

## UM ESPECTROFOTÔMETRO ALTERNATIVO PARA ANÁLISES QUÍMICAS POR IMAGENS DIGITAIS

Igor E. R. Medeiros<sup>(1)</sup>, Vanderson F. Santos<sup>(1)</sup>, Cássio S. B. Maciel<sup>(1)</sup>, Nilciele N. Silva<sup>(1)</sup>, Billy G. B. da S. Peres<sup>(1)</sup>, Deborah M. Werlang<sup>(1)</sup>, Sergio R. B. Santos<sup>(1)</sup>.

1. IFPB, Av. Primeiro de Maio, 720 - Jaguaribe, João Pessoa-PB. Email: sergio.santos@ifpb.edu.br.

**Palavras-Chave:** Experimentação em Química, Dispositivos Móveis, Espectrometria.

### Introdução

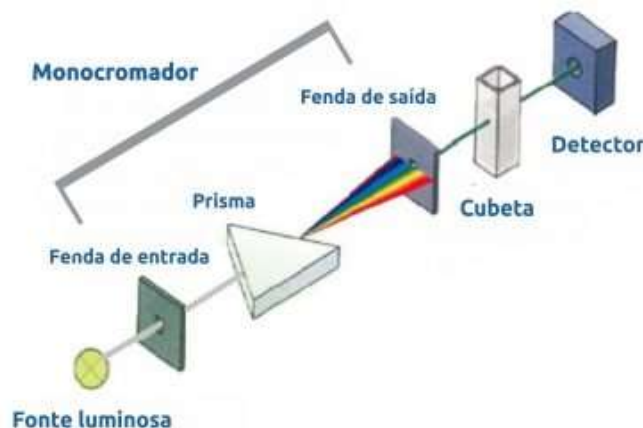
Métodos espectrométricos exploram a interação da radiação eletromagnética com a matéria para obter informações químicas sobre os materiais. Normalmente, na espectrofotometria na região do visível, determina-se a absorção da luz de um feixe que passa através de uma solução específica. A lei de Beer é uma lei que permite correlacionar as intensidades das absorções de radiação com a concentração das amostras em solução. Segundo a lei de Beer, a absorbância  $A$  (intensidade da absorção de radiação eletromagnética) é proporcional ao caminho óptico,  $b$ , ou seja, ao comprimento do caminho que a radiação percorre através da amostra, e da concentração da amostra,  $C$ . A constante de proporcionalidade,  $\epsilon$ , é denominada absortividade molar (intensidade da absorção por mol da amostra em uma cela de 1 cm de caminho óptico). Matematicamente temos que  $A = \epsilon \cdot b \cdot C$ . Esta relação é importante pois estabