,9500	vC-O-C assimétrico
1260,4166	vC-O
1302,2879	δCH <sub>2</sub> “torção”
1358,9453	δO-H
1378,7331	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1458,9057	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2866,3278	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2932,7407	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2957,8644	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3412,7600	vO-H



**Figura 68- Espectro do DPM.**

**Tabela 30- Tabela de correlação para o DPM.**

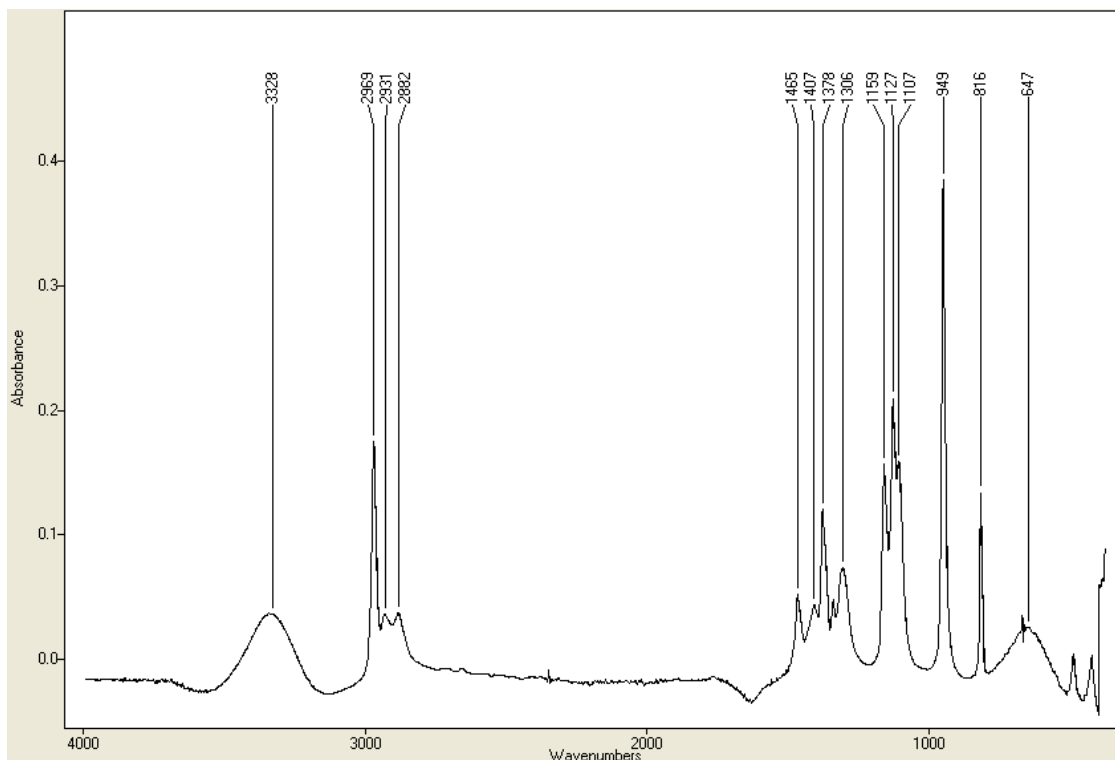
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
853,6971	vC-O-C simétrico
1013,5127	vC-C-O assimétrico
1095,2174	vC-O-C assimétrico
1261,5095	vC-O
1352,0295	δO-H
1374,4424	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1453,0830	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2827,0433	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2877,5915	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2930,3161	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2971,8629	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3430,7438	vO-H



**Figura 69- Espectro do etanol.**

**Tabela 31- Tabela de correlação para o etanol.**

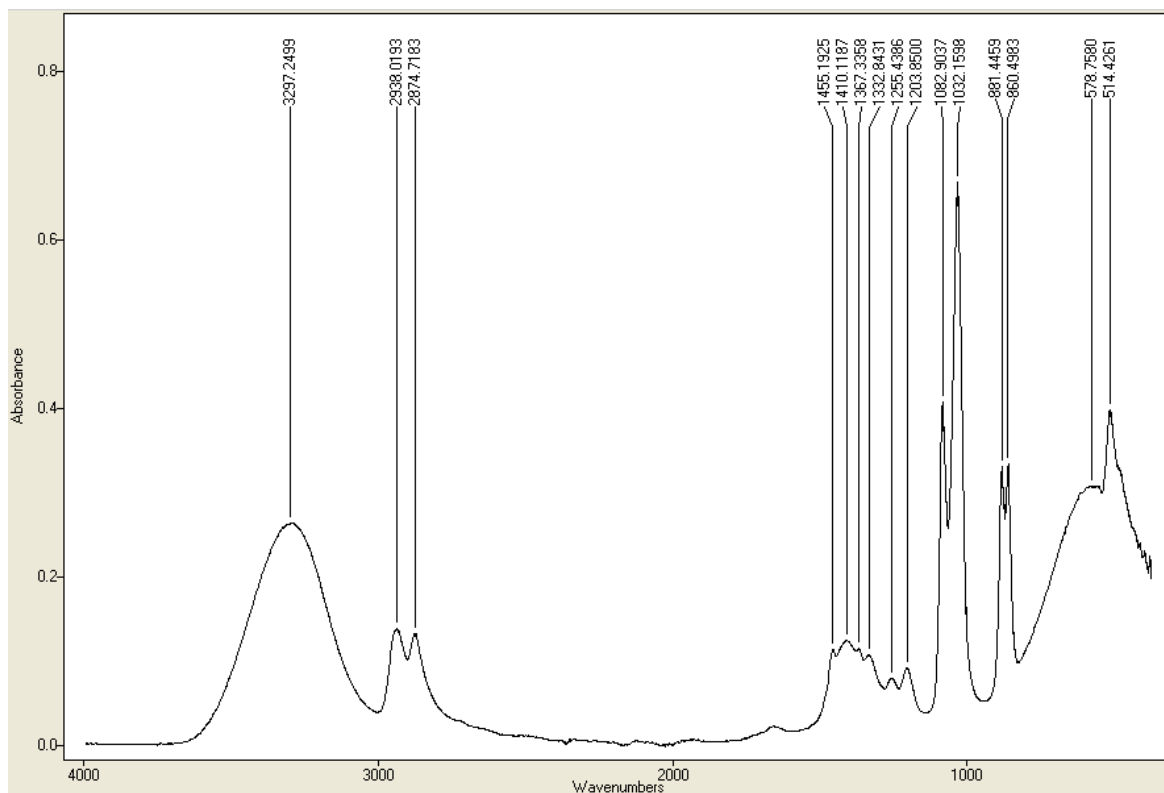
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
430,3303	δC-O
634,4608	δO-H
880,0093	νC-C-O simétrico
1045,4710	νC-C-O assimétrico
1087,1944	νC-C-O assimétrico
1274,1335	νC-O
1327,2638	δO-H
1379,2294	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1452,3432	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2882,2592	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2926,7461	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2972,5168	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3326,2587	νO-H



**Figura 70- Espectro do IPA.**

**Tabela 32- Tabela de correlação para o IPA.**

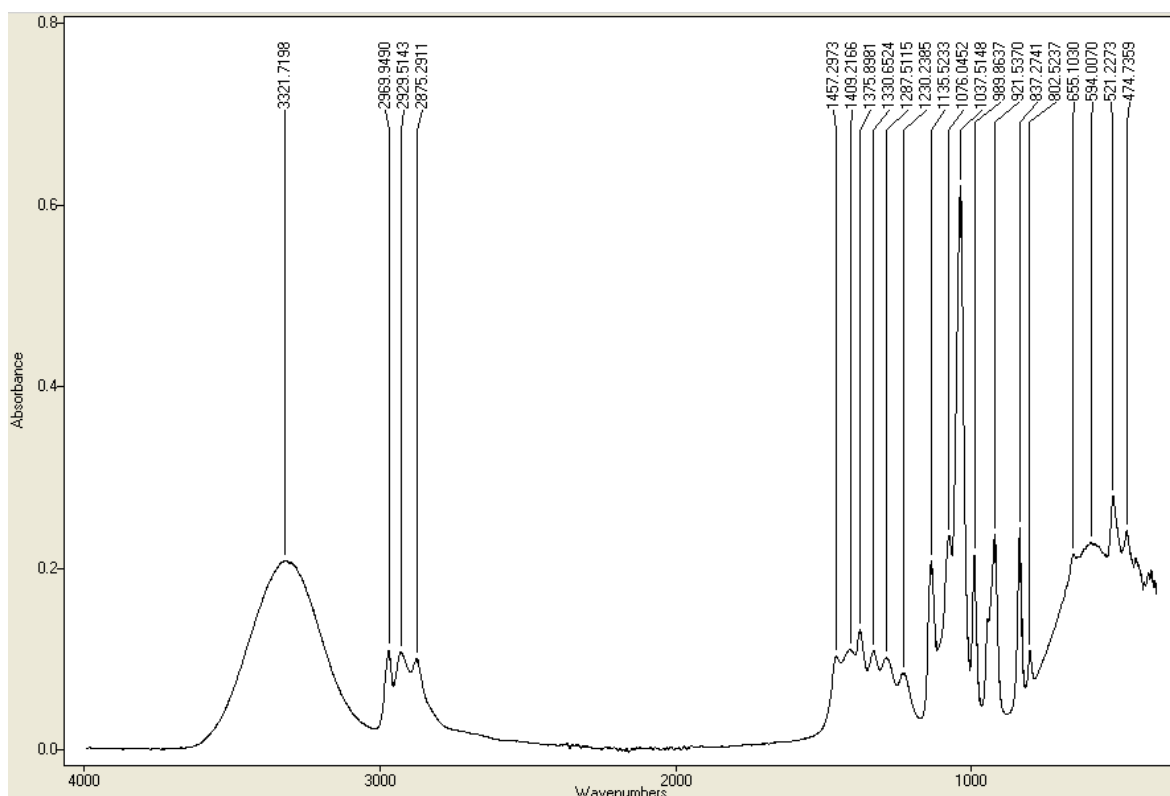
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
426,6075	δC-O
487,3646	δC-O
625,5930	δO-H
816,5937	νC-C-O simétrico
950,8846	νCH <sub>3</sub> -C-CH <sub>3</sub> <sup>13</sup>
1109,7600	νC-C-O simétrico
1128,2639	νC-C-O simétrico
1160,8475	νC-O
1305,5764	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1341,1763	δO-H
1379,3535	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1465,8692	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2830,4320	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2888,5211	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2937,5898	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2970,9656	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3319,4766	νO-H



**Figura 71-Espectro do MEG.**

**Tabela 33- Tabela de correlação para o MEG.**

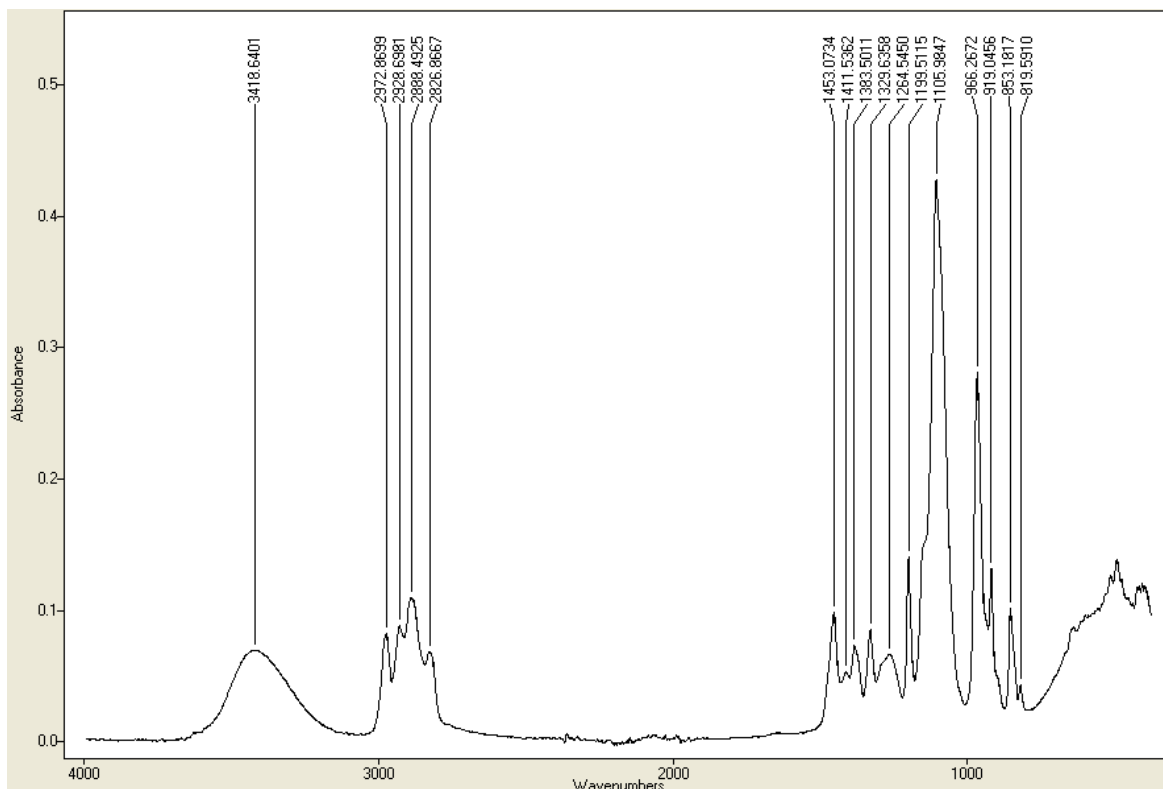
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
881,3886	vC-C-O simétrico
1032,1884	vC-C-O assimétrico
1082,9037	vC-C-O assimétrico
1255,5914	vC-O
1367,5267	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1455,1782	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2874,5942	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2937,8236	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3296,4576	vO-H



**Figura 72- Espectro do MPG.**

**Tabela 34- Tabela de correlação para o MPG.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
837,2454	vC-C-O simétrico
1037,4862	vC-C-O assimétrico
1076,0452	vC-C-O assimétrico
1288,0747	δO-H
1330,9483	δCH <sub>2</sub> “torção”
1375,7883	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1457,1637	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2875,4486	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2930,0011	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2969,9872	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3318,9182	vO-H



**Figura 73- Espectro do PM.**

**Tabela 35- Tabela de correlação para o PM.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
853,1817	vC-O-C simétrico
1105,8893	vC-O-C assimétrico
1199,5020	vC-O
1329,5785	δO-H
1383,4724	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1452,9589	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2826,4372	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2887,0129	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2928,5740	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2972,8317	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3423,2410	vO-H



## 7.6- Diversos.

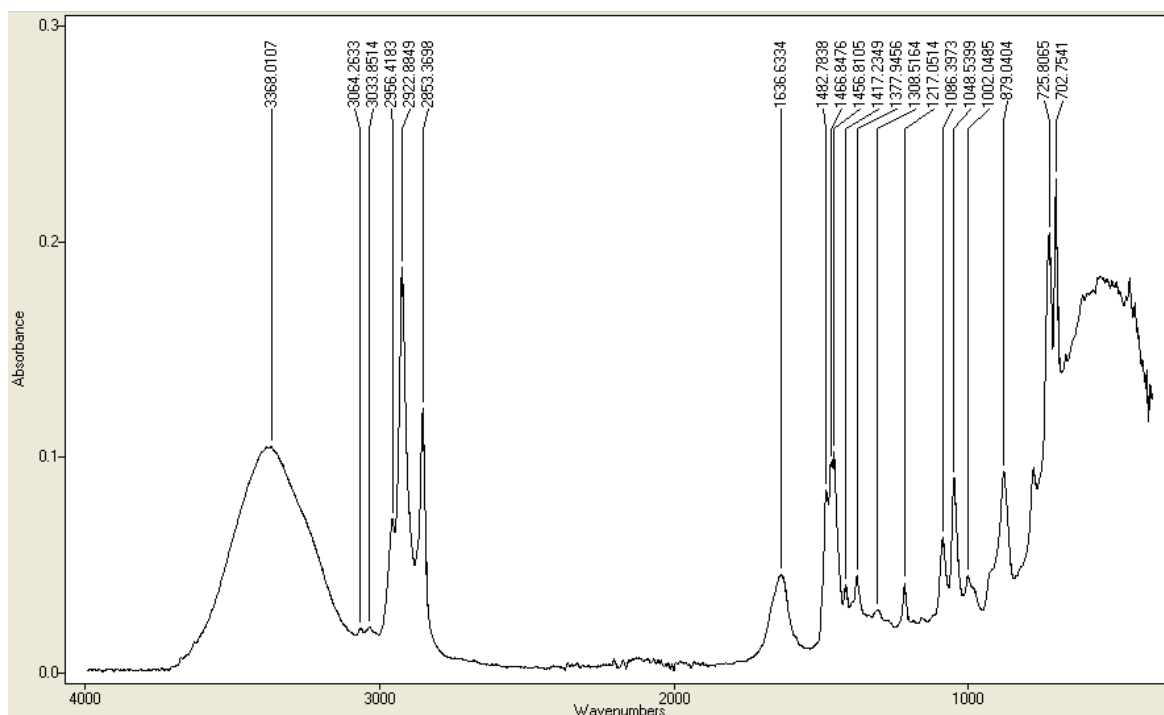
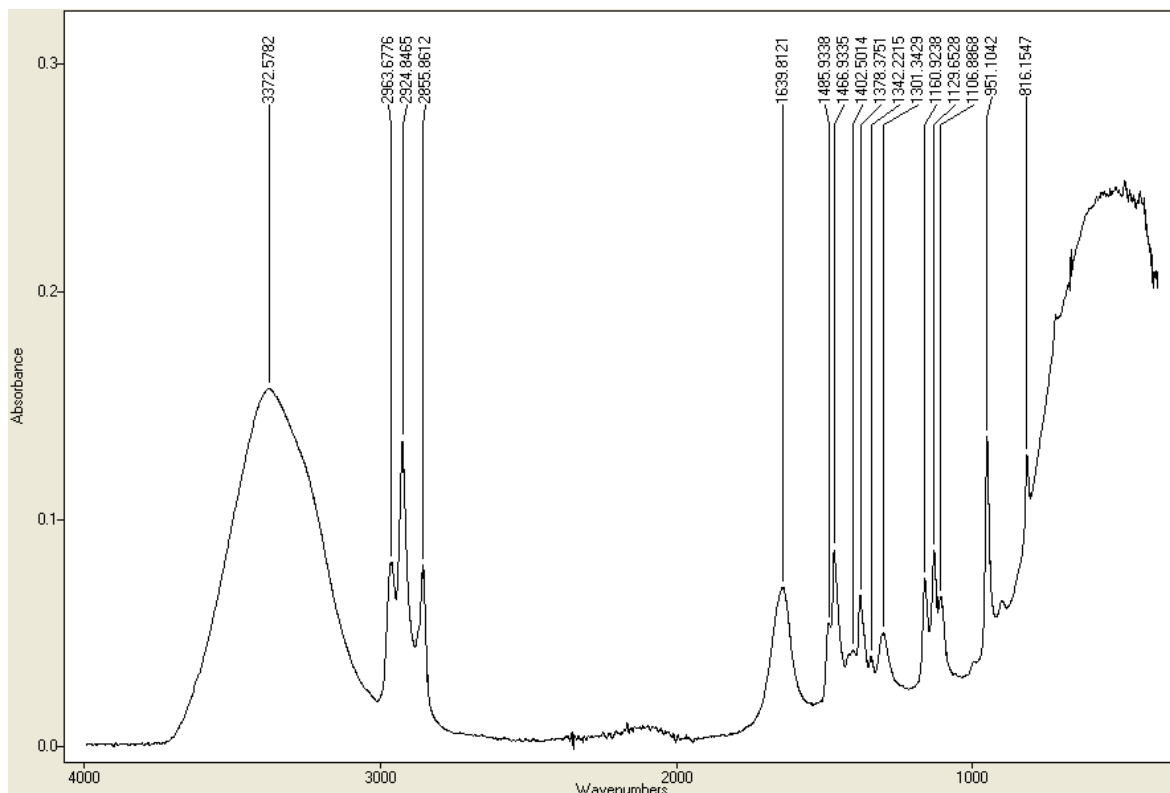


Figura 74- Espectro do ACTICIDE® BAC80.

Tabela 36- Tabela de correlação para o ACTICIDE® BAC80.

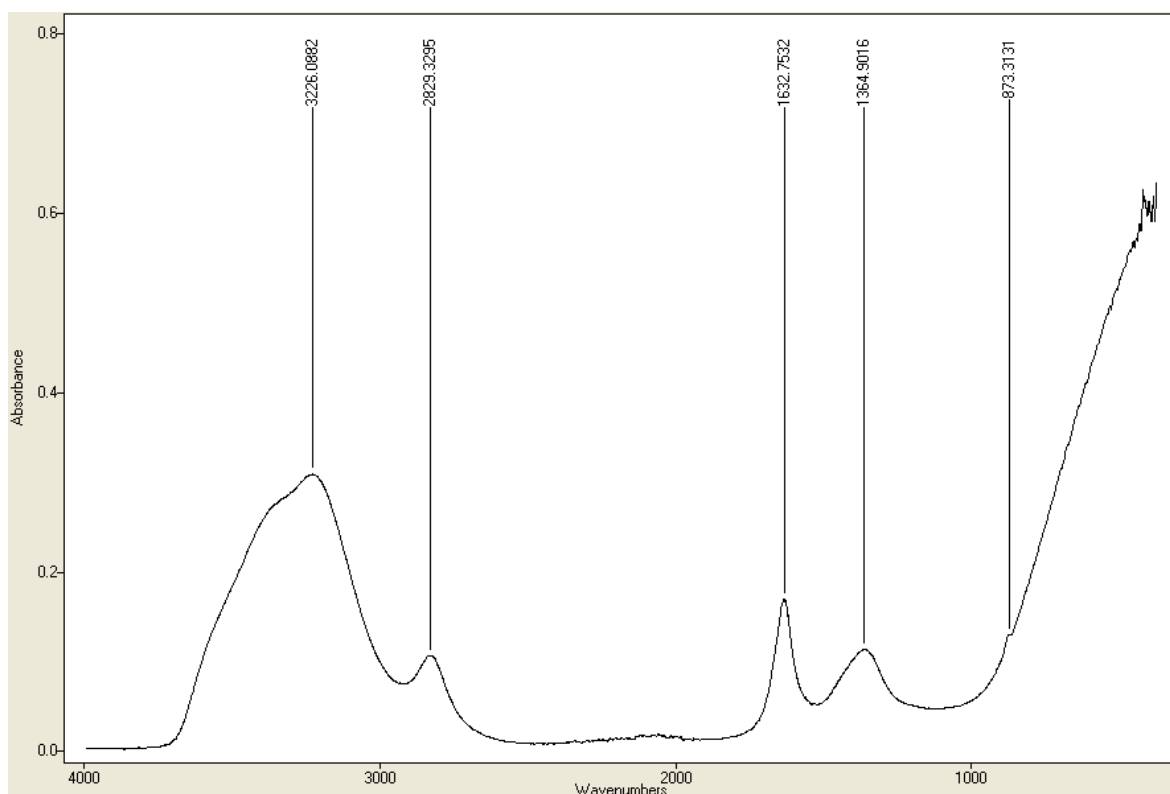
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
702,7541	δCH “fora do plano”
725,9115	δ(CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> , n>3
879,2027	δCH “fora do plano”
1048,5208	δCH “no plano”
1086,8078	δCH “no plano”
1216,8414	δCH “no plano”
1308,5546	δCH <sub>2</sub> “torção”
1377,9456	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1456,8200	νC=C
1466,8667	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1482,8029	νC=C
1635,4545	δH-O-H
2853,3889	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2922,8945	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,4278	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3033,7082	νC-H assimétrico sp <sup>2</sup>
3064,4447	νC-H assimétrico sp <sup>2</sup>
3370,3875	νO-H



**Figura 75- Espectro do ACTICIDE® DDQ50.**

**Tabela 37- Tabela de correlação para o ACTICIDE® DDQ50.**

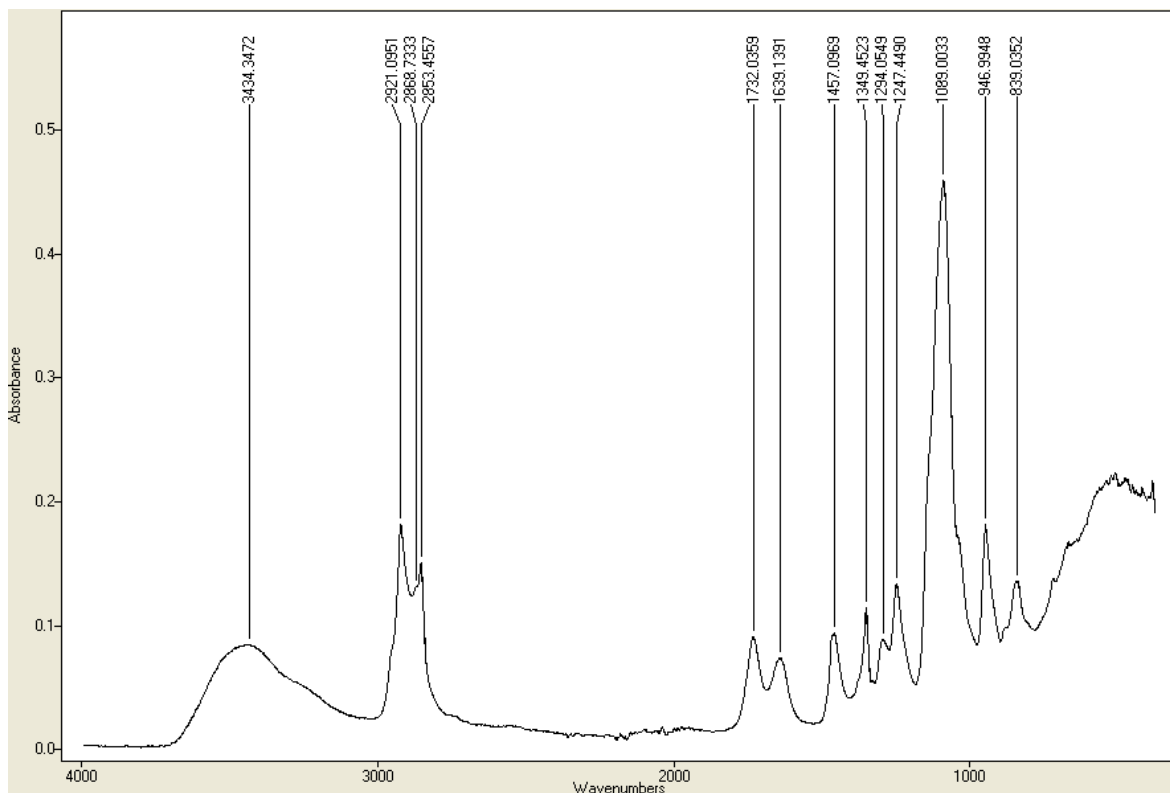
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1301,3334	$\delta$ CH <sub>2</sub> “torção”
1378,3370	$\delta$ CH <sub>2</sub> “oscilação”
1466,9240	$\delta$ CH <sub>2</sub> “tesoura”
1640,5041	$\delta$ H-O-H
2855,6655	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2925,0756	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2962,5560	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3375,5326	vO-H



**Figura 76- Espectro da água oxigenada.**

**Tabela 38- Tabela de correlação para a água oxigenada.**

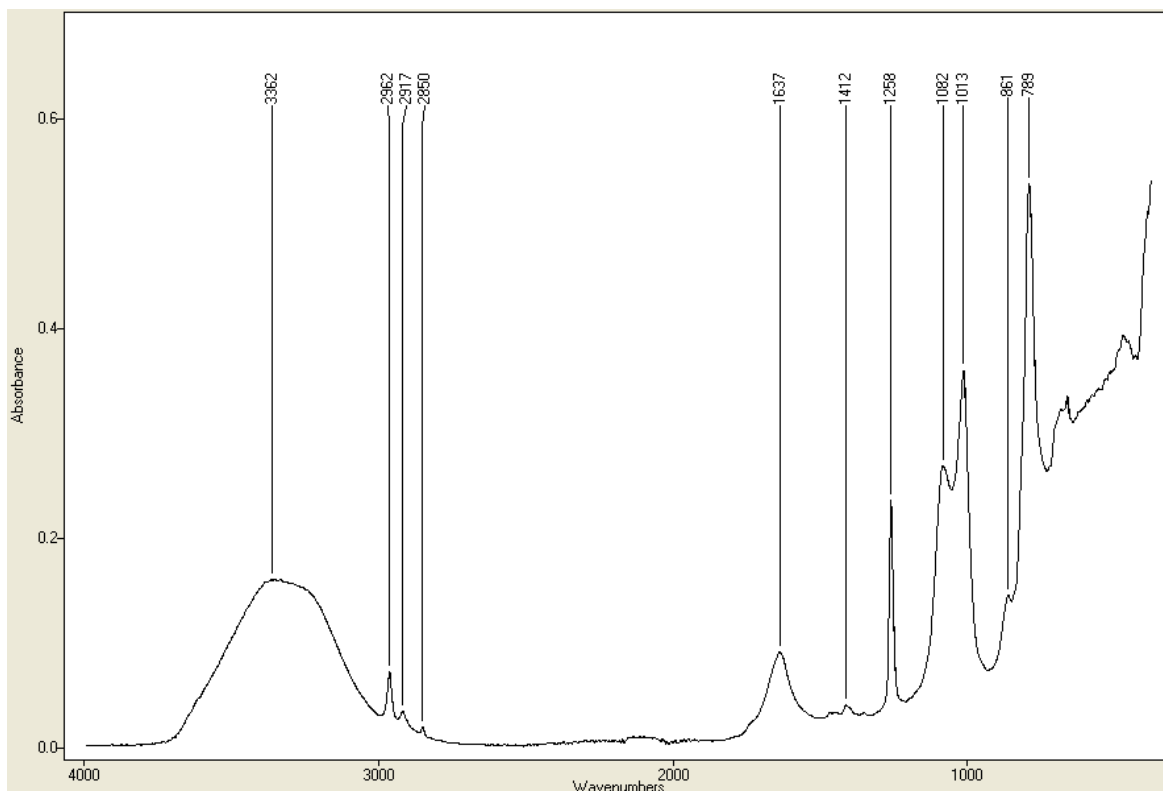
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1363,0689	δO-H
1632,5336	δH-O-H
3228,0695	νO-H



**Figura 77- Espectro do AKYPO® GENE JOD F.**

**Tabela 39- Tabela de correlação para o AKYPO® GENE JOD F.**

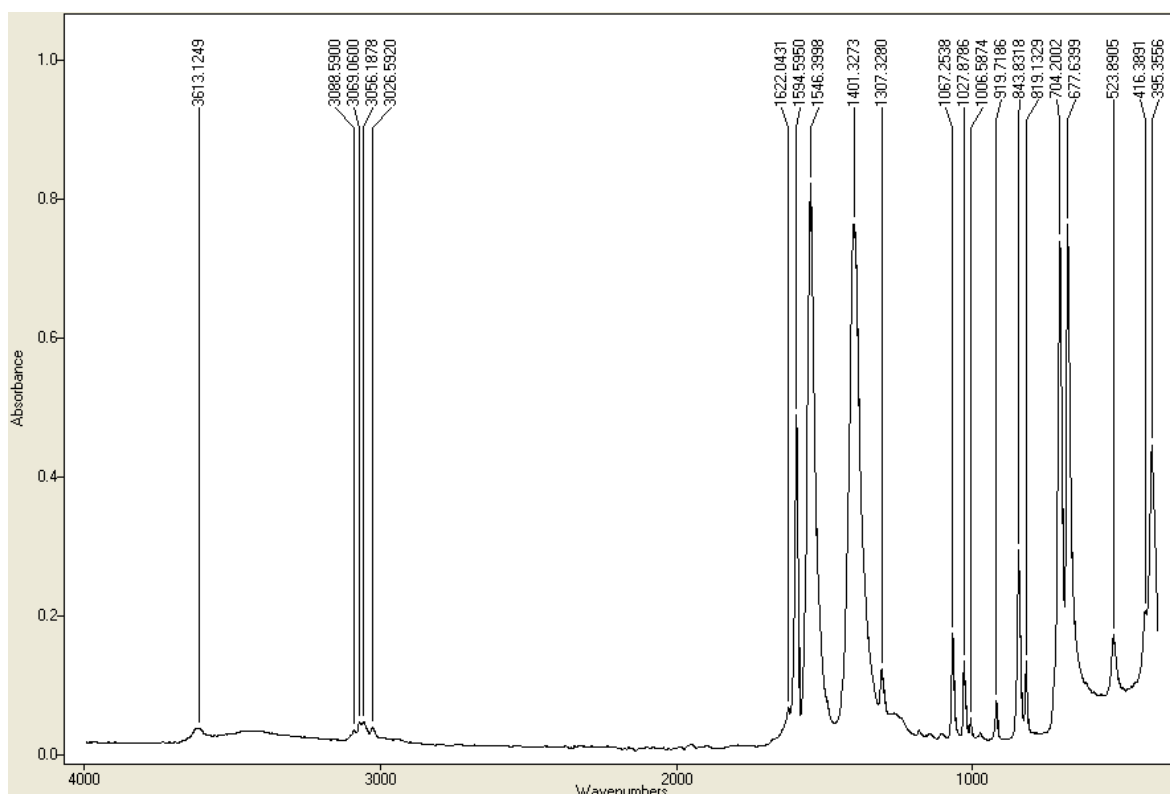
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
842,1662	vC-O-C simétrico
1089,2085	vC-O-C assimétrico
1247,4108	vC-O
1294,1886	δCH <sub>2</sub> “torção”
1349,4141	δO-H
1457,0969	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1640,5996	δH-O-H
1731,3868	vC=O
2853,4557	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2921,0378	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3440,1699	vO-H



**Figura 78-Espectro do agente anti espuma AF9030E**

**Tabela 40- Tabela de correlação para o agente anti espuma AF9030E.**

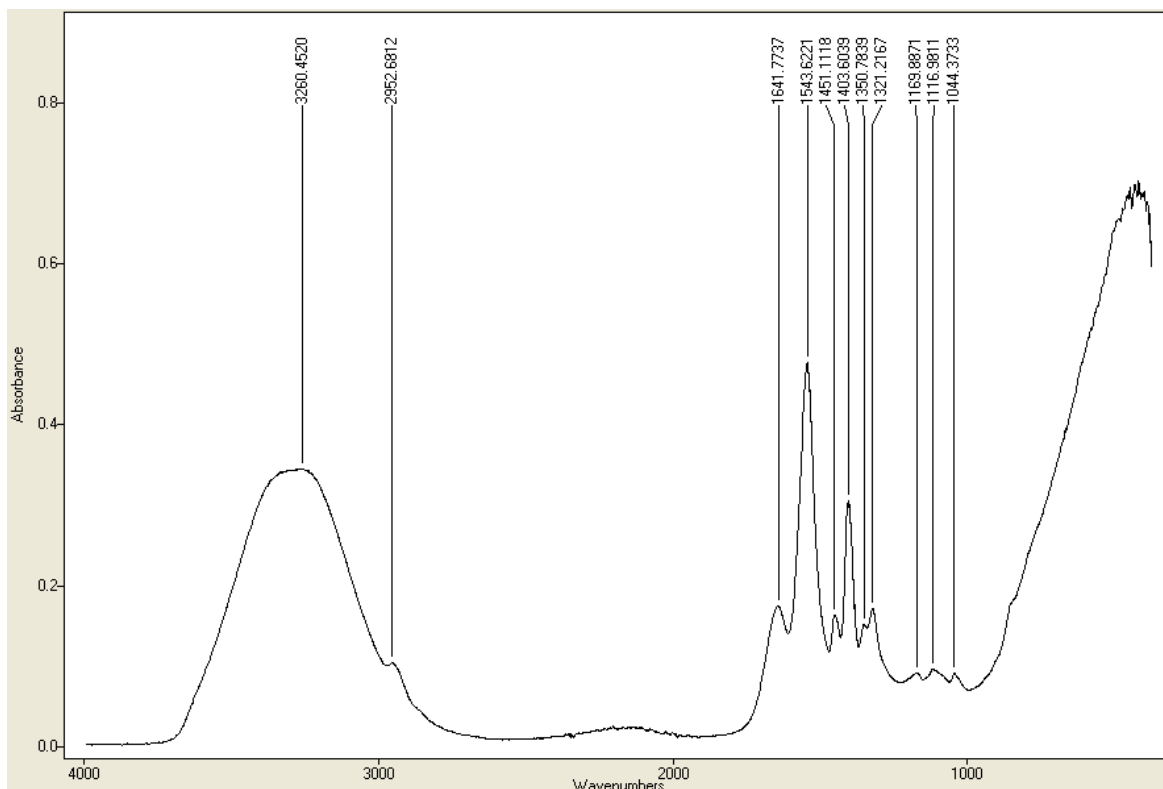
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
660,6584	vSi-O-Si simétrico
789,7184	vSi-C
862,4074	vSi-C
1012,3100	vSi-O
1080,3884	vSi-O
1258,5695	δCH <sub>3</sub> (-Si) simétrico
1412,0517	δCH <sub>3</sub> (-Si) assimétrico
1637,8600	δH-O-H
2850,3057	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2916,9667	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2962,4987	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3363,6102	vO-H



**Figura 79- Espectro do benzoato de sódio.**

**Tabela 41- Tabela de correlação para o benzoato de sódio.**

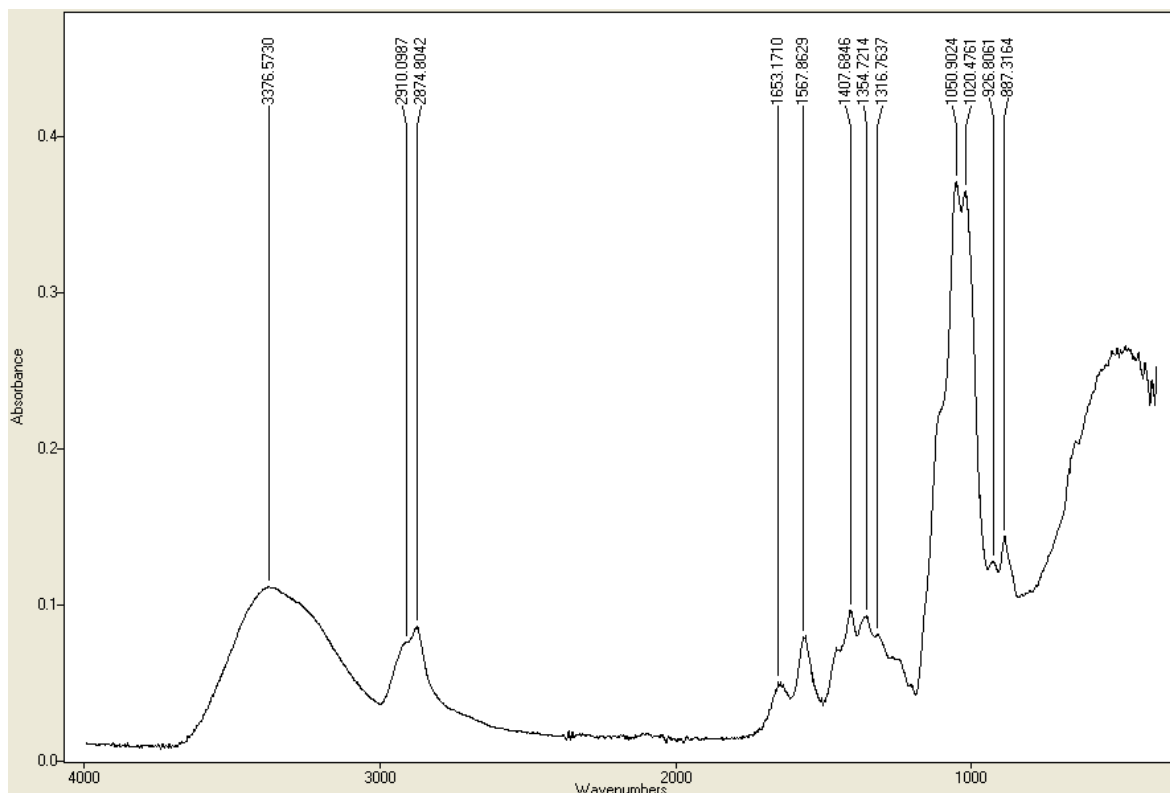
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
704,2193	$\delta$ CH “fora do plano”
1006,5969	$\delta$ CH “no plano”
1028,1173	$\delta$ CH “no plano”
1067,3397	$\delta$ CH “no plano”
1307,4616	$\delta$ CH <sub>2</sub> “torção”
1402,5491	$\nu$ CO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1546,5525	$\nu$ CO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1594,8146	$\nu$ C=C
1622,0240	$\nu$ C=C
3025,9984	$\nu$ C-H simétrico sp <sup>2</sup>
3069,5707	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>2</sup>
3088,5709	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>2</sup>



**Figura 80-Espectro do CELLESH® 100.**

**Tabela 42- Tabela de correlação para o CELLESH® 100.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1321,2644	δCH <sub>2</sub>
1350,5977	δCH <sub>2</sub>
1403,6898	νCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1451,1405	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1543,6698	νCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1642,1412	δH-O-H
2952,3805	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3262,4041	νO-H

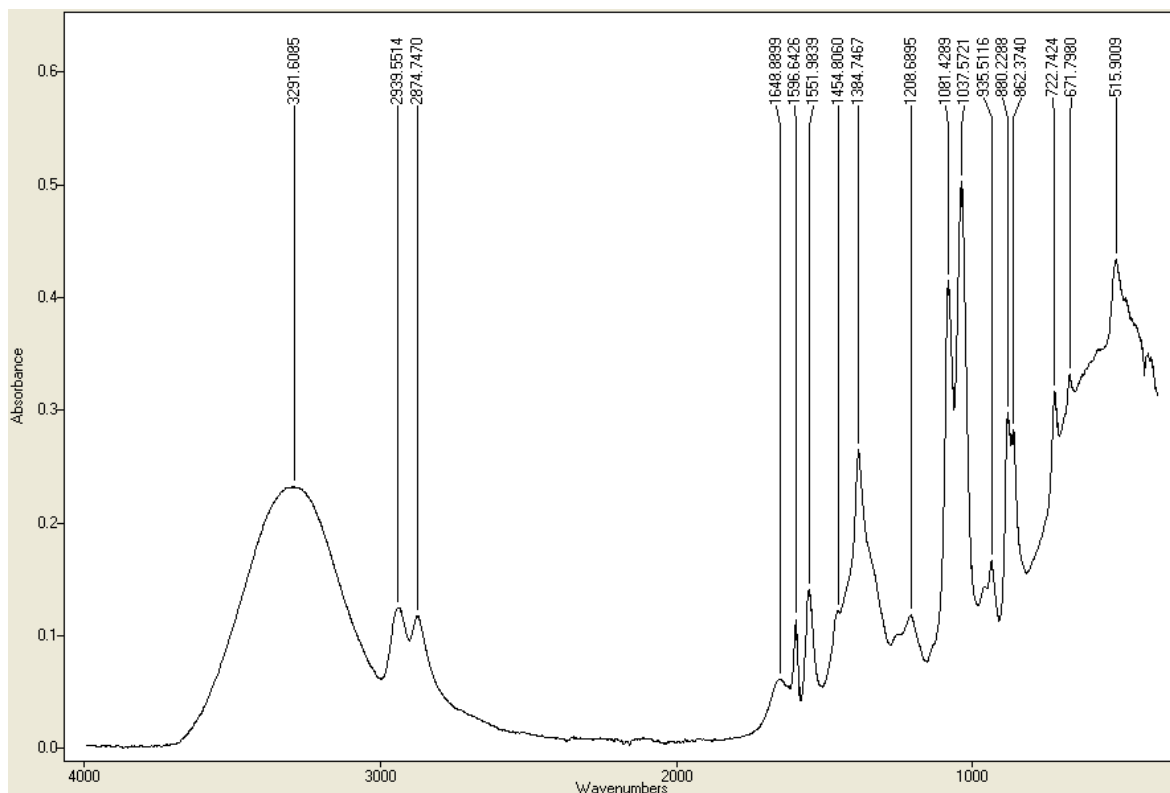


**Figura 81- Espectro do CELLOSIZÉ® QP100 MH.**

**Tabela 43- Tabela de correlação para o CELLOSIZÉ® QP100 MH.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1019,3736	vC-O-C/C-C-O
1051,0694	vC-O-C/C-C-O
1316,2816	δCH <sub>2</sub> “torção”
1354,4589	δO-H
1407,7610	vCO <sub>2</sub> simétrico
1453,6843	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1561,6487	vCO <sub>2</sub> assimétrico
1645,2339	δH-O-H
2874,4892	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
3374,2201	vO-H





**Figura 82- Espectro do Corrosion Inhibitor VP 1749.**

**Tabela 44- Tabela de correlação para o Corrosion Inhibitor VP 1749.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
880,1620	vC-C-O simétrico
1037,5912	vC-C-O assimétrico
1081,4098	vC-C-O assimétrico
1384,7467	δCH <sub>2</sub> “
1455,0828	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1649,3576	δH-O-H
2874,3795	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2939,3557	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3286,1724	vO-H

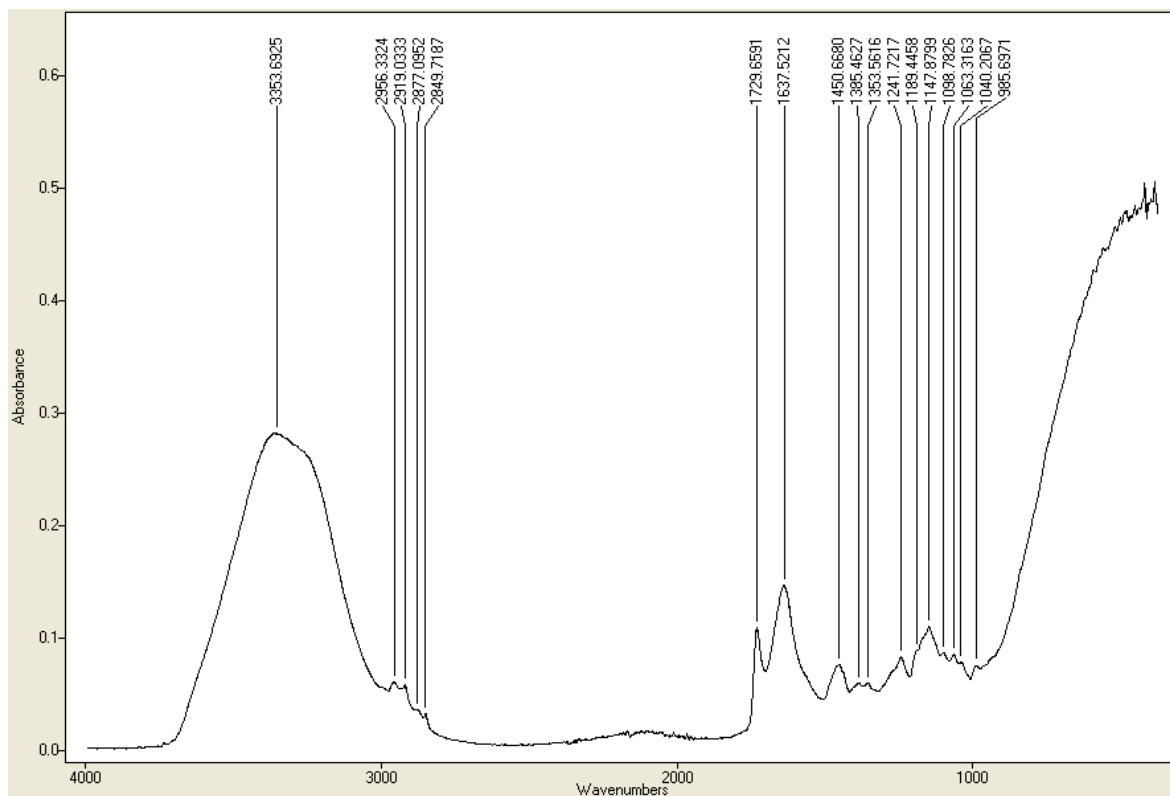
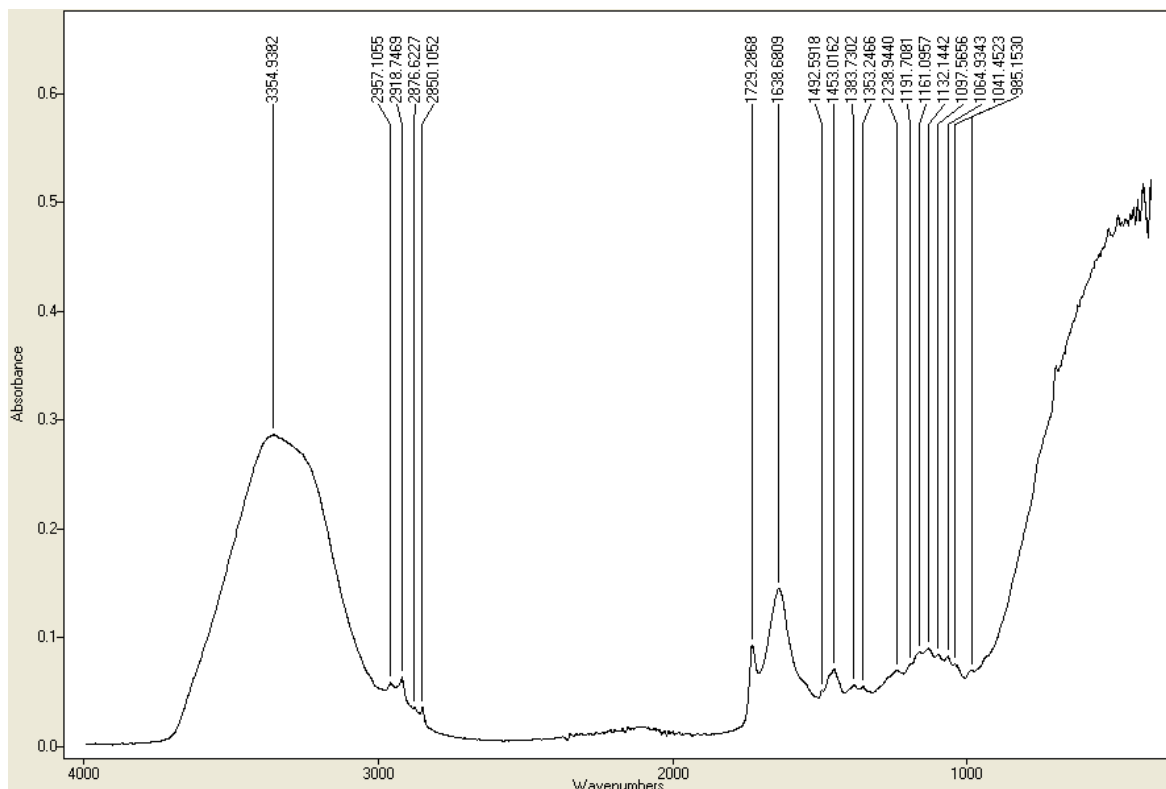


Figura 83-Espectro do CRAYMUL® 7001.

Tabela 45- Tabela de correlação para o CRAYMUL® 7001.

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1241,7217	vC-O
1353,5616	δO-H
1385,4627	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1450,6680	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1637,5212	δH-O-H
1729,6591	vC=O
2849,7187	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2880,5602	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2919,0333	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2957,3919	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3361,4673	vO-H



**Figura 84-Espectro do CRAYMUL 7008.**

**Tabela 46- Tabela de correlação para o CRAYMUL 7008.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1352,7407	δO-H
1383,6824	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1453,2071	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1638,4518	δH-O-H
1729,3441	νC=O
2849,9764	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2918,8137	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,6951	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3356,6039	νO-H

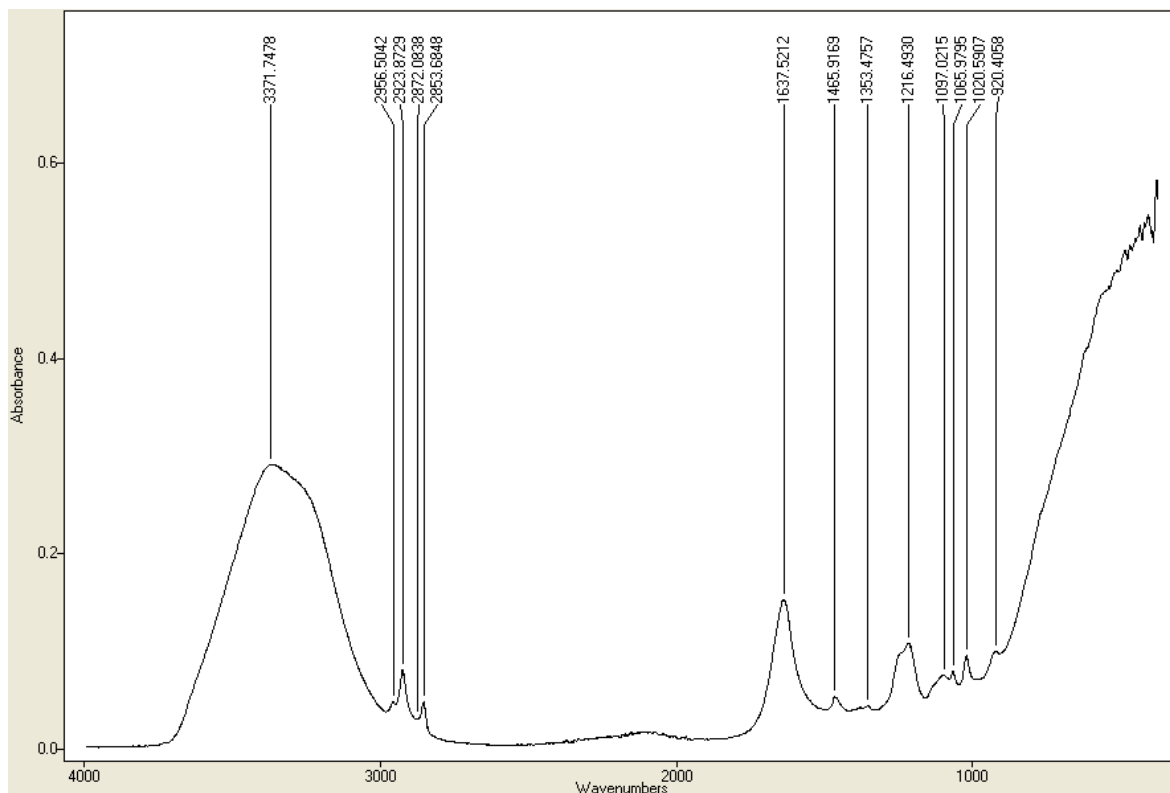
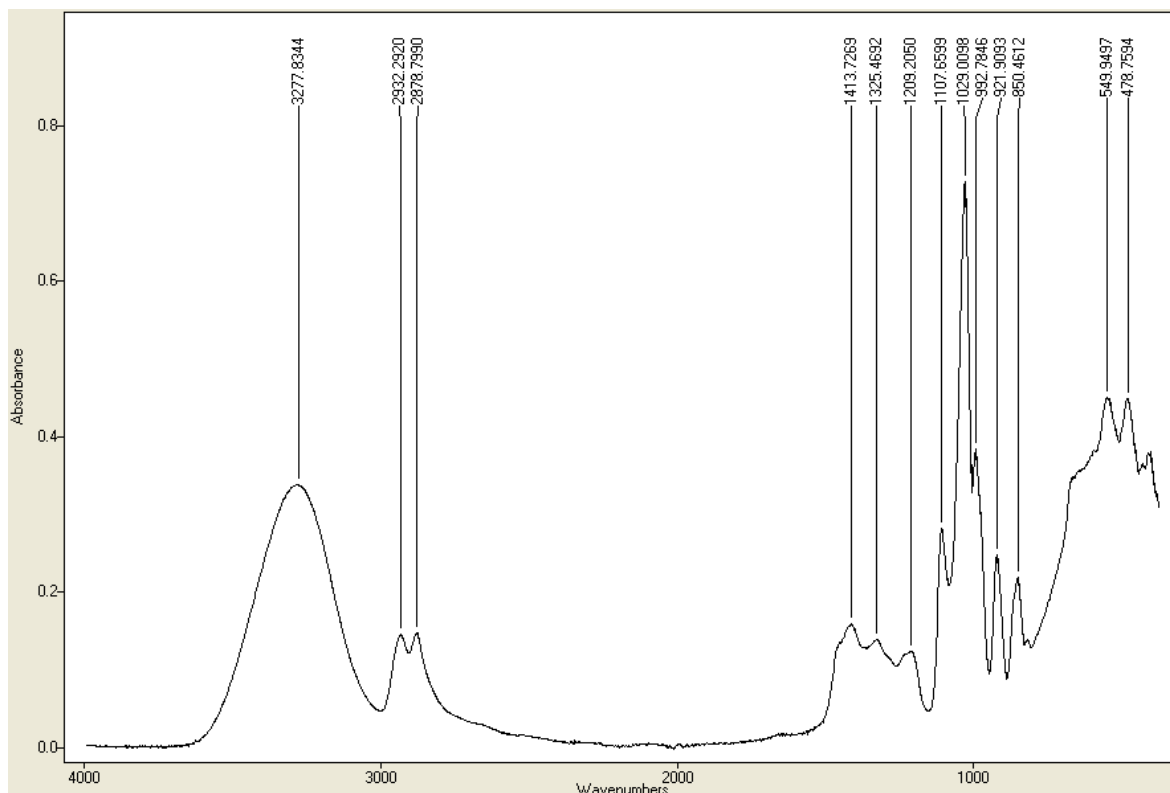


Figura 85- Espectro do Demelan® 1990.

Tabela 47- Tabela de correlação para o Demelan® 1990.

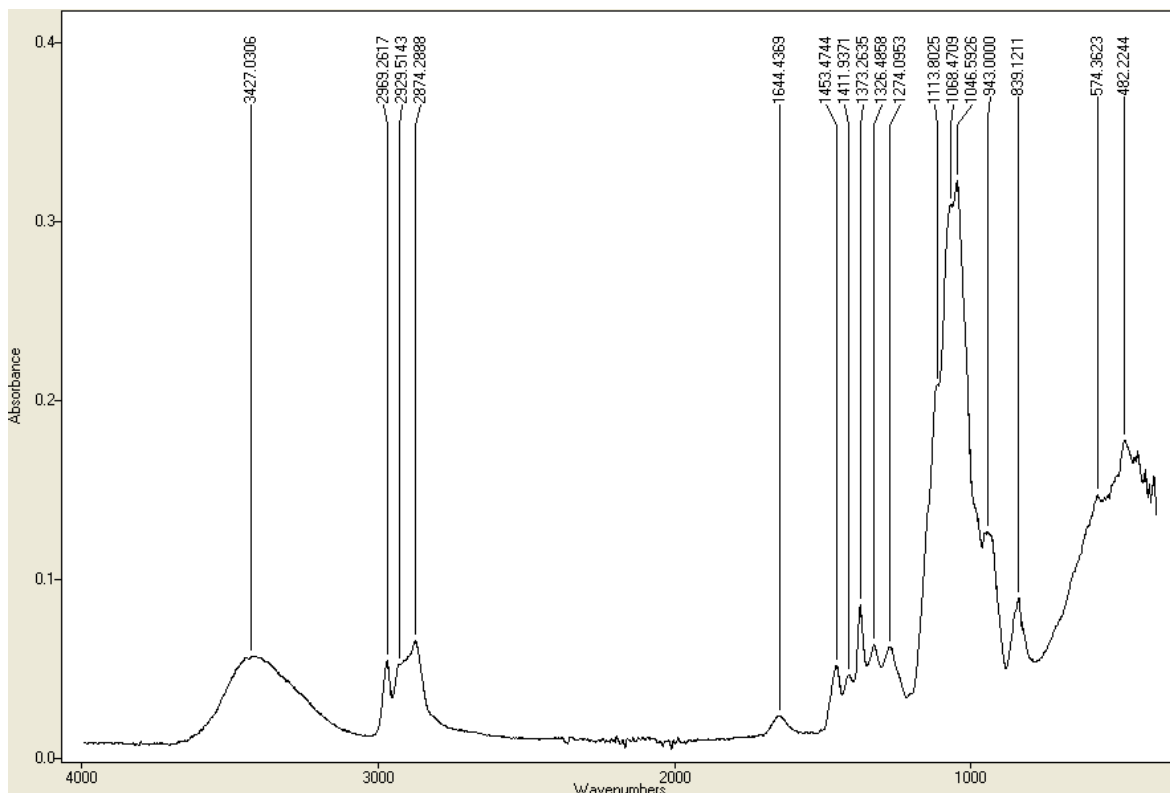
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1215,8391	δCH <sub>2</sub> “torção”
1353,4852	δO-H
1466,1603	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1637,5116	δH-O-H
2853,7325	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2923,8729	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,7333	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3366,5550	vO-H



**Figura 86- Espectro da glicerina.**

**Tabela 48- Tabela de correlação para a glicerina.**

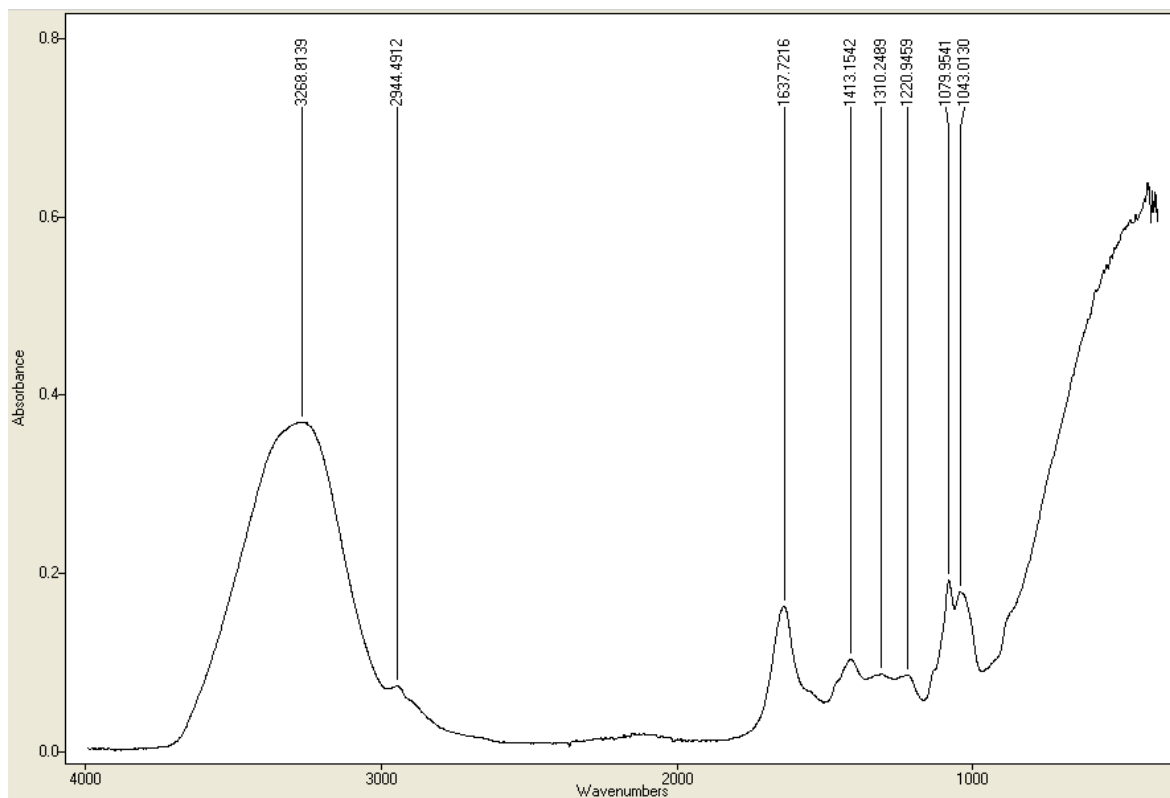
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1029,1243	vC-C-O assimétrico
1107,8890	vC-C-O assimétrico
1210,1023	δCH <sub>2</sub> “torção”
1327,0919	δO-H
1413,0635	δO-H
2878,7036	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2932,2300	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3287,6567	vO-H



**Figura 87-Espectro do KLUCEL® HCS S.45.**

**Tabela 49- Tabela de correlação para o KLUCEL® HCS S.45.**

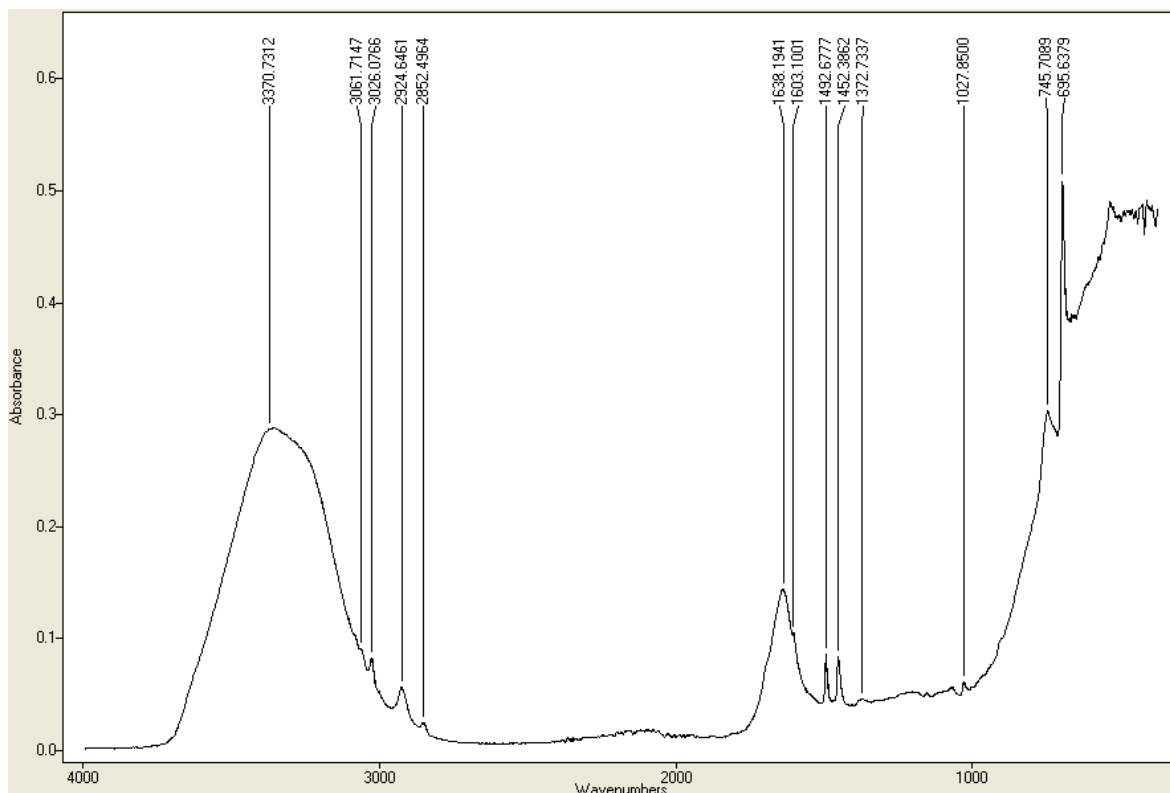
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1046,3444	vC-O-C/C-C-O
1068,6809	vC-O-C/C-C-O
1113,4517	vC-O-C/C-C-O
1325,6219	δO-H
1372,4712	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1415,1969	δO-H
1453,5173	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1648,9519	δH-O-H
2873,8974	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2929,1086	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2969,6340	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3411,6743	vO-H



**Figura 88- Espectro da lipase.**

**Tabela 50- Tabela de correlação para a lipase.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1043,2612	vC-C-O assimétrico
1079,9923	vC-C-O assimétrico
1221,1989	δCH <sub>2</sub> “torção”
1411,8608	δO-H
1638,0939	δH-O-H
2945,6271	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3273,1428	vO-H

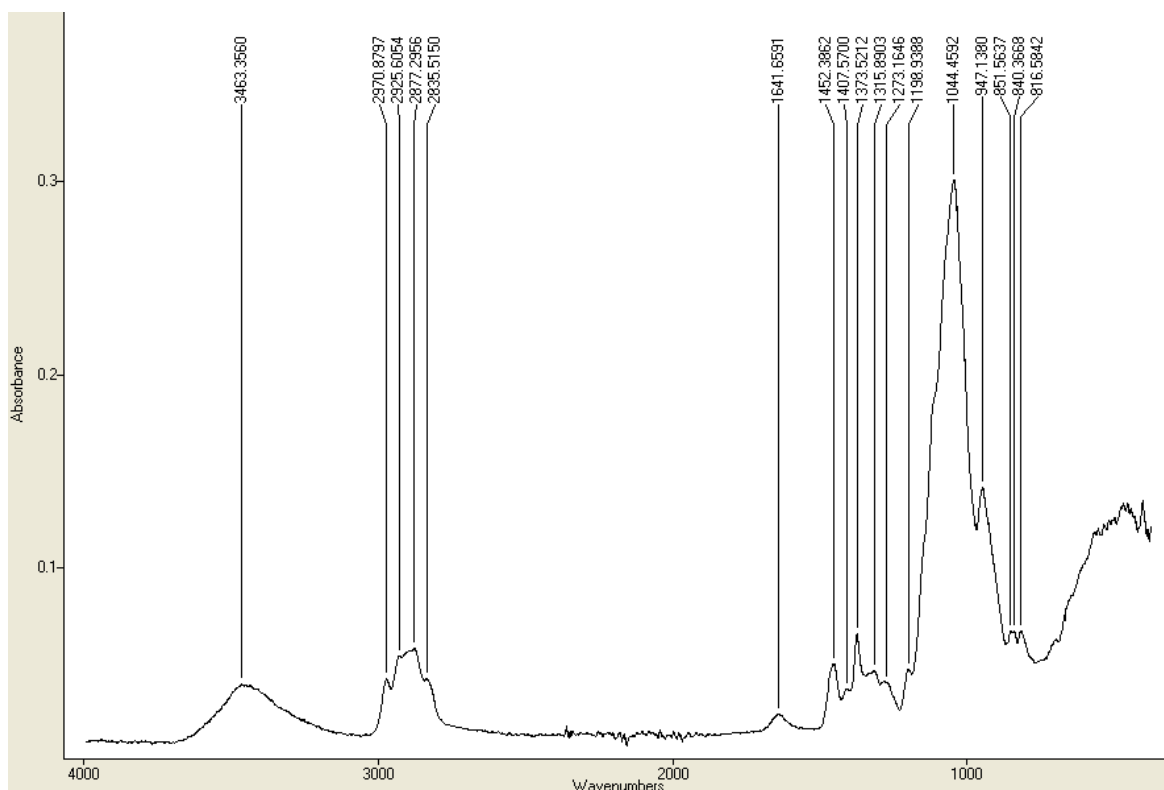


**Figura 89- Espectro do LYTRON® 180.**

**Tabela 51- Tabela de correlação para o LYTRON® 180.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
695,6379	δCH aromático monosubstituído
745,5752	δCH aromático monosubstituído
1452,1953	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1492,6873	νC=C
1603,1287	νC=C
1638,5568	δH-O-H
2852,4916	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2924,3024	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3026,0289	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3354,1173	νO-H

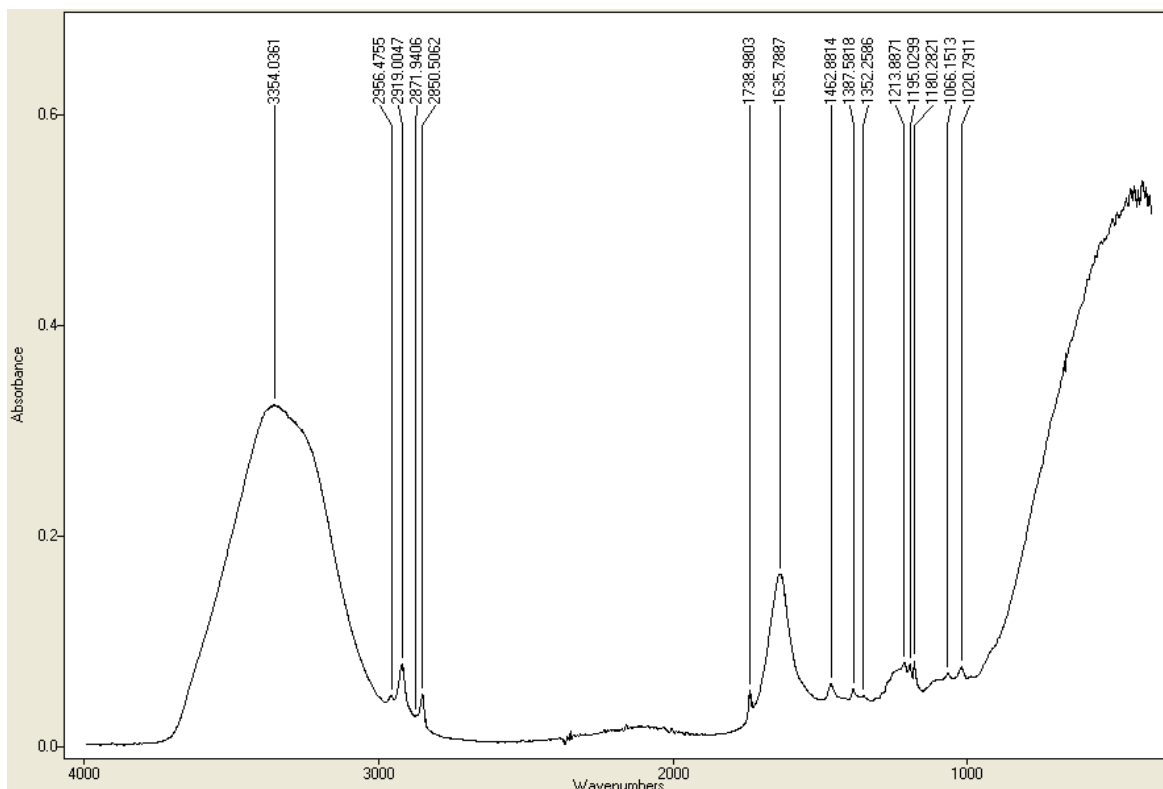




**Figura 90-Espectro do METHOCEL®.**

**Tabela 52- Tabela de correlação para o METHOCEL®.**

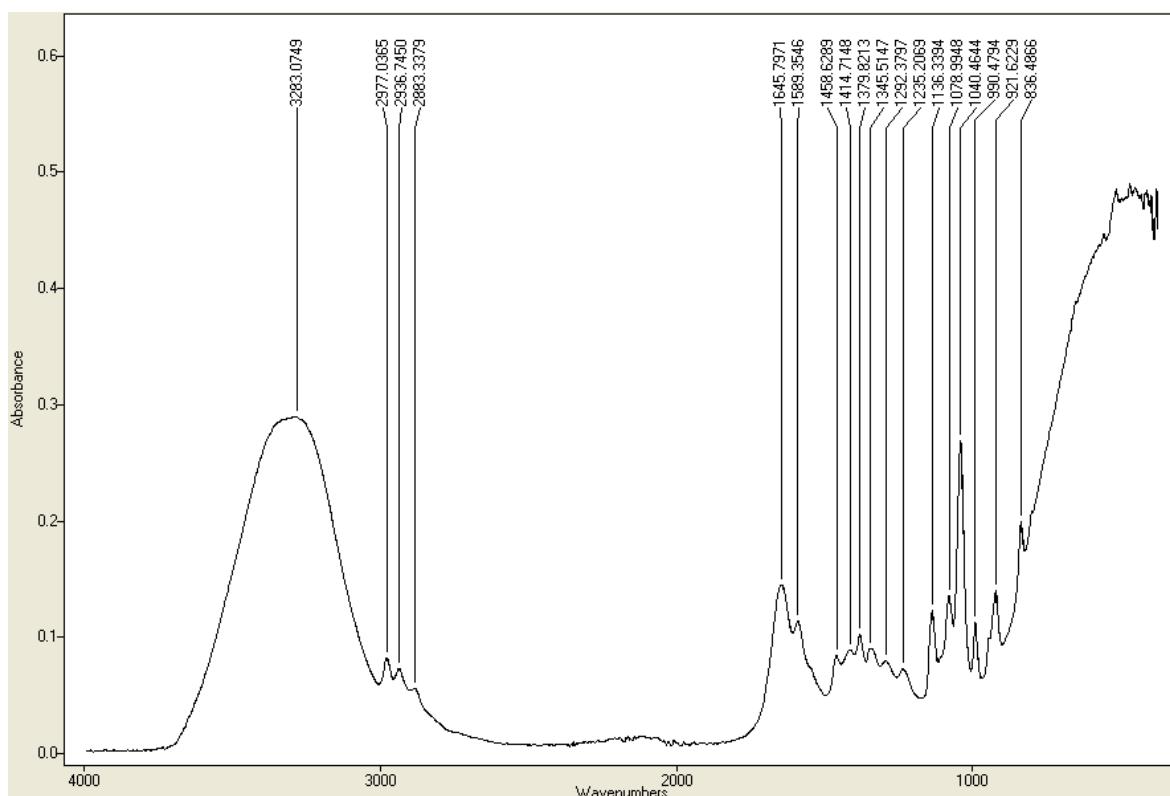
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1045,0176	vC-O-C/C-C-O
1198,2515	vC-O-C/C-C-O
1373,5308	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1406,6823	δO-H
1453,9373	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1644,9666	δH-O-H
2835,7870	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2877,6727	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2927,4572	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2970,1638	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3464,4776	vO-H



**Figura 91- Espectro do Nacarante.**

**Tabela 53- Tabela de correlação para o Nacarante.**

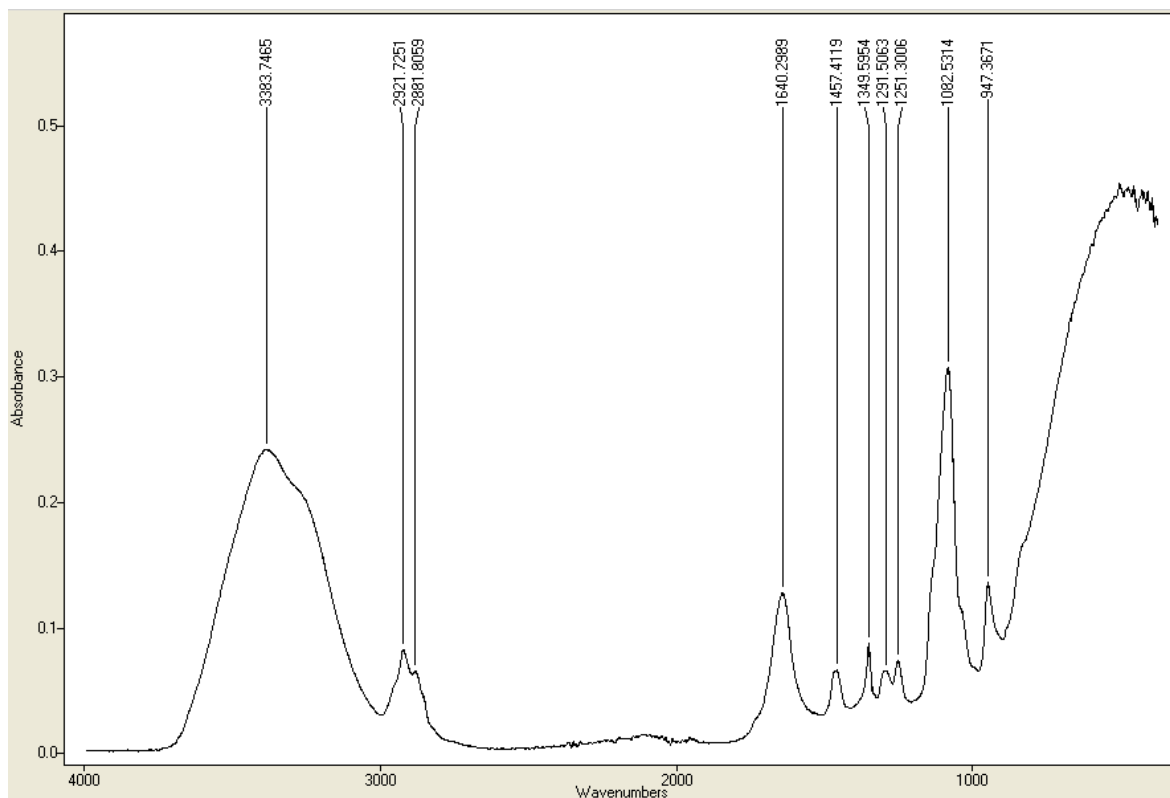
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1021,7839	vC-C-O
1065,4211	vC-C-O
1180,2821	vC-O-C
1387,6868	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1463,2108	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1739,1235	vC=O
2850,4775	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2918,9092	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>



**Figura 92- Espectro da protease.**

**Tabela 54- Tabela de correlação para a protease.**

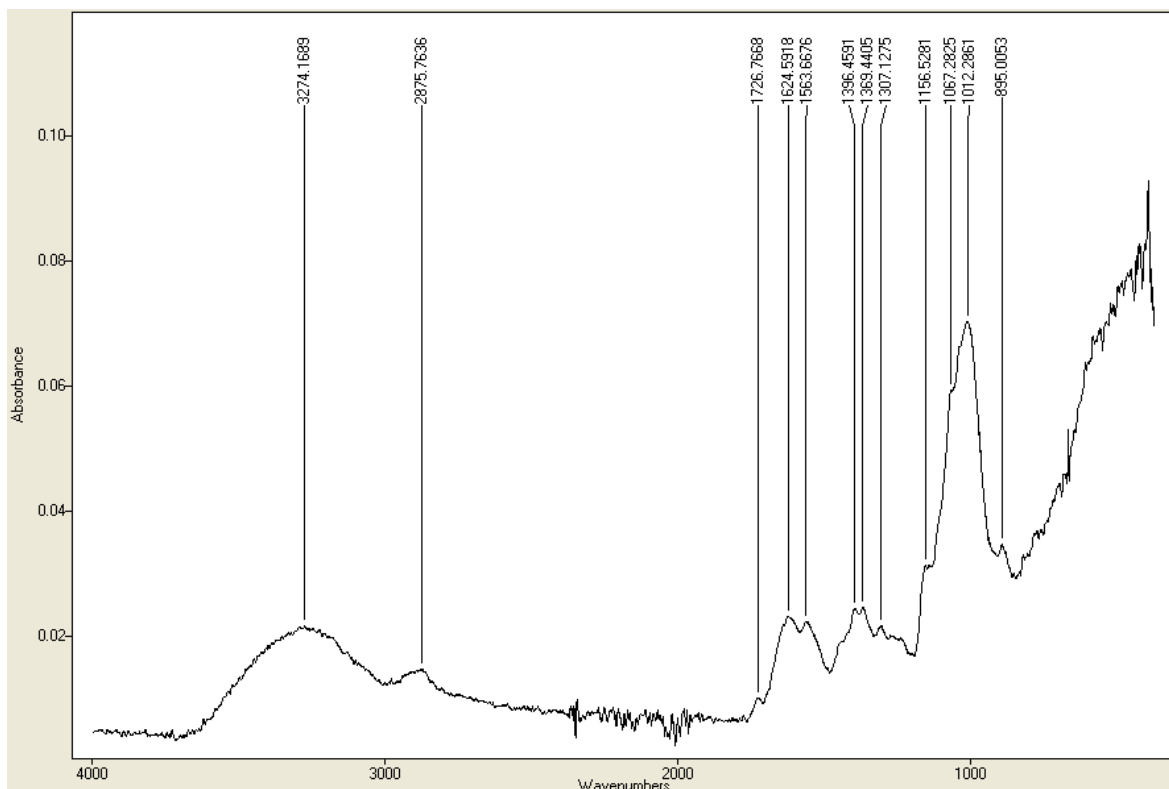
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1040,4835	vC-C-O
1079,0616	vC-C-O
1136,1724	vC-O
1345,3716	δO-H
1380,1363	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1414,4094	δO-H
1459,1014	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1644,6326	δH-O-H
2883,5527	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2936,6305	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2976,7884	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3289,7472	vO-H



**Figura 93-Espectro do REWOLAN® E50.**

**Tabela 55- Tabela de correlação para o REWOLAN® E50.**

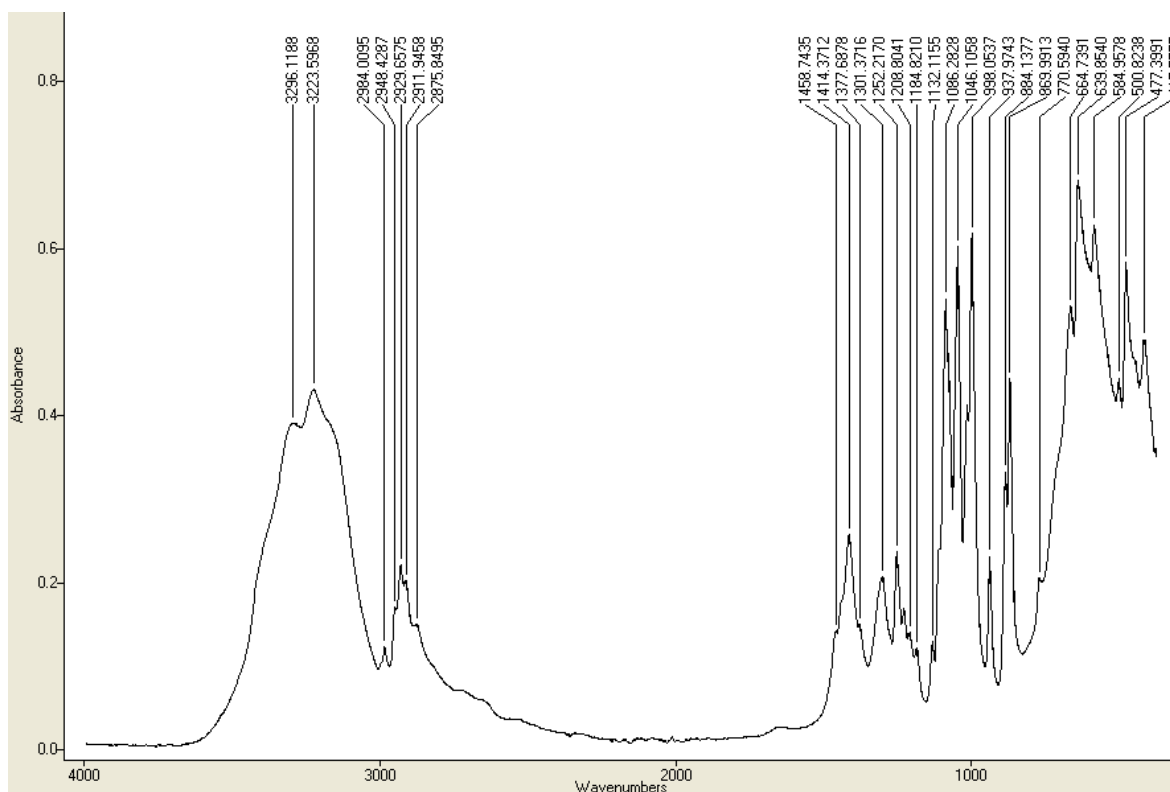
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1082,5505	vC-O-C
1349,5954	δO-H
1458,6480	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1639,5591	δH-O-H
2881,7009	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2921,5247	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3383,3217	vO-H



**Figura 94- Espectro do RHEOZAN®.**

**Tabela 56- Tabela de correlação para o RHEOZAN®.**

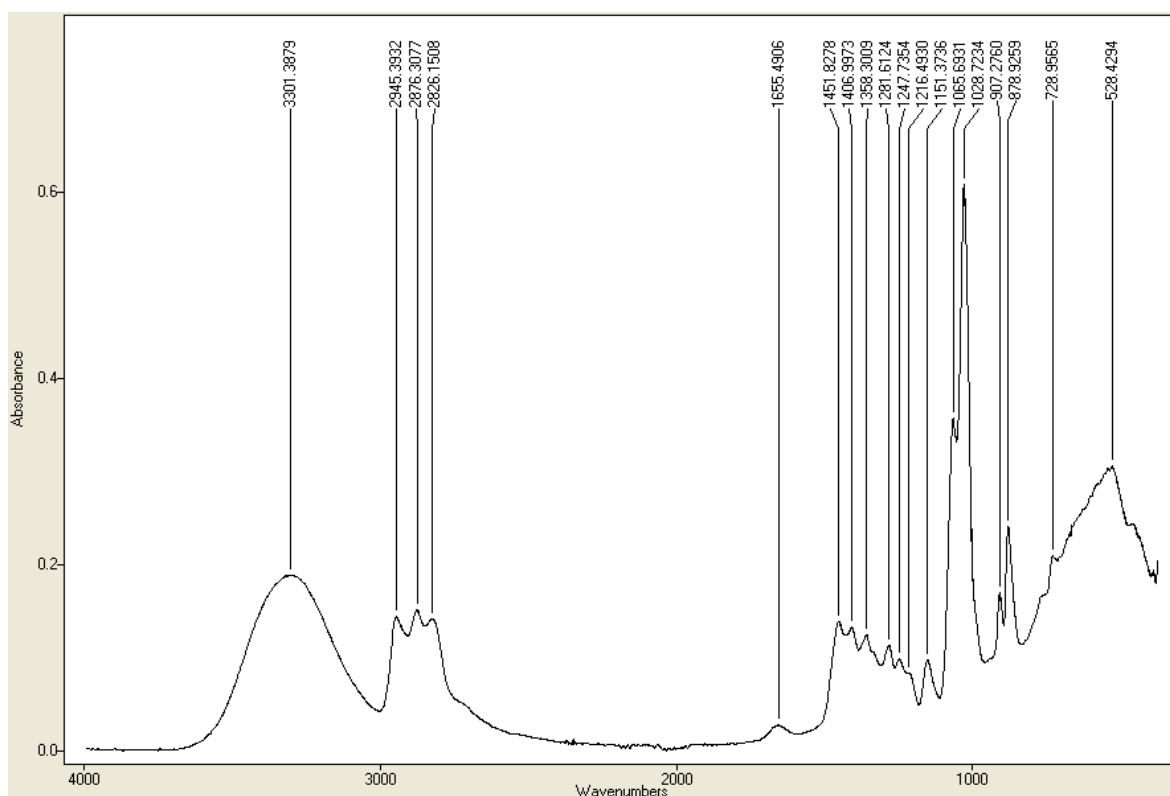
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1012,3958	vC-O-C/C-C-O
1065,3161	vC-O-C/C-C-O
1154,2611	vC-O-C/C-C-O
1396,5545	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1563,3526	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1620,3679	δH-O-H
1726,7766	vC=O
2881,9420	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
3269,7636	vO-H



**Figura 95-Espectro do sorbitol.**

**Tabela 57- Tabela de correlação para o sobitol.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
998,0537	vC-C-O
1046,1058	vC-C-O
1086,2828	vC-C-O
1414,3712	δO-H
2875,8495	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2911,9458	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2929,6575	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2948,4287	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2984,0095	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
3223,5968	vO-H
3285,8812	vO-H

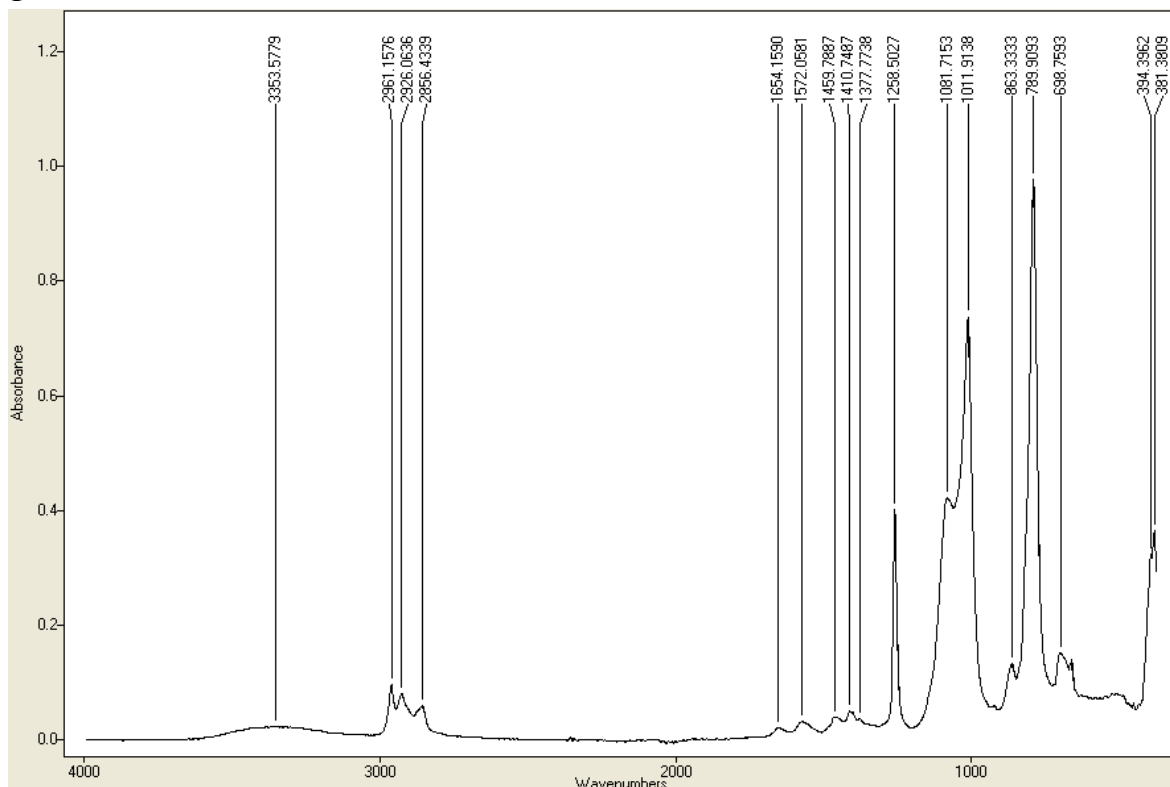


**Figura 96-Espectro do TEA.**

**Tabela 58- Tabela de correlação para o TEA.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1028,6757	vC-C-O
1065,5786	vC-C-O
1248,0170	δO-H
1358,2055	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1407,3409	δO-H
1451,6750	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1659,2420	δH-O-H
2825,2440	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2876,4270	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2945,4314	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3301,4356	vO-H

1

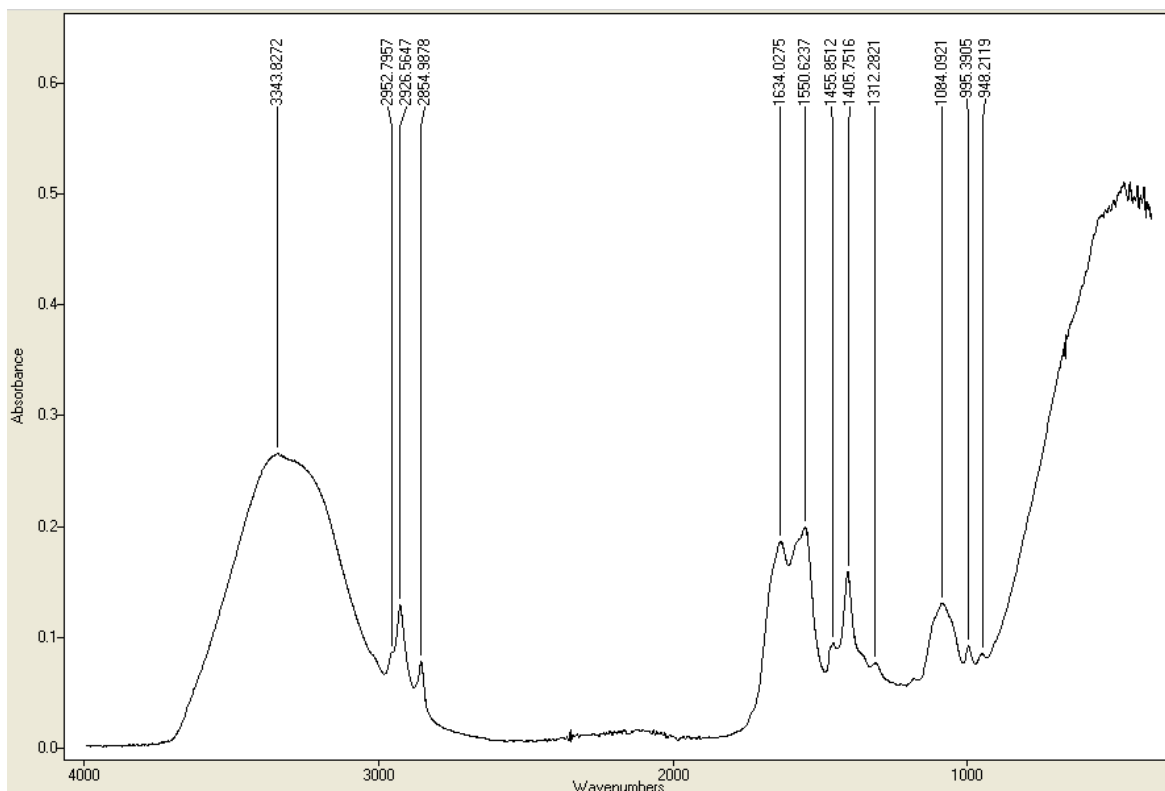


**Figura 97-Espetro do TEGO® Polish Q70.**

**Tabela 59- Tabela de correlação para o TEGO® Polish Q70.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
790,5489	vC-Si
1012,1524	vSi-O-Si
1081,9014	vSi-O-Si
1258,5409	δ(Si)-CH <sub>3</sub> simétrico
1409,9421	δ(Si)-CH <sub>3</sub> assimétrico
1459,3019	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2856,4435	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2925,8345	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2961,0812	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>

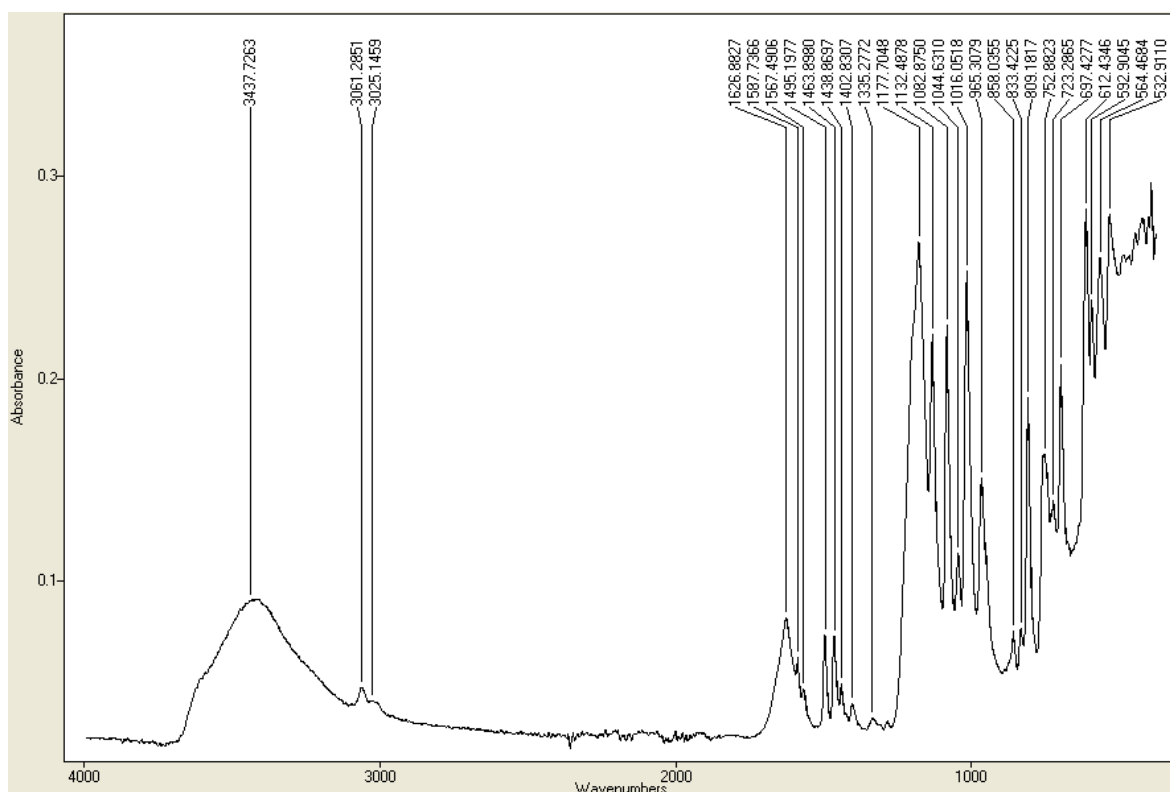




**Figura 98-Espectro do TEGO® Sorb A30.**

**Tabela 60- Tabela de correlação para o TEGO® Sorb A30.**

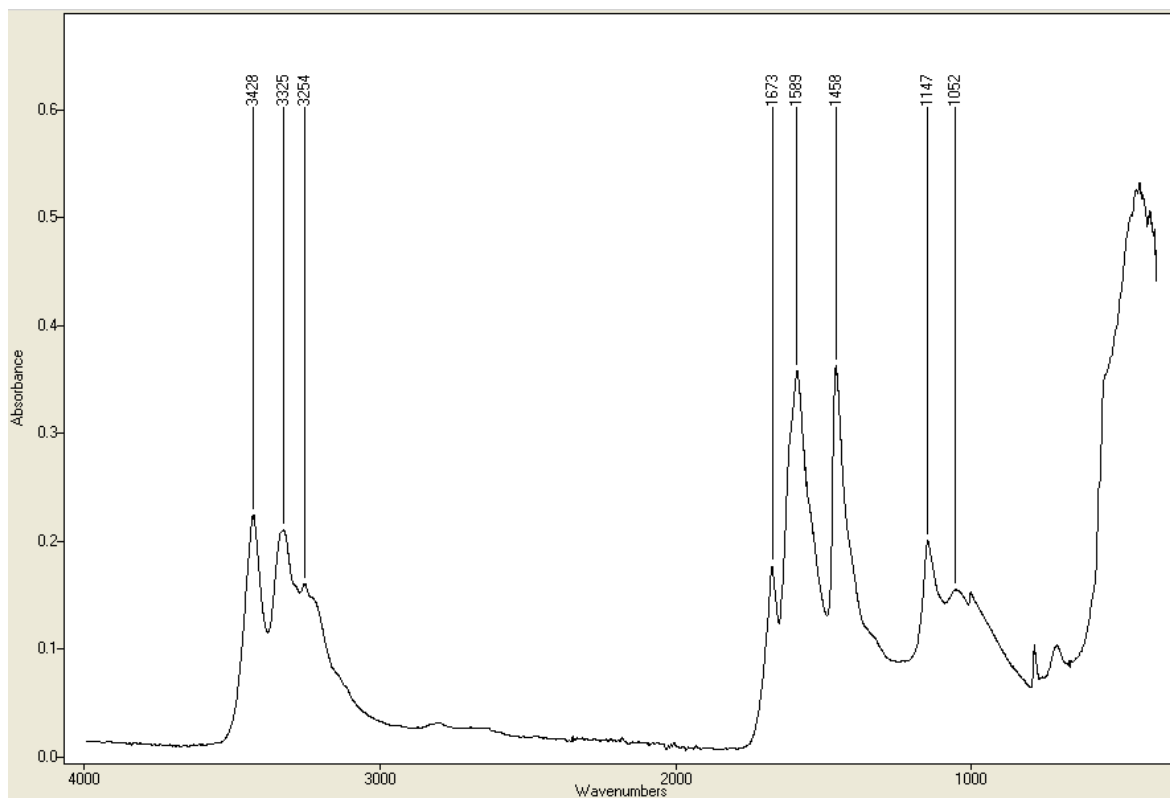
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1084,1685	vC-C-O
1405,8184	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1456,0373	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1550,6332	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
1633,9702	δH-O-H
2854,9782	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2926,2784	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2952,7766	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3342,5433	vO-H



**Figura 99-Espectro do TINOPAL® CBS-X.**

**Tabela 61- Tabela de correlação para o TINOPAL® CBS-X.**

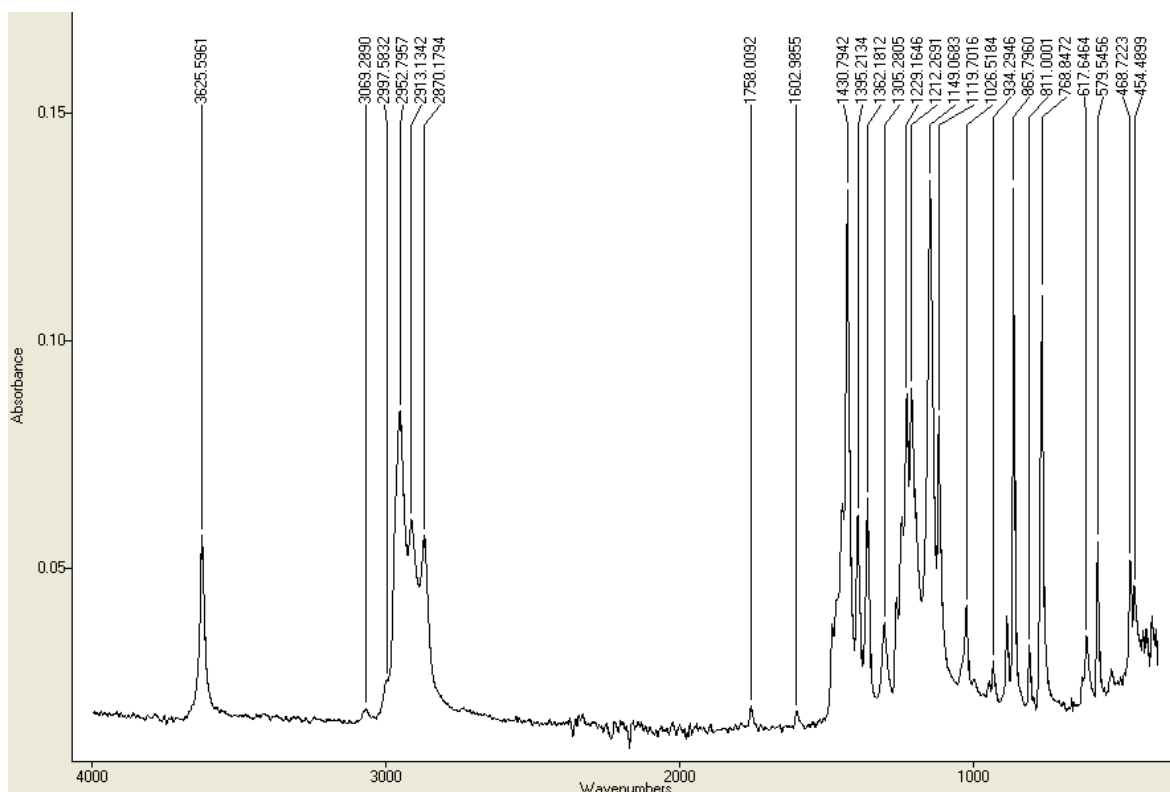
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
564,8264	δCH aromático
612,2628	δCH aromático
697,4086	δCH aromático
809,1435	δCH aromático
1082,8082	νSO <sub>3</sub> simétrico
1177,4710	νSO <sub>3</sub> assimétrico
1403,0121	νC=C
1438,9843	νC=C
1463,1058	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1494,4914	νC=C
1566,9847	νC=C
1587,4980	νC=C
1626,0379	δH-O-H
3062,3065	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3412,3448	νO-H



**Figura 100-Espetro da ureia.**

**Tabela 62- Tabela de correlação para a ureia.**

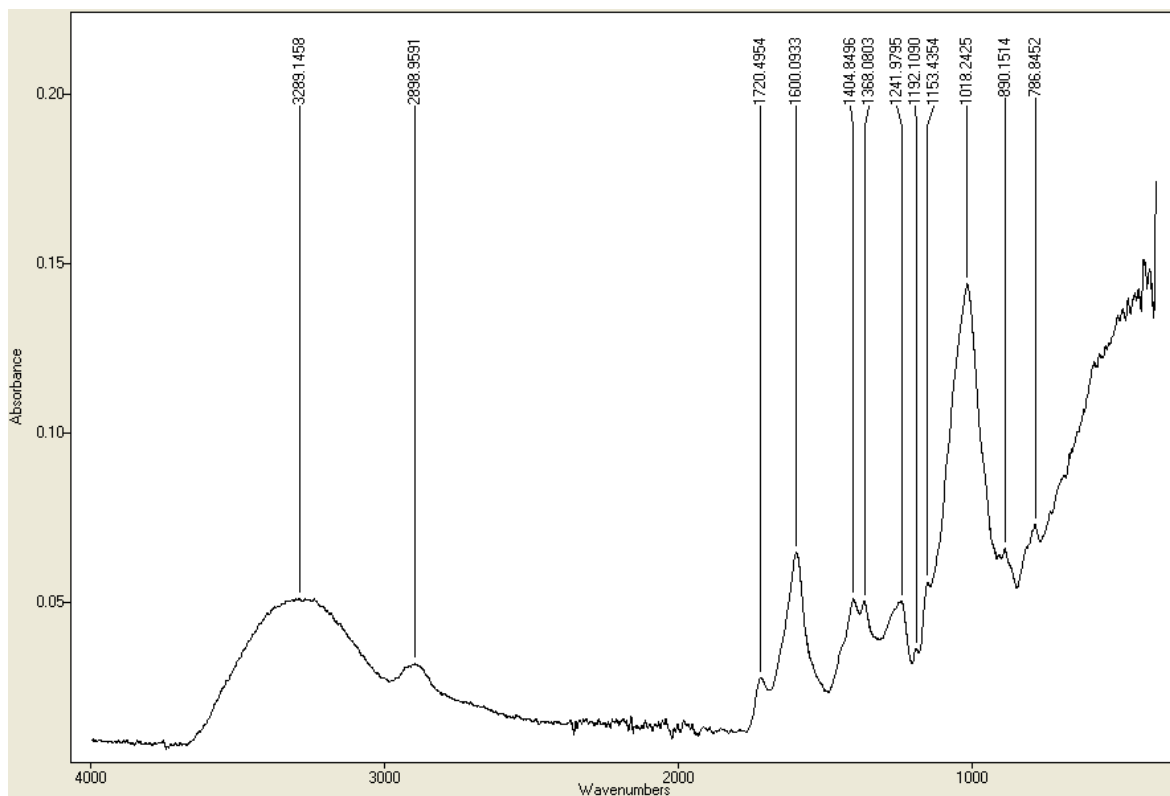
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
711,2496	$\delta$ NH <sub>2</sub>
786,6829	$\delta$ NH <sub>2</sub>
1054,1001	$\delta$ NH <sub>2</sub>
1147,9038	$\nu$ N-C-N
1458,3330	Amida II
1589,3259	Amida II
1673,5697	Amida I
3254,7391	$\nu$ N-H
3325,8817	$\nu$ N-H
3428,4147	$\nu$ N-H



**Figura 101-Espetro do VULKANOX®.**

**Tabela 63- Tabela de correlação para o VULKANOX®.**

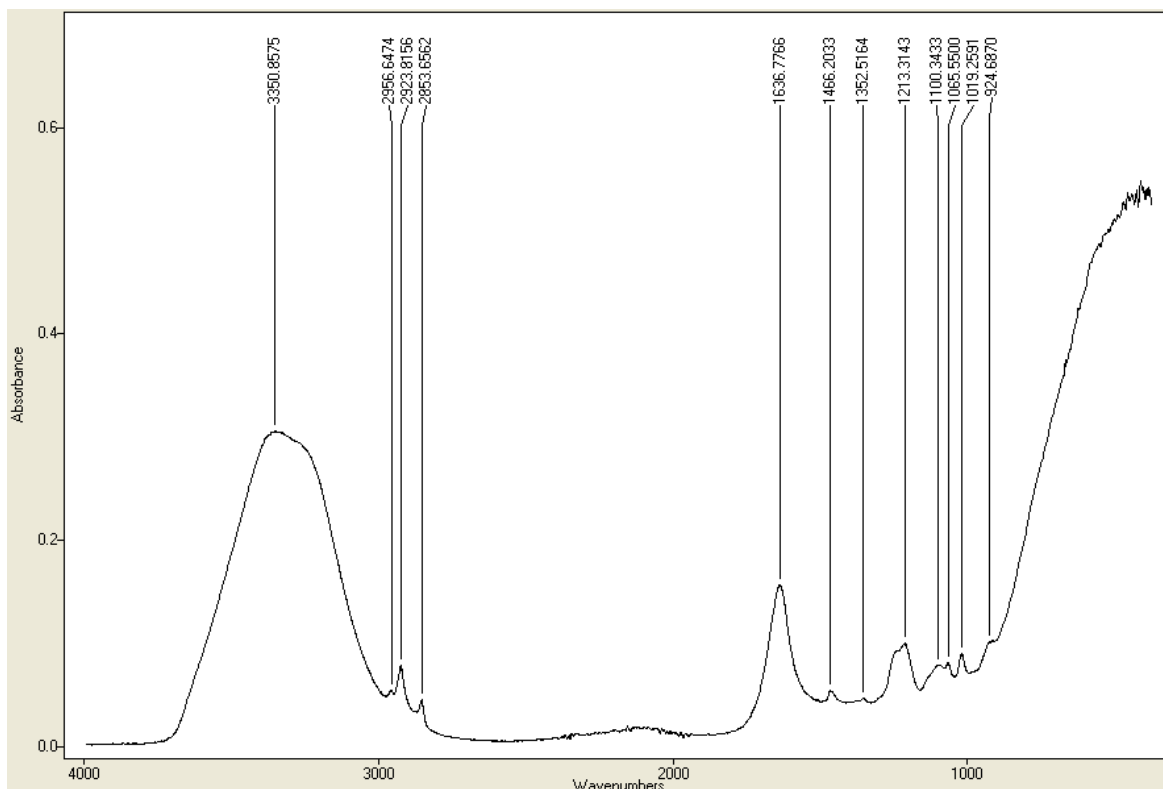
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
768,7995	δCH aromático
865,7865	δCH aromático
1149,1542	νC-C-O
1395,2038	νC=C
1430,9231	νC=C
2870,2940	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2912,6521	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2952,5666	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3069.2890	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3625,5197	νO-H



**Figura 102-Espectro da xantana.**

**Tabela 64- Tabela de correlação para a xantana.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1017,8893	vC-C-O/C-O-C
1153,0297	vC-C-O/C-O-C
1240,5715	δO-H
1600,6039	δH-O-H
1719,7891	vC=O
2895,4320	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
3325,8817	vO-H

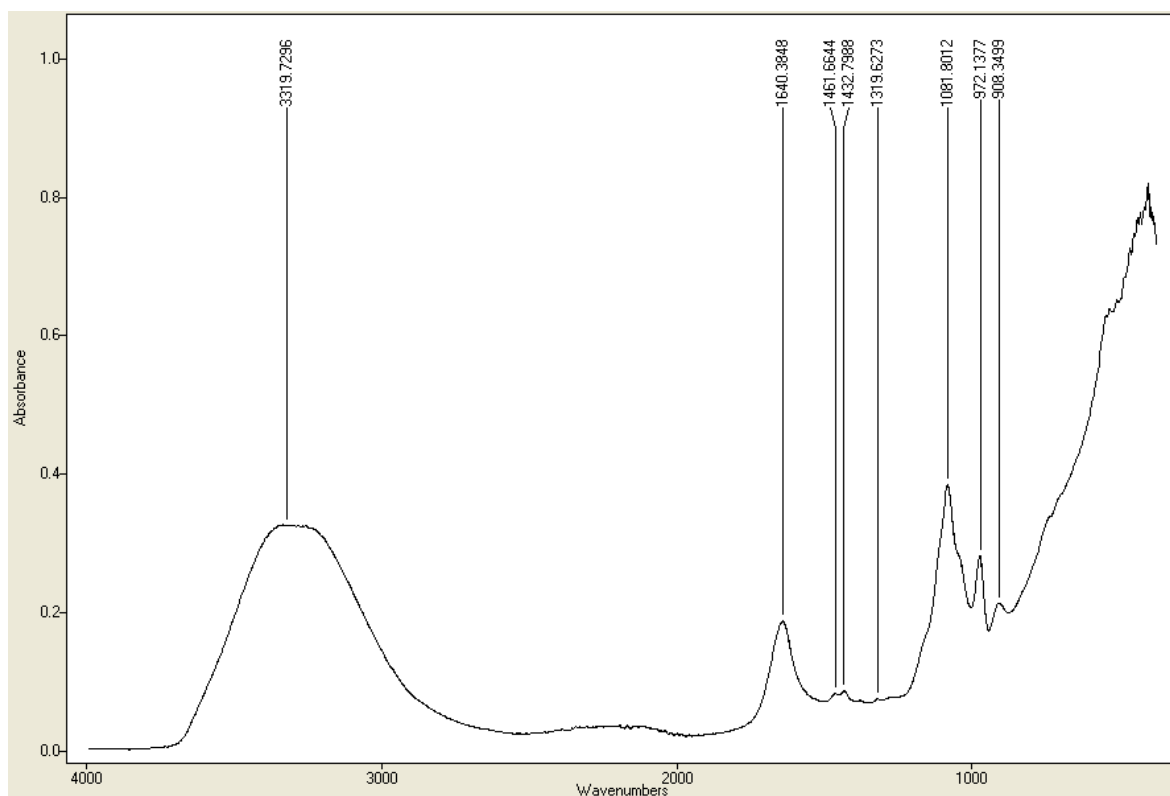


**Figura 103-Espetro do ZETESOL™ ZN.**

**Tabela 65- Tabela de correlação para o ZETESOL™ ZN.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1019,4309	vC-C-O
1065,8554	vSO <sub>2</sub> simétrico
1213.2761	vSO <sub>2</sub> assimétrico
1466,2176	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1637,0630	δH-O-H
2853,8280	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2924,0065	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2957,3585	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3352,9289	vO-H

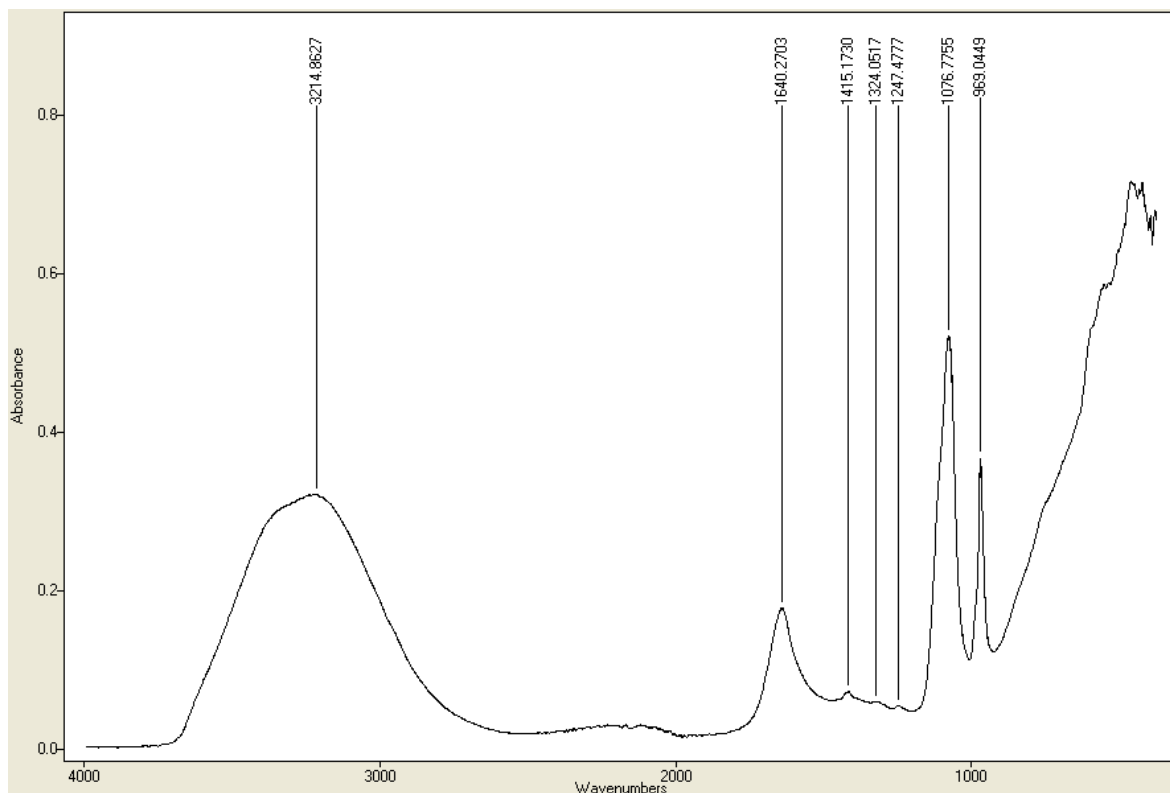
## 7.7- Quelantes.



**Figura 104-Espetro do Aquacid® 1068EX.**

**Tabela 66- Tabela de correlação para o Aquacid® 1068EX.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
971,9522	$\nu$ P=O
1082,2785	$\nu$ P-O-C
1461,6357	$\delta$ CH <sub>2</sub> “tesoura”
1640,7141	$\delta$ H-O-H
3334,7256	$\nu$ O-H

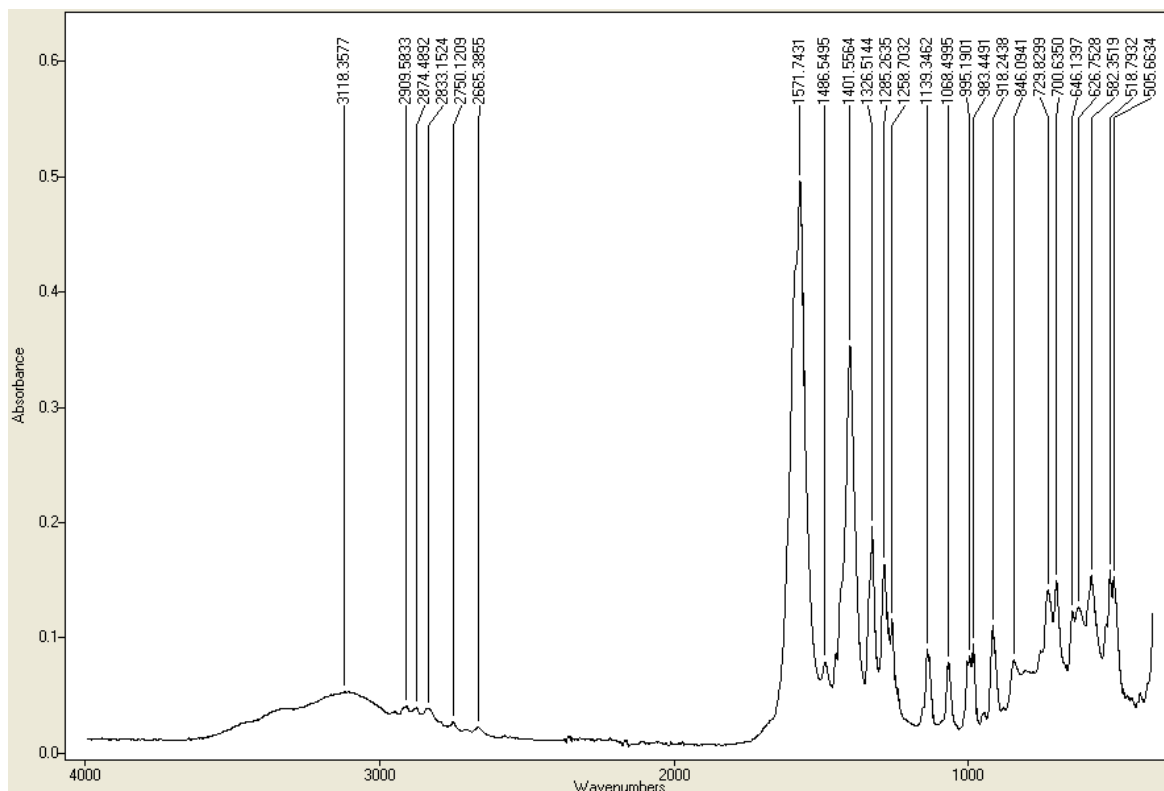


**Figura 105-Espetro do CUBLEN® ACS-402.**

**Tabela 67- Tabela de correlação para o CUBLEN® ACS-402.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
969,0354	vP=O
1076,4223	vP-O-C
1639,9744	δH-O-H
3221,8548	vO-H

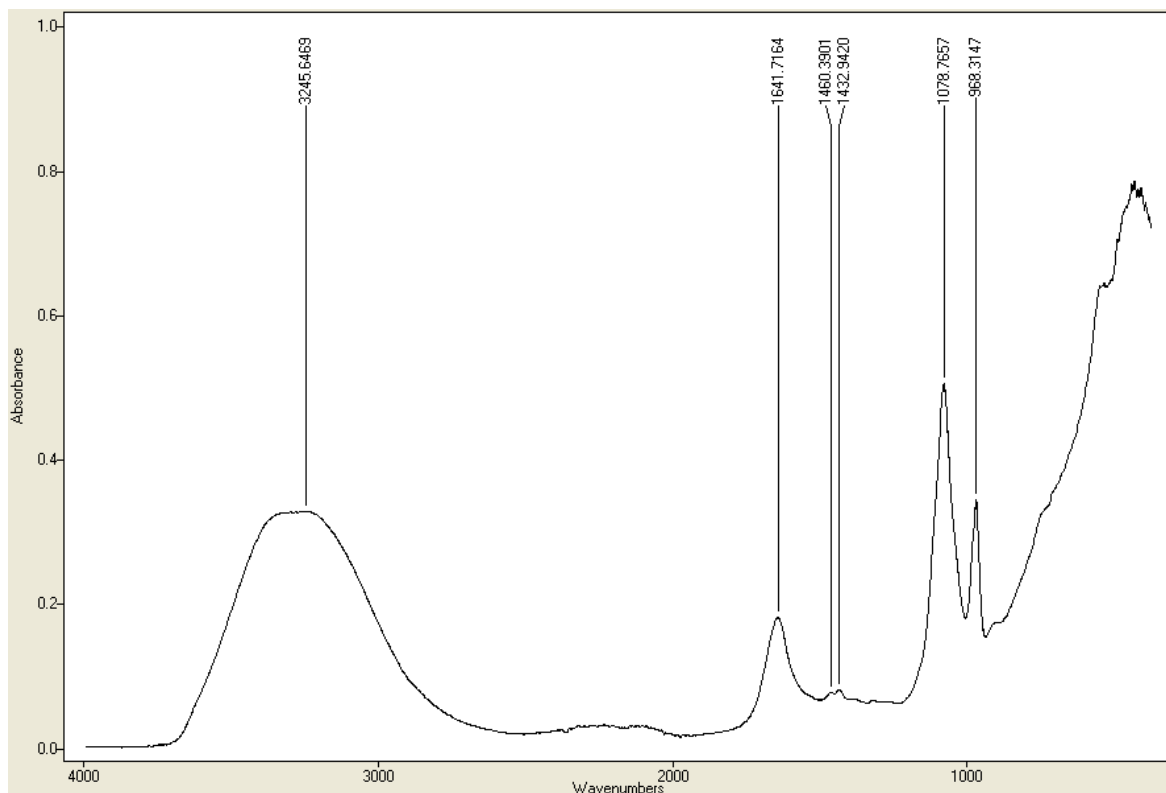




**Figura 106-Espectro do NTA.**

**Tabela 68- Tabela de correlação para o NTA.**

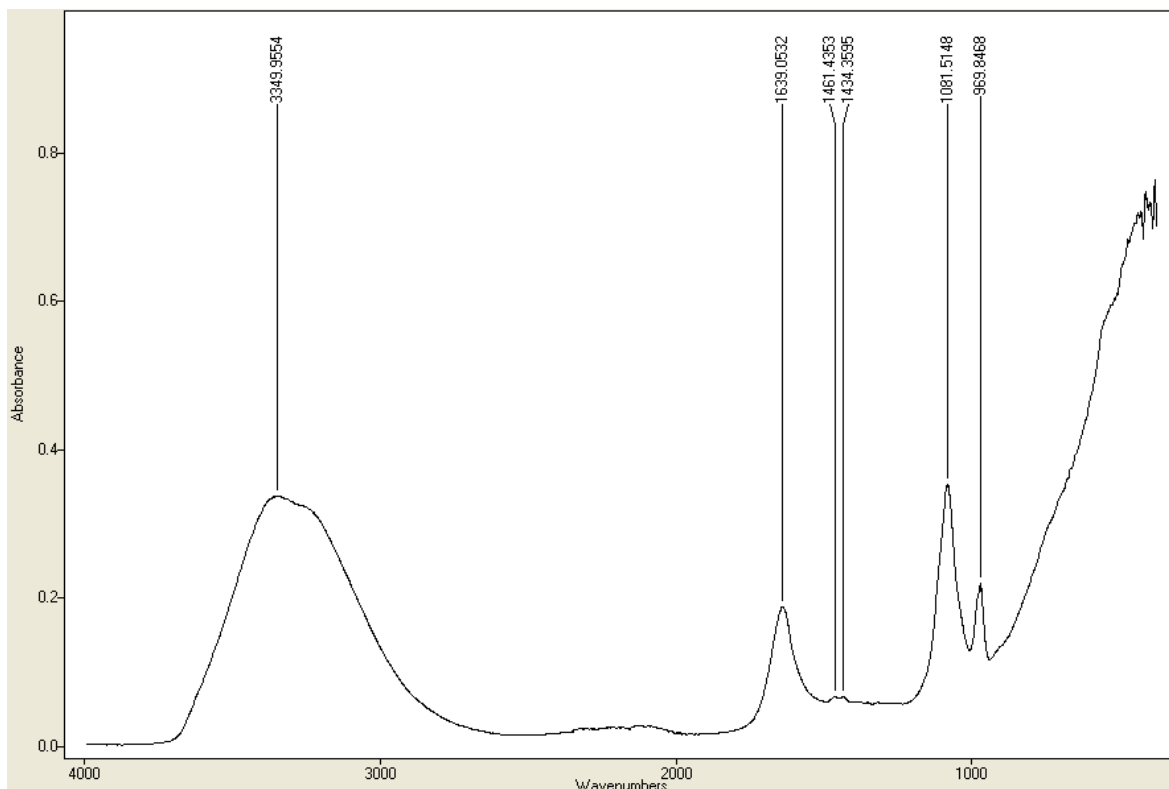
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1401,4084	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> simétrico
1571,7813	vCO <sub>2</sub> <sup>-</sup> assimétrico
2832,8279	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2875,2195	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2910,4376	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2944,9064	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3118.3577	vO-H



**Figura 107-Espetro do SEQUION® 40NA32.**

**Tabela 69- Tabela de correlação para o SEQUION® 40NA32.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
968,3338	vP=O
1078,7752	vP=O
1642,2844	δH-O-H
3243,4753	vO-H



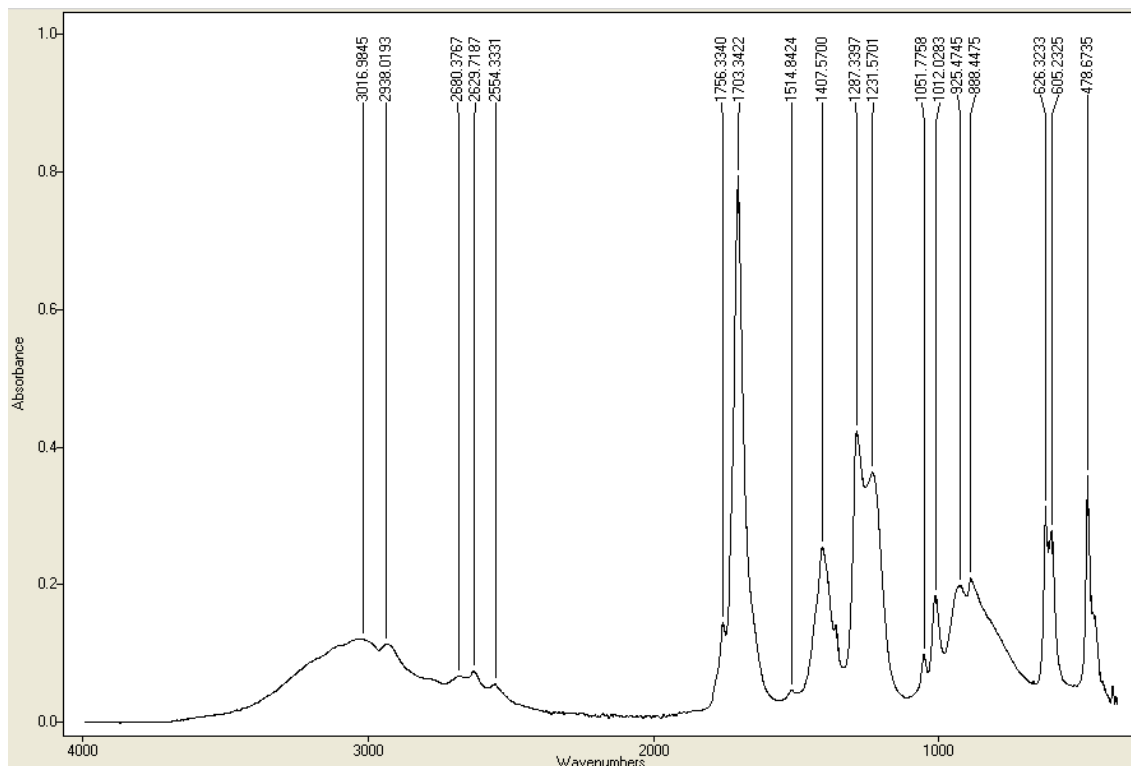
**Figura 108-Espetro do SINOR® FAT P.**

**Tabela 70- Tabela de correlação para o SINOR® FAT P.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
968,3338	$\nu$ P=O
1078,7752	$\nu$ P=O
1642,2844	$\delta$ H-O-H
3342,2904	$\nu$ O-H



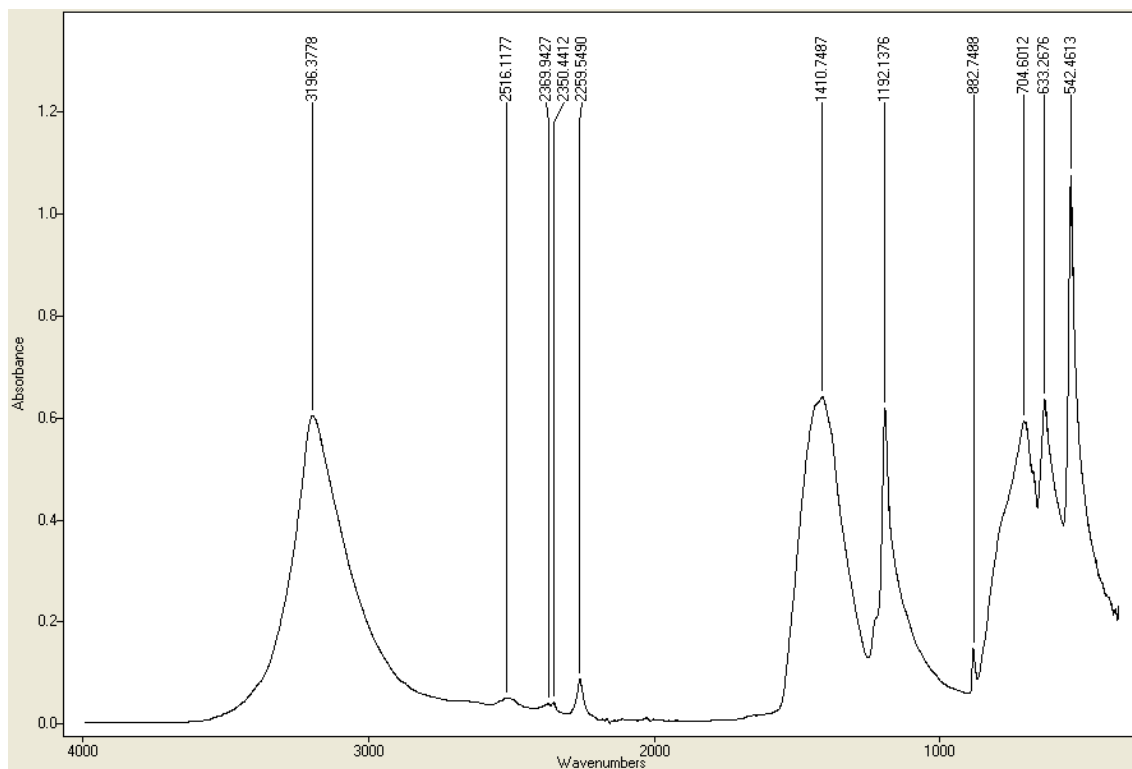
## 7.8- Ácidos e Bases.



**Figura 109-Espectro do ácido acético glacial.**

**Tabela 71- Tabela de correlação para o ácido acético glacial.**

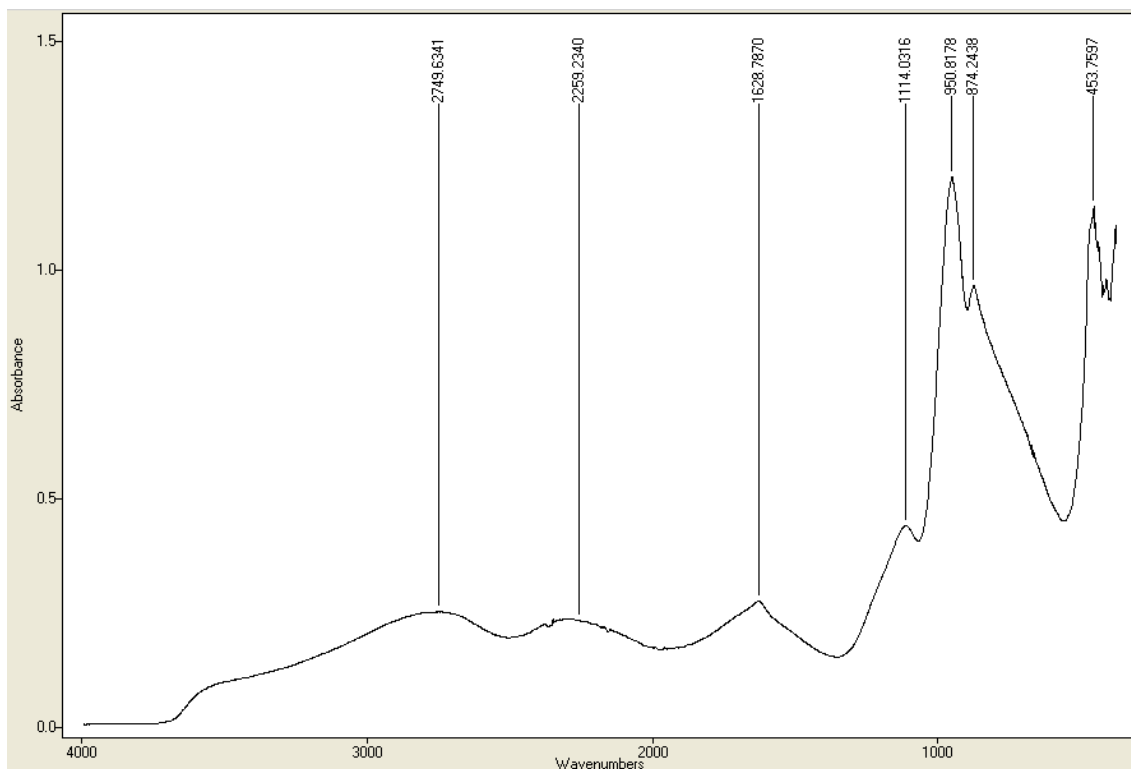
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1011,7897	vC-O
1051,6517	vC-O
1232,1381	δO-H
1287,3301	δO-H
1703,4663	vC=O
2936,8404	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3037,1064	vO-H



**Figura 110-Espetro do ácido bórico.**

**Tabela 72- Tabela de correlação para o ácido bórico.**

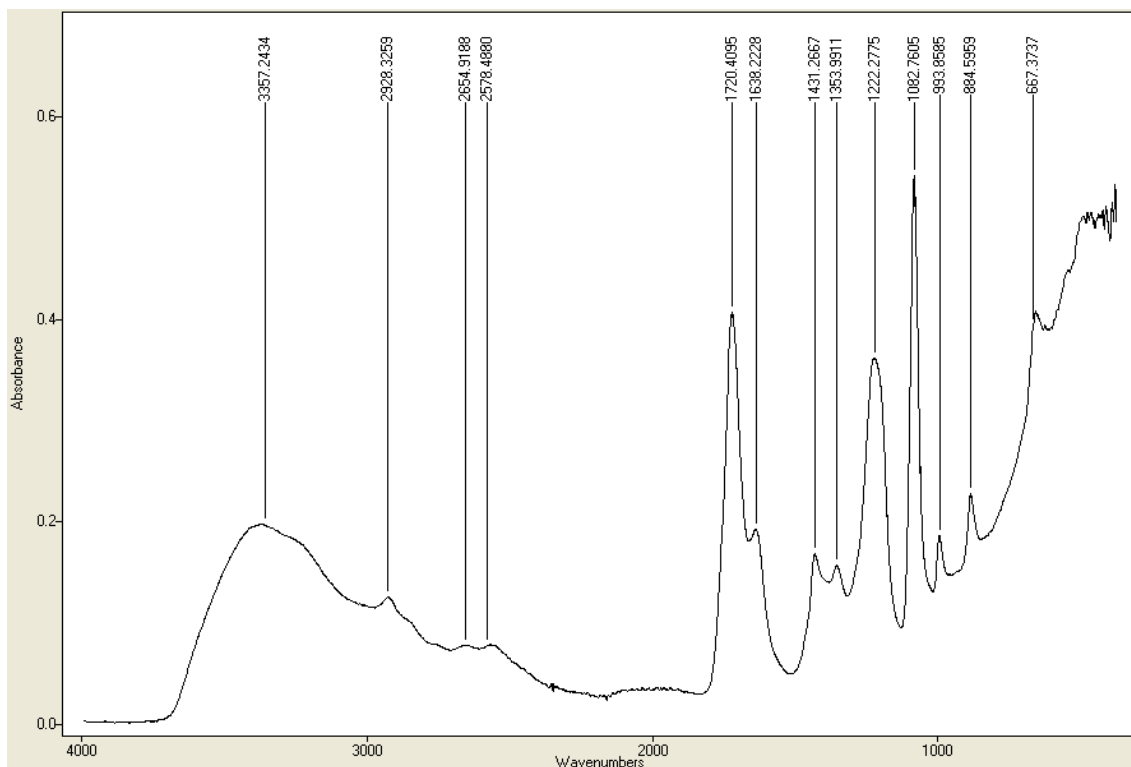
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
543,0182	δB-O-H
633,4585	δB-O
703,1455	δO-B-O
1192,0040	δB-O-H
1409,9707	νB-O
3196.3778	νO-H



**Figura 111-Espectro do ácido fosfórico.**

**Tabela 73- Tabela de correlação para o ácido fosfórico.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
950,5076	vP-O
1112,4184	vP=O
1628,1236	vP-O
2759,3323	vO-H

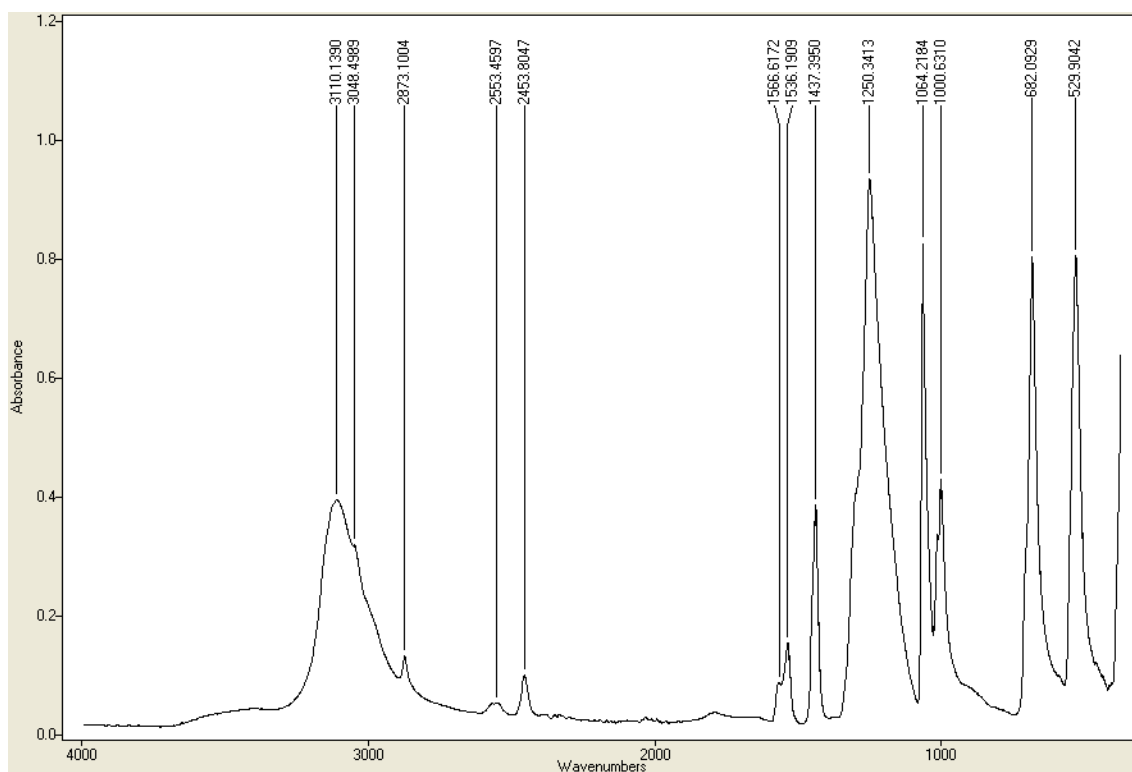


**Figura 112-Espetro do ácido glicólico.**

**Tabela 74- Tabela de correlação para o ácido glicólico.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1082,7319	vC-O
1222,1057	vC-O
1353,9816	δO-H
1637,7837	δH-O-H
1719,9990	vC=O
2927,7865	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3378,4738	vO-H

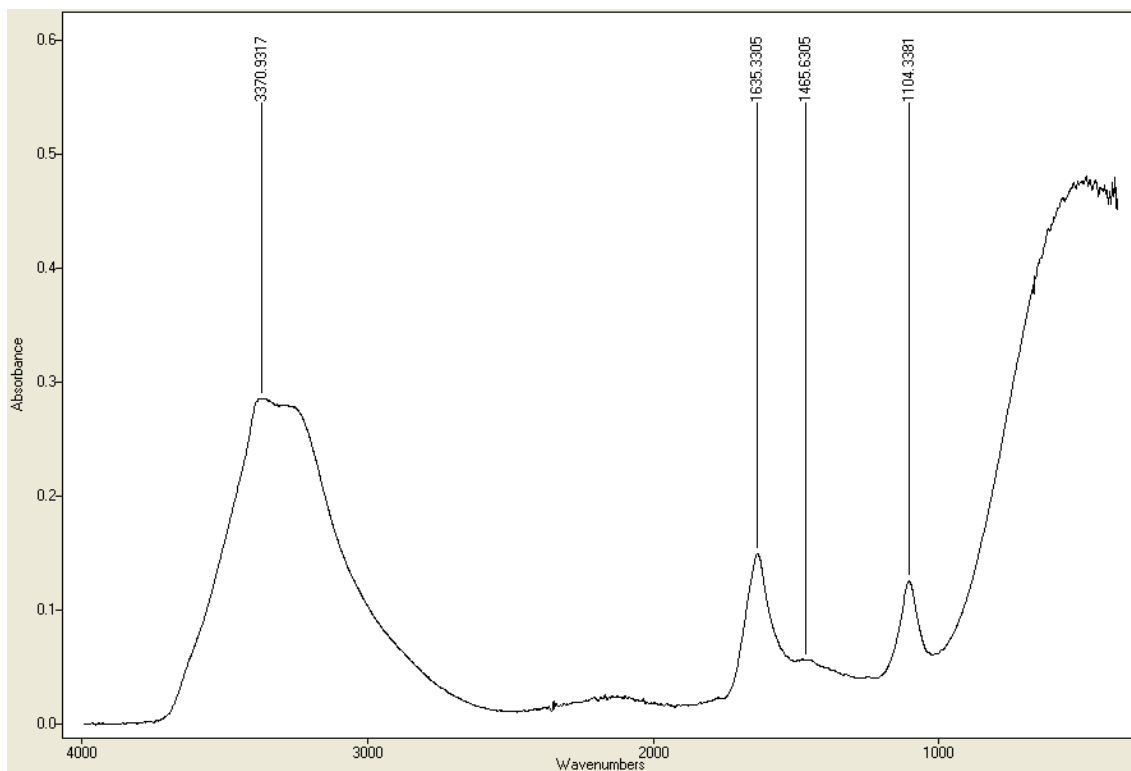




**Figura 113-Espetro do ácido sulfâmico.**

**Tabela 75- Tabela de correlação para o ácido sulfâmico.**

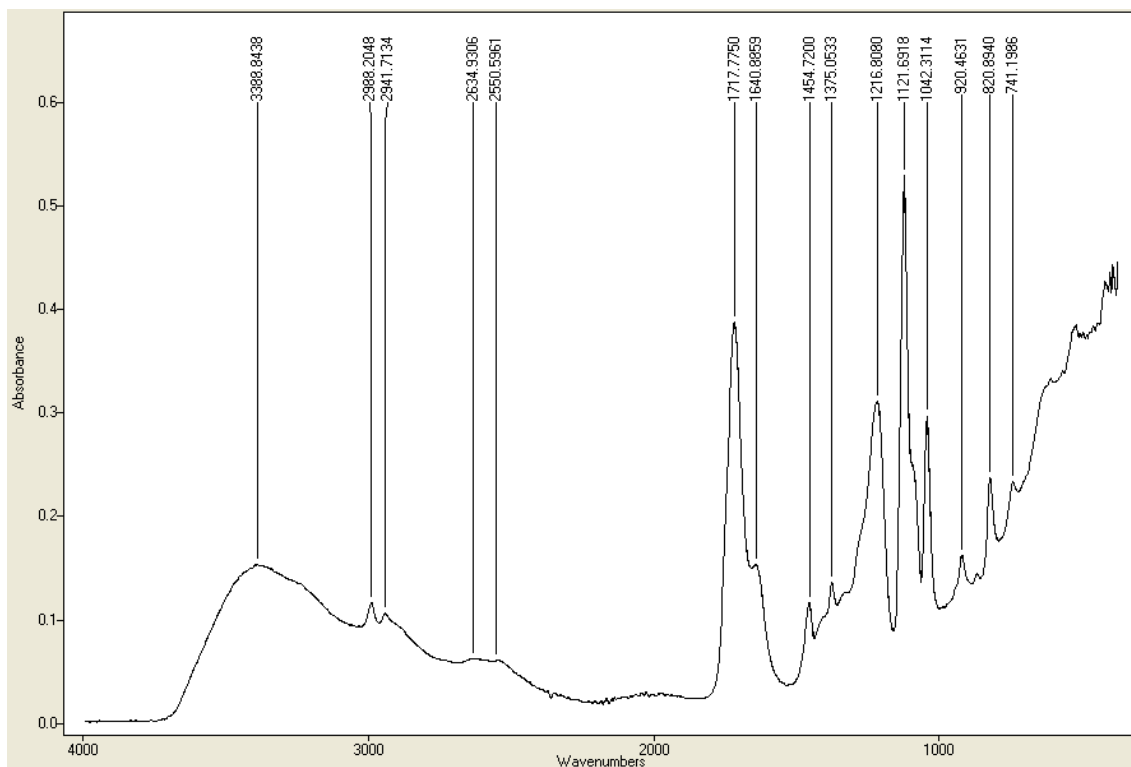
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1064,3902	vSO <sub>3</sub> simétrico
1251,1909	vSO <sub>3</sub> assimétrico
1536,2959	δN-H
1566,9656	δN-H
2453,9383	vN-H
3048,6564	vN-H
3110,7977	vN-H



**Figura 114-Espetro da amónia.**

**Tabela 76- Tabela de correlação para a amónia.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1104,3381	$\delta$ N-H
1465,6305	$\delta$ NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>
1635,3305	$\delta$ N-H
3370,9317	$\nu$ N-H



**Figura 115-Espetro do PURAC\* 80.**

**Tabela 77- Tabela de correlação para o PURAC\* 80.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1042,3687	vC-C-O
1121,6918	vC-C-O
1216,9559	vC-O
1375,0437	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1454,6055	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1640,9814	δH-O-H
1717,7559	vC=O
2941,6370	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2988,3002	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3395,2059	vO-H



## 7.9- Perfumes

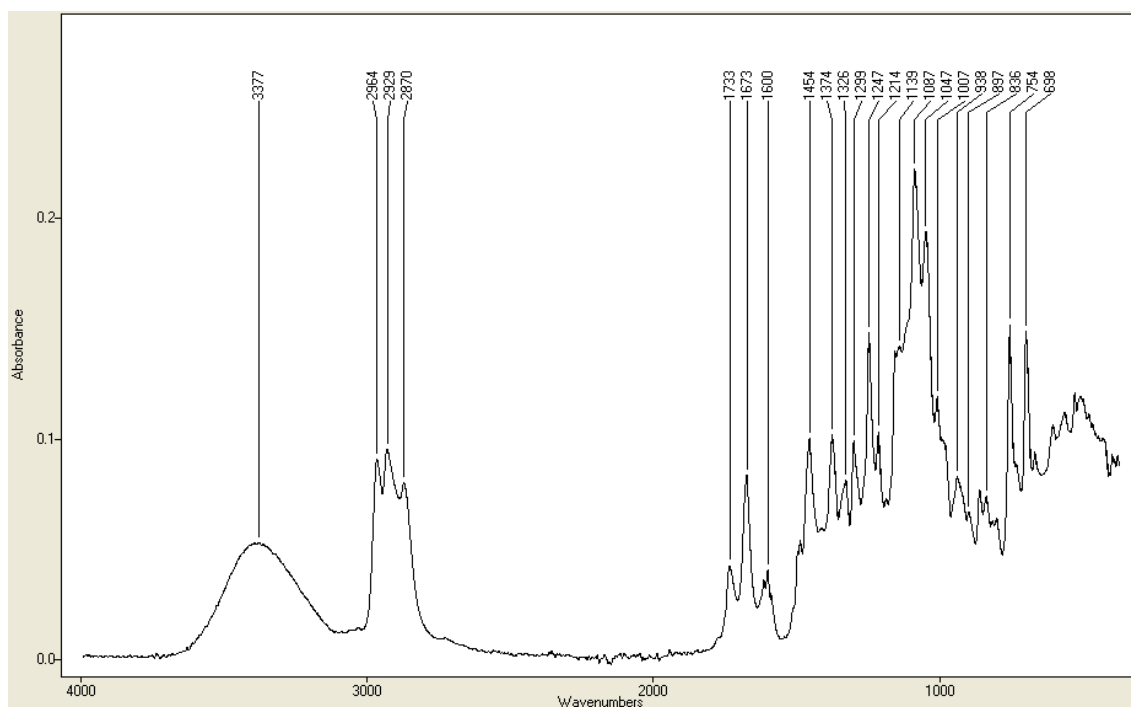
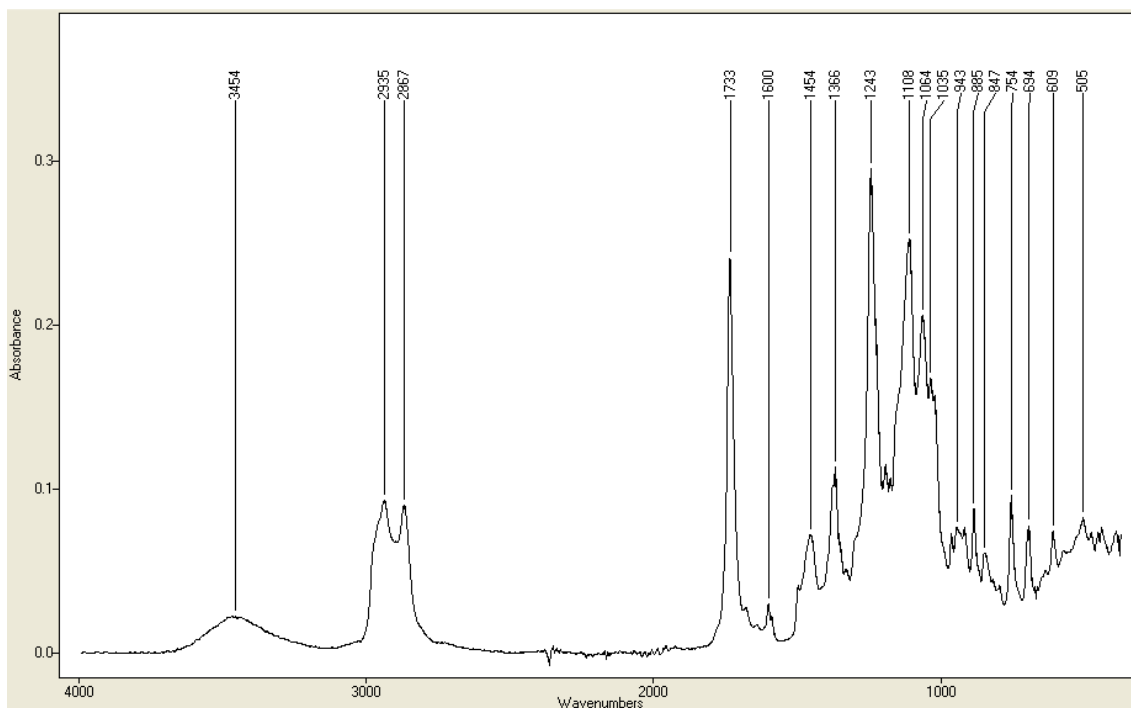


Figura 116-Espectro do perfume Amazone.

Tabela 78- Tabela de correlação para o perfume Amazone.

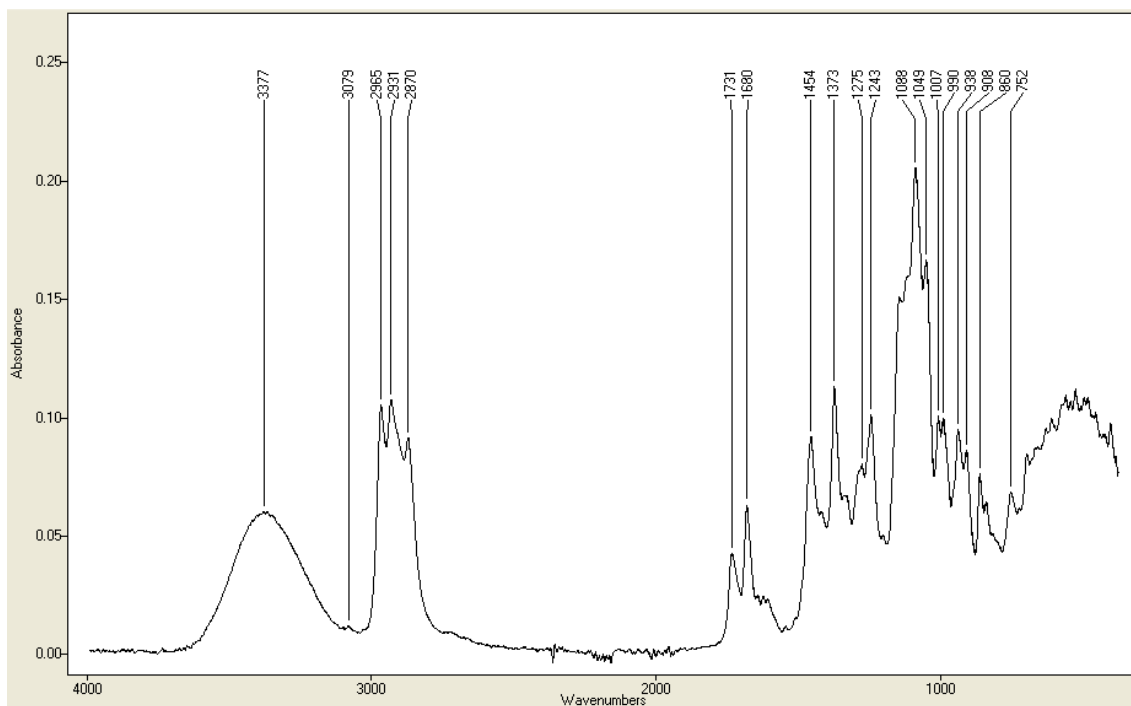
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
698,5875	$\delta$ CH aromático monosubstituído
754,6530	$\delta$ CH aromático monosubstituído
1047,5710	$\nu$ C-O
1087,0417	$\nu$ C-O
1247,0481	$\nu$ C-O
1299,8586	$\delta$ CH <sub>2</sub> "torção"
1326,9153	$\delta$ O-H
1374,6047	$\delta$ CH <sub>2</sub> "oscilação"
1454,9539	$\delta$ CH <sub>2</sub> "tesoura"
1486,7786	$\nu$ C=C
1600,5228	$\nu$ C=C
1673,6557	$\nu$ C=O
1733,3198	$\nu$ C=O
2871,0433	$\nu$ C-H simétrico sp <sup>3</sup>
2929,6241	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2964,8040	$\nu$ C-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3029,5129	$\nu$ C-H aromático/sp <sup>2</sup>
3060,7267	$\nu$ C-H aromático/sp <sup>2</sup>
3389,5167	$\nu$ O-H



**Figura 117-Espetro do perfume Applevert.**

**Tabela 79- Tabela de correlação para o perfume Applevert.**

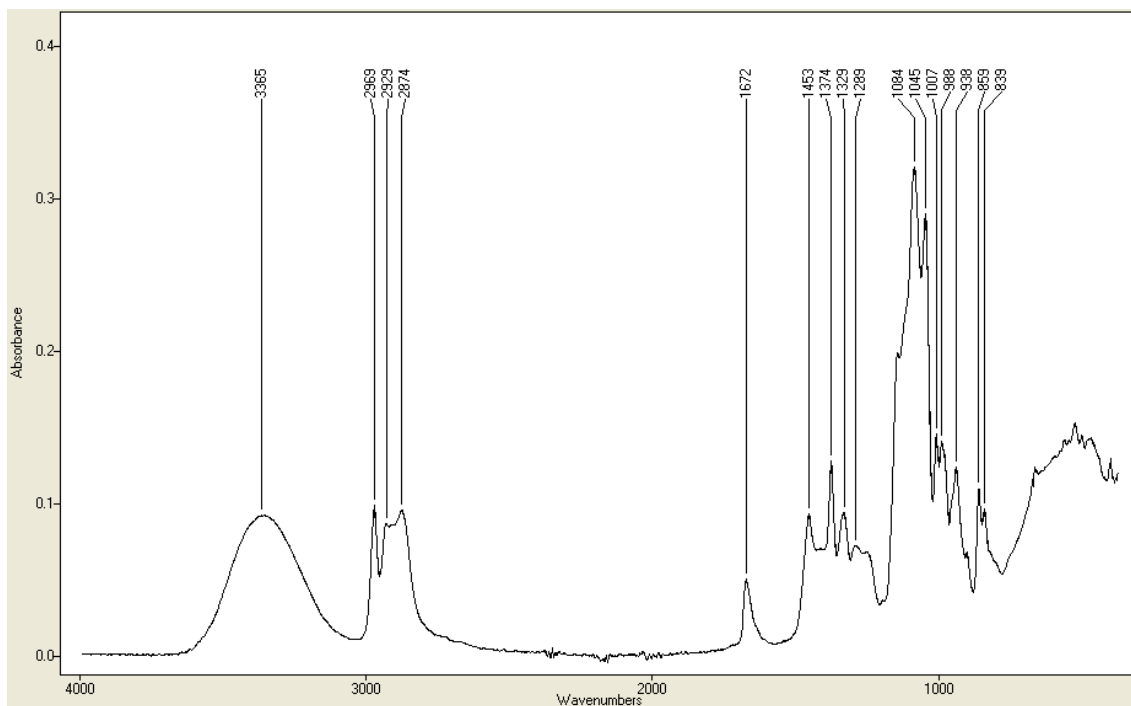
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1035,9732	vC-O
1064,2661	vC-O
1108,6192	vC-O
1243,3111	vC-O
1366,4623	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1453,2405	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1600,4083	vC=C
1733,2244	vC=O
2867,6594	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2935,7570	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3455,7434	vO-H



**Figura 118-Espetro do perfume Anti-tabaco.**

**Tabela 80- Tabela de correlação para o perfume Anti-tabaco.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1007,4322	vC-O
1049,4419	vC-O
1088,2014	vC-O
1243,2347	vC-O
1373,3972	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1454,2905	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1680,6907	vC=O
1732,0359	vC=O
2870,7856	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2931,0654	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2966,0354	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3078,6579	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3352,7475	vO-H

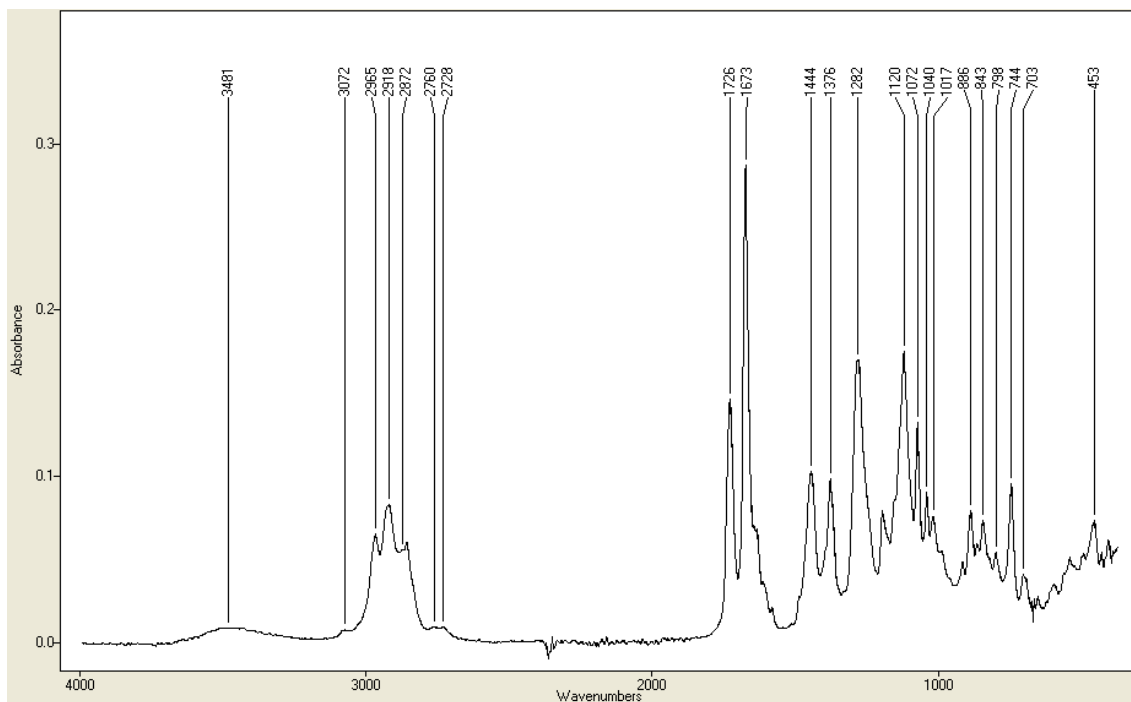


**Figura 119-Espetro do perfume Citro.**

**Tabela 81- Tabela de correlação para o perfume Citro.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1007,3844	vC-O
1045,9435	vC-O
1084,7412	vC-O
1289,6449	δO-H
1374,4615	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1452,9207	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1672,1474	vC=O
2874,5752	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2929,5334	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2969,6818	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3358,3411	vO-H

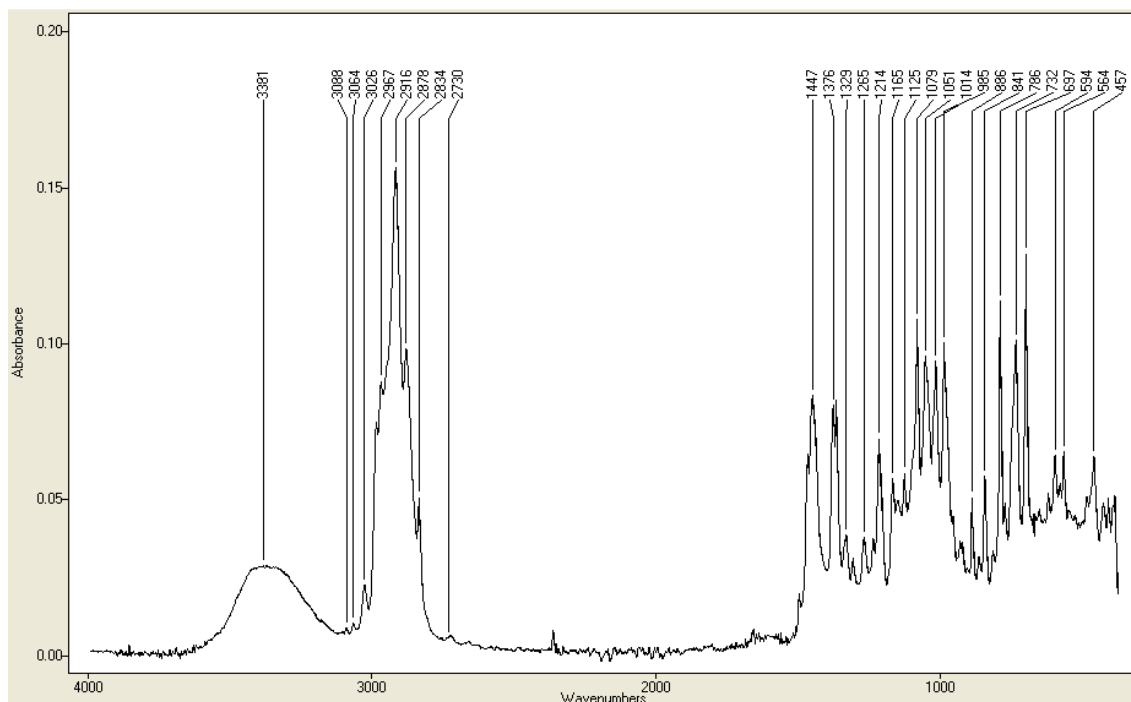




**Figura 120-Espetro do perfume Citrus mix.**

**Tabela 82- Tabela de correlação para o perfume Citrus mix.**

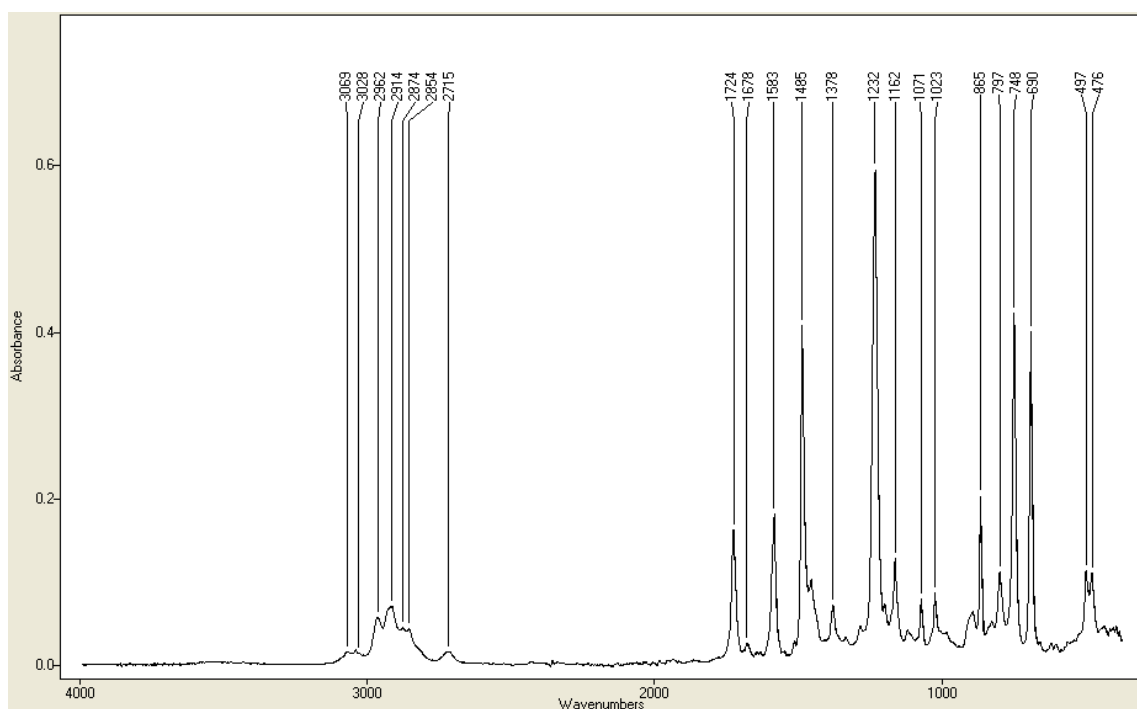
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
744,5586	δCH aromático 1,3
1040,6648	νC-O
1072,8762	νC-O
1120,1120	νC-O
1281,2497	νC-O
1376,6044	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1444,2629	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1673,1306	νC=O
1726,9386	νC=O
2728,7915	νC-H
2763,0598	νC-H
2860,0496	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2872,7042	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2918,0931	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2965,4388	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3070,5586	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3499,7386	νO-H



**Figura 121-Espetro do perfume Eucalypto 2100.**

**Tabela 83- Tabela de correlação para o perfume Eucalypto 2100.**

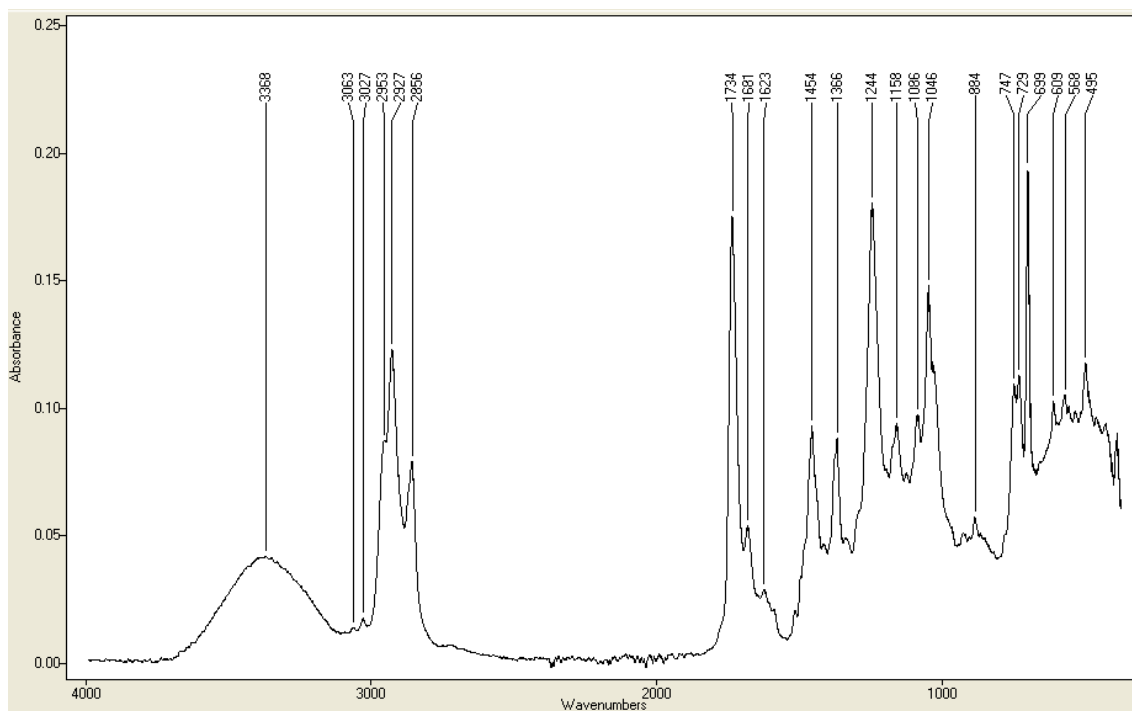
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1014,9111	vC-O
1051,6231	vC-O
1079,9637	vC-O
1214,5600	vC-O
1265,8957	vC-O
1376,2512	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1448,0334	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
2723,7848	vC-H
2834,0783	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2878,9040	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2917,0431	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2967,9397	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2983,8950	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3026,0384	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3064,1440	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3088,3085	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3373,1653	vO-H



**Figura 122-Espetro do perfume FGR Marselha.**

**Tabela 84- Tabela de correlação para o perfume FGR Marselha.**

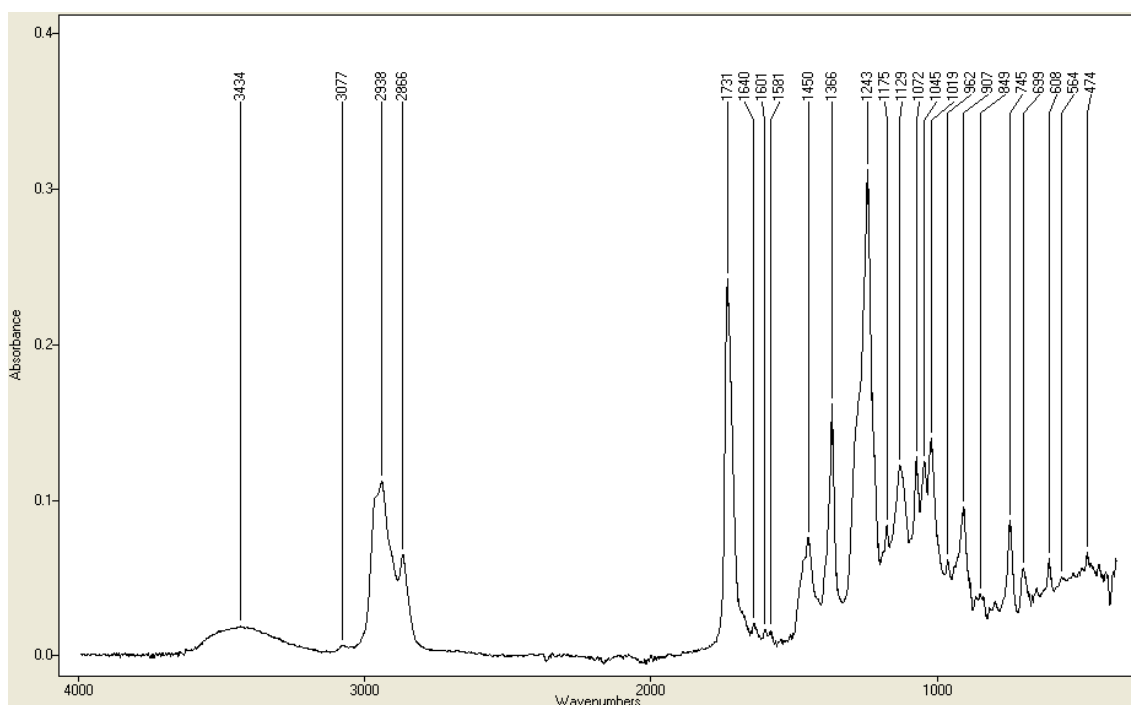
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
690,4261	δCH aromático monosubstituído
748,3148	δCH aromático monosubstituído
1023,0725	νC-O
1071,6686	νC-O
1162,4559	νC-O
1232,2574	νC-O
1378,0029	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1485,7525	νC=C
1583,5700	νC=C
1724,8371	νC=O
2718,0814	νC-H
2854,7396	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2874,6324	νC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2914,4849	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2962,5751	νC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3013,0541	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3027,5656	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3040,1562	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3068,0290	νC-H aromático/sp <sup>2</sup>



**Figura 123-Espetro do perfume Floral.**

**Tabela 85- Tabela de correlação para o perfume Floral.**

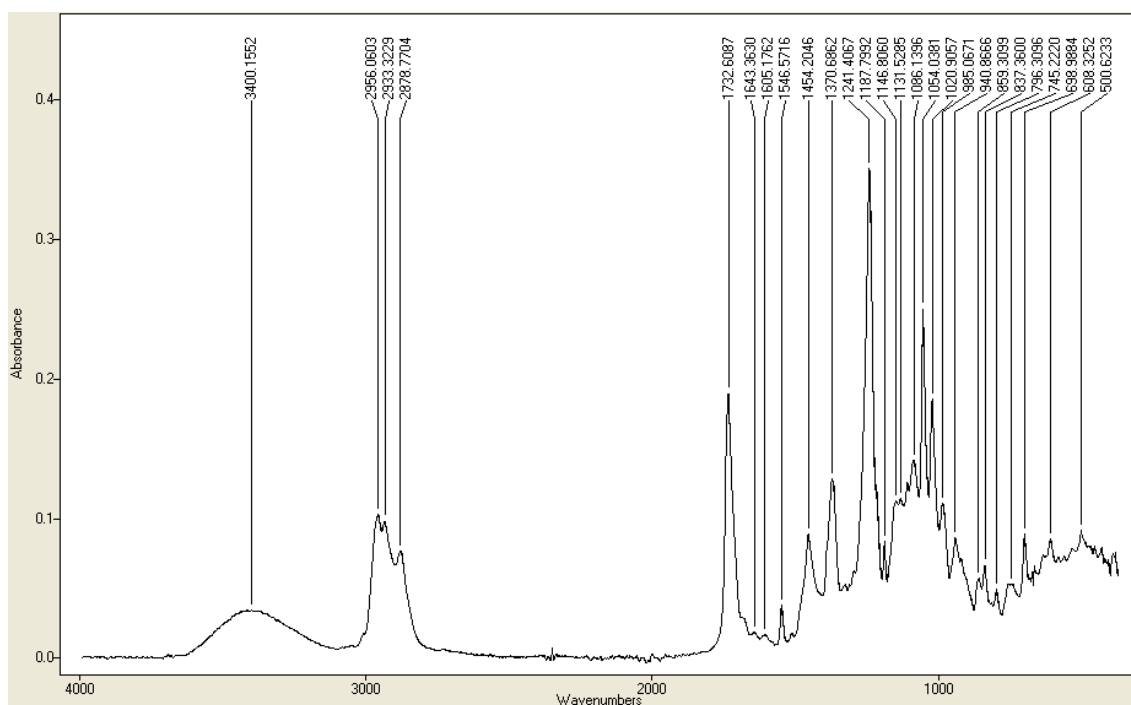
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
699,7377	δCH aromático
1046,5544	vC-O
1085,5049	vC-O
1158,0974	vC-O
1244,1463	vC-O
1366,8060	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1455,0780	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1682,0271	vC=O
1734,6514	vC=O
2856,7393	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2926,9465	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2952,9055	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3028,0000	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3063,9293	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3087,4303	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3366,2734	vO-H



**Figura 124-Espetro do perfume Freshclor.**

**Tabela 86- Tabela de correlação para o perfume Freshclor.**

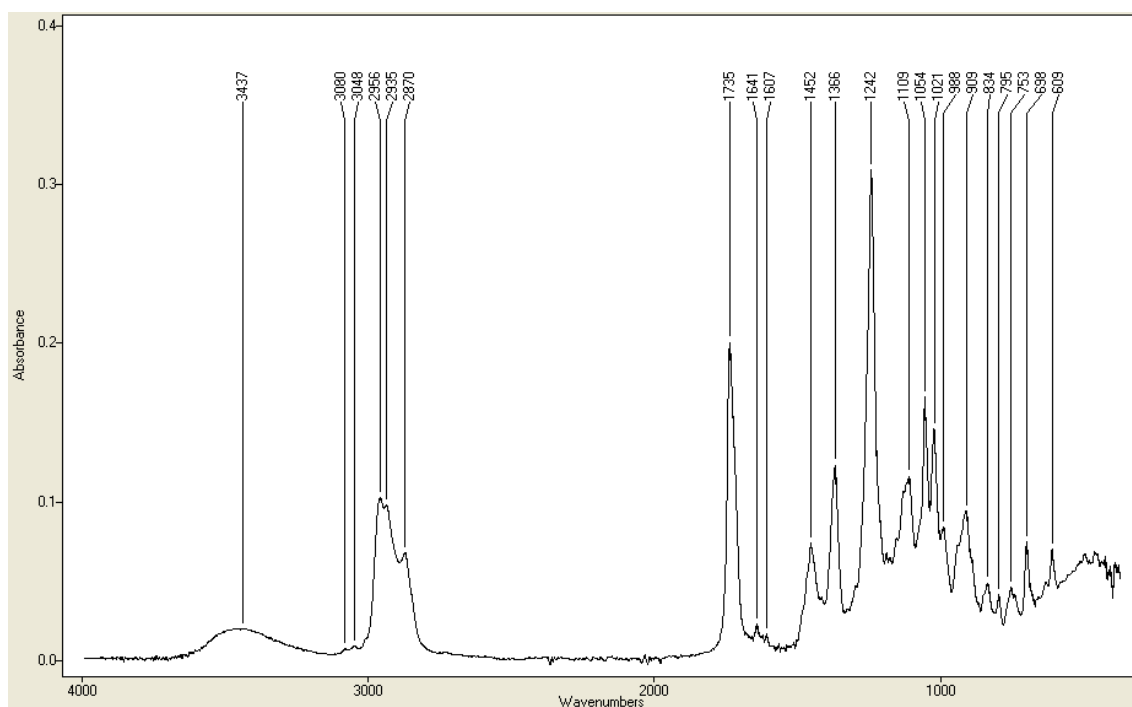
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1019,8461	vC-O
1045,4519	vC-O
1072,7430	vC-O
1129,7196	vC-O
1175,3471	vC-O
1243,0820	vC-O
1366,3764	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1449,9425	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1731,9023	vC=O
2866,1751	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2938,9930	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3075,4268	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3435,0671	vO-H



**Figura 125-Espetro do perfume Herbal.**

**Tabela 87- Tabela de correlação do perfume Herbal.**

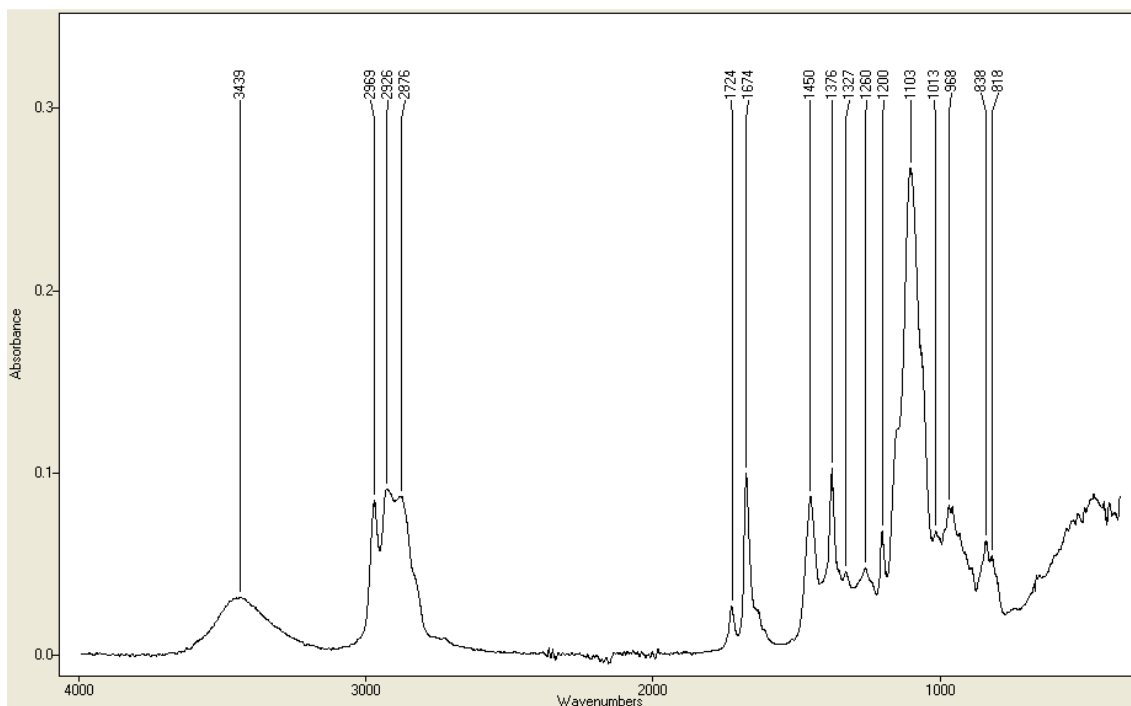
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1020,9152	vC-O
1054,0572	vC-O
1085,5526	vC-O
1131,3757	vC-O
1147,2117	vC-O
1187,8087	vC-O
1241,4163	vC-O
1370,6958	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1454,2237	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1546,5143	vC=C
1604,8899	vC=C
1642,9525	vC=C
1732,6278	vC=O
2878,5938	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2933,3802	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2956,0269	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3007,6919	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3048,7233	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3400,1791	vO-H



**Figura 126-Espetro do perfume Lavanda.**

**Tabela 88- Tabela de correlação para o perfume Lavanda.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1021,5309	vC-O
1054,8017	vC-O
1109,4449	vC-O
1242,0558	vC-O
1366,9683	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1453,0257	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1607,5912	vC=C
1641,2964	vC=C
1735,1573	vC=O
2871,0624	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2935,6616	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2957,0101	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3048,7853	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3080,0850	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3459,2800	vO-H

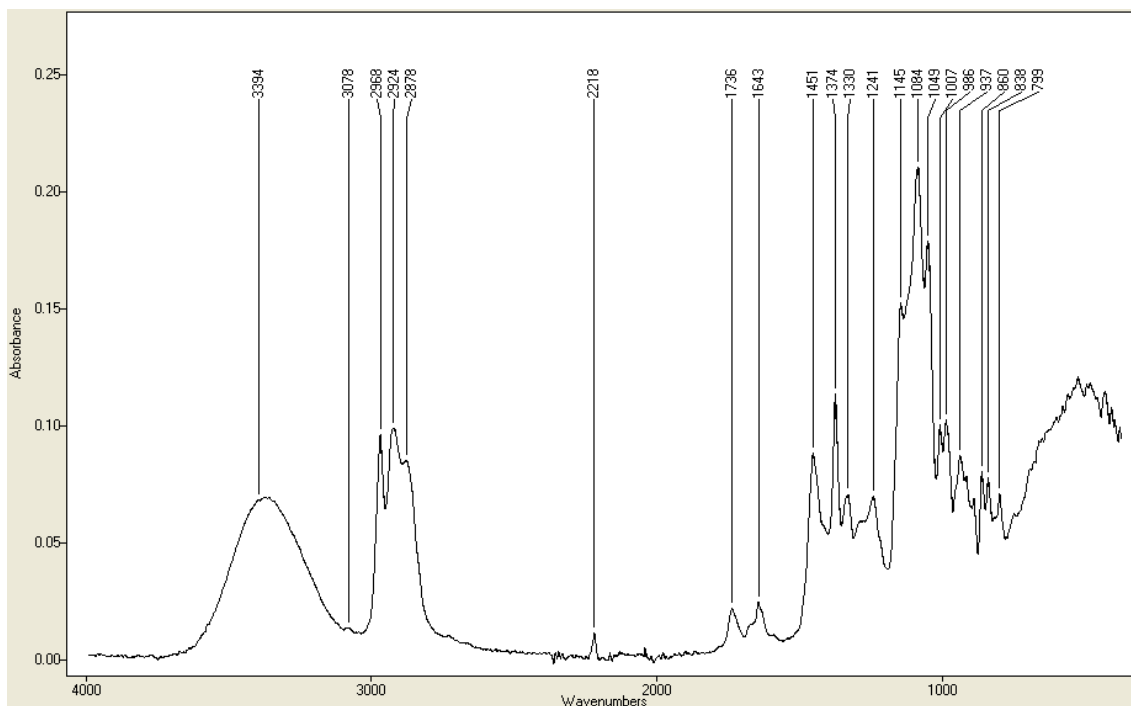


**Figura 127-Espetro do perfume Limão 180.**

**Tabela 89- Tabela de correlação para o perfume Limão 180.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1014,4672	vC-O-C
1200,8622	vC-O
1260,1588	vC-O
1327,4547	δO-H
1376,0126	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1450,7778	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1674,6552	vC=O
1724,9198	vC=O
2876,5797	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2926,4685	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2969,2999	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3459,6618	vO-H

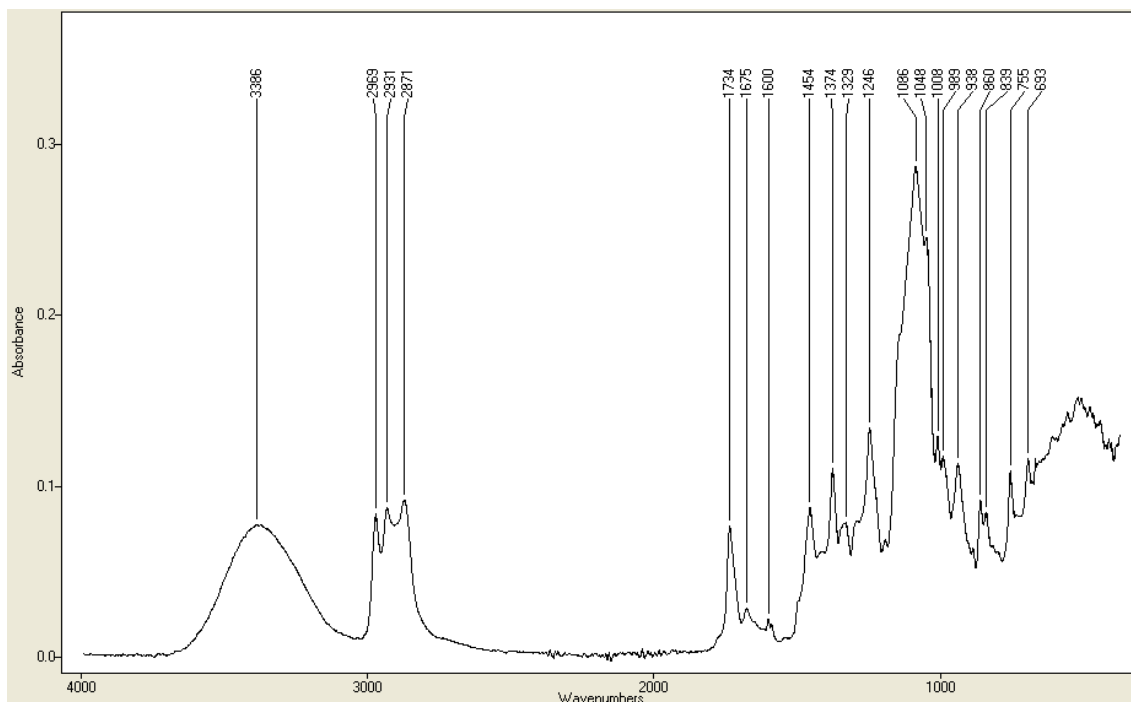




**Figura 128-Espetro do perfume Limão Verde.**

**Tabela 90-Tabela de correlação para o perfume Limão Verde.**

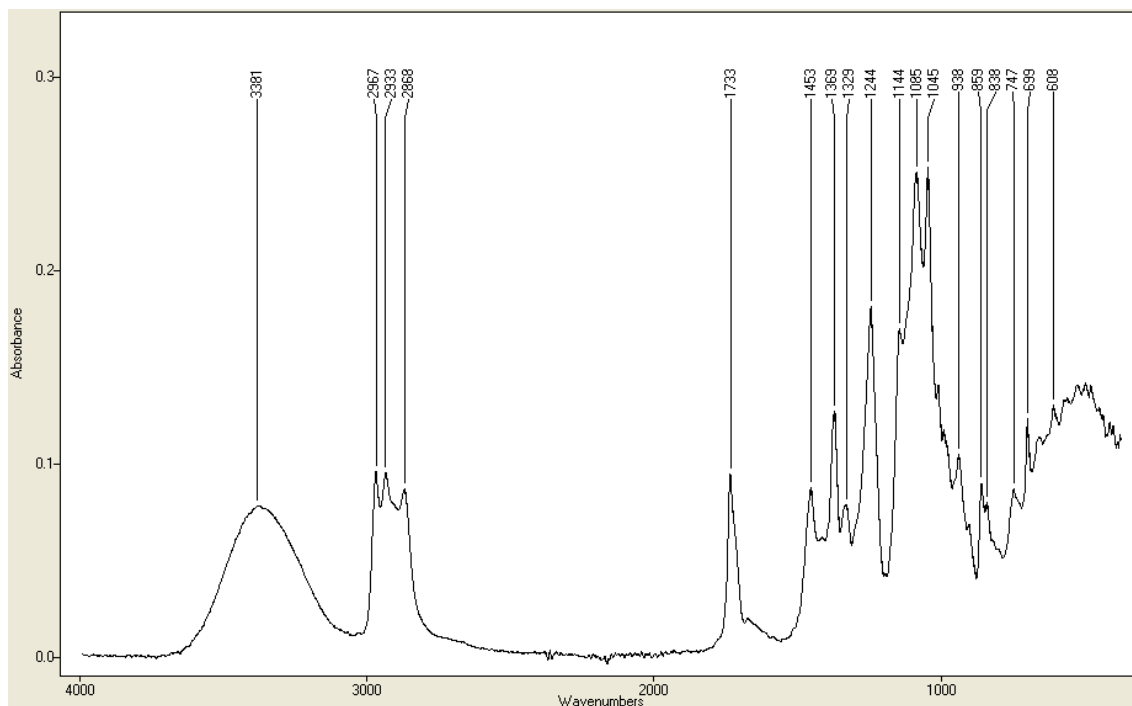
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1049,6328	vC-O
1084,8605	vC-O
1145,1308	vC-O
1241,8840	vC-O
1374,1487	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1451,7991	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1736,4221	vC=O
2218,9233	vC≡C
2876,3220	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2922,2454	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2968,3215	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3370,7407	vO-H



**Figura 129-Espetro do perfume Maçã 98138.**

**Tabela 91-Tabela de correlação do perfume Maçã 98138.**

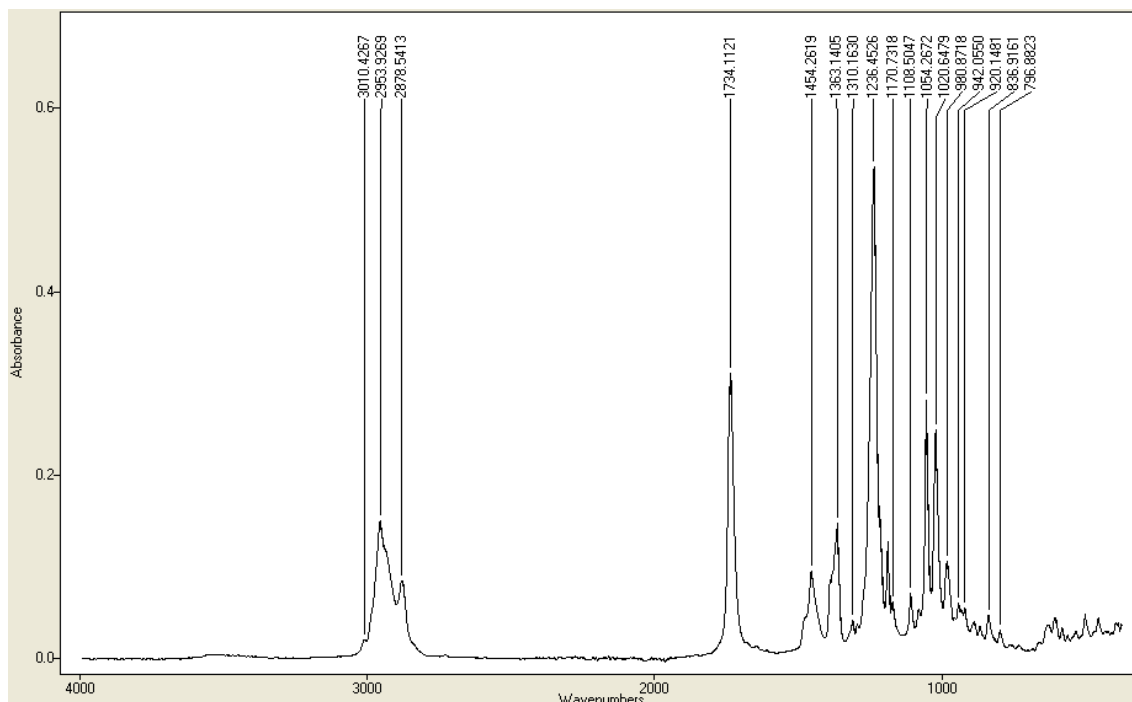
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1048,4588	vC-O
1085,8724	vC-O
1246,5995	vC-O
1329,6645	δO-H
1374,9292	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1455,1305	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1733,9212	vC=O
2871,7401	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2931,3518	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2969,5672	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3379,5751	vO-H



**Figura 130-Espetro do perfume Pepino & Aloé.**

**Tabela 92-Espetro de correlação para o perfume Pepino & Aloé.**

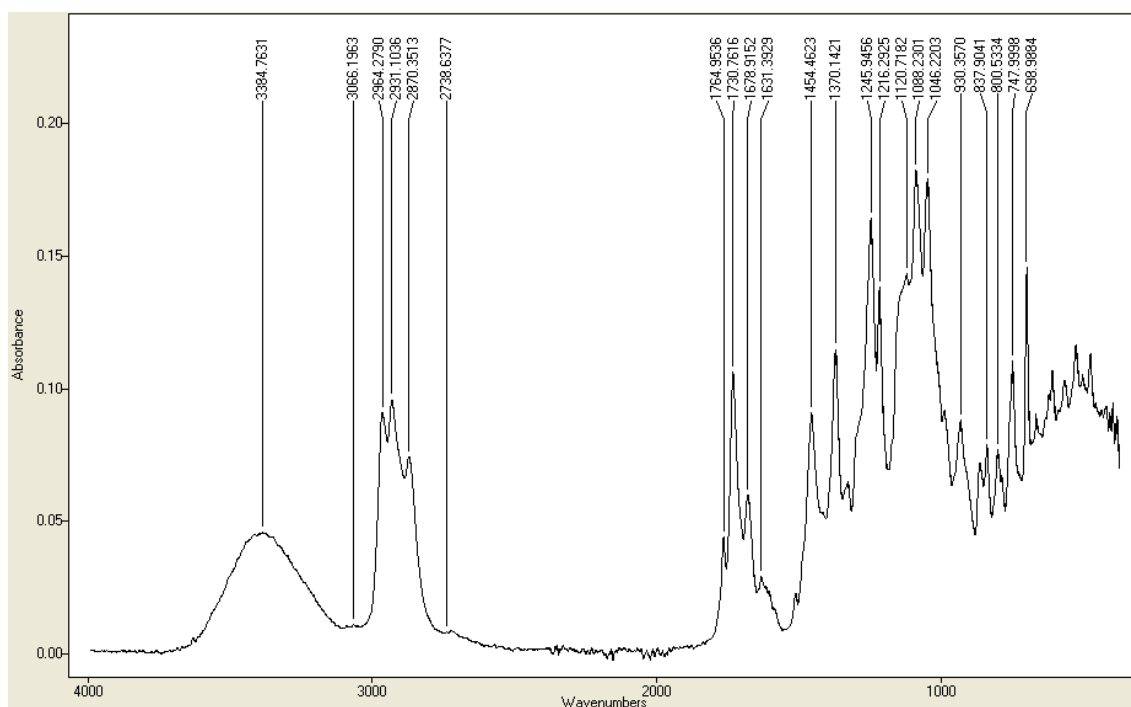
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1045,9435	vC-O
1085,4094	vC-O
1143,9996	vC-O
1244,4995	vC-O
1329,5403	δO-H
1369,6887	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1453,4887	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1733,4725	vC=O
2868,8383	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2933,9577	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2967,6860	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3376,9787	vO-H



**Figura 131-Espetro do perfume Pinho 2110.**

**Tabela 93-Tabela de correlação para o perfume Pinho 2110.**

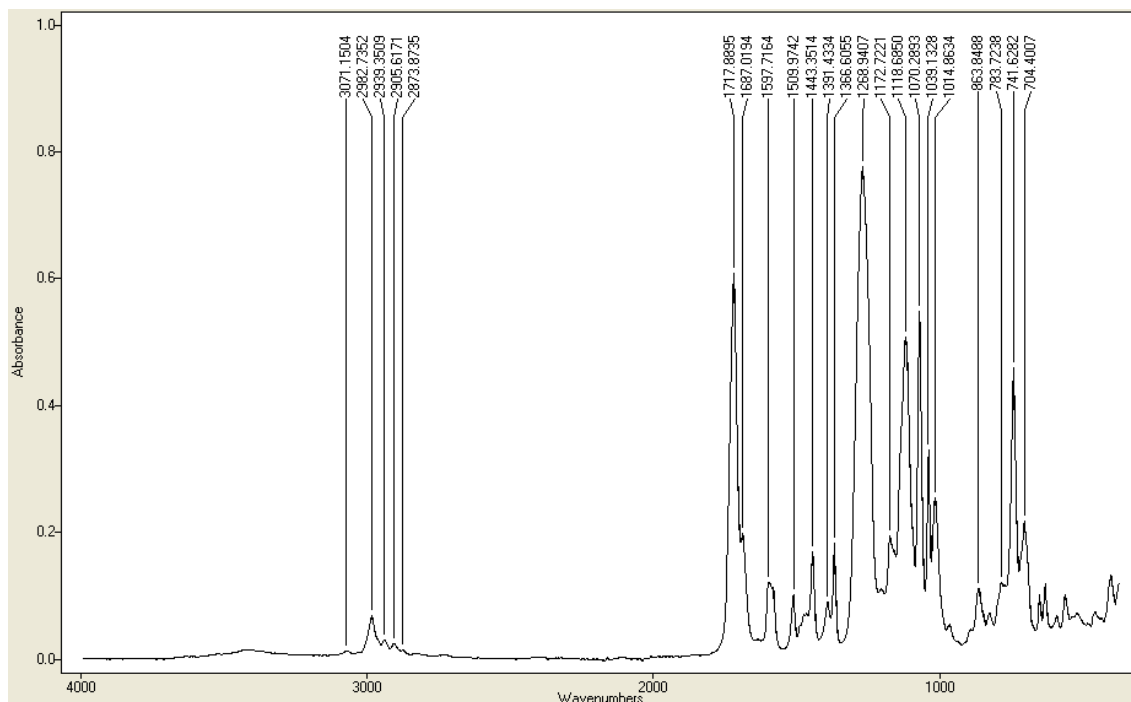
Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
1020,6670	vC-O
1054,2672	vC-O
1108,5238	vC-O
1187,5987	vC-O
1236,4335	vC-O
1363,1310	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1454,2714	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1734,1025	vC=O
2878,5508	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2953,9842	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3009,8635	vC-H sp <sup>2</sup>



**Figura 132-Espetro do perfume Sensatel.**

**Tabela 94-Tabela de correlação do perfume Sensatel.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
699,0075	δCH aromático monosubstituído
747,8327	δCH aromático monosubstituído
1046,0962	vC-O
1088,1919	vC-O
1120,5989	vC-O
1216,3116	vC-O
1245,9933	vC-O
1370,2758	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1454,5100	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1678,4761	vC=O
1730,8571	vC=O
1764,9536	vC=O
2721,6658	vC-H
2870,3799	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2930,6072	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2964,3172	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3066,2106	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>
3381,2217	vO-H



**Figura 133-Espetro do perfume Vanilla.**

**Tabela 95-Tabela de correlação do perfume Vanilla.**

Nº onda (cm <sup>-1</sup> )	Atribuição
741,5995	δCH aromático
1014,8252	vC-O
1039,1328	vC-O
1070,2798	vC-O
1118,5895	vC-O
1172,7603	vC-O
1268,8835	vC-O
1366,6055	δCH <sub>2</sub> “oscilação”
1443,3323	δCH <sub>2</sub> “tesoura”
1509,8692	vC=C
1597,7355	vC=C
1686,8857	vC=O
1717,8609	vC=O
2874,2458	vC-H simétrico sp <sup>3</sup>
2905,1685	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2938,8068	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
2982,7638	vC-H assimétrico sp <sup>3</sup>
3070,9452	vC-H aromático/sp <sup>2</sup>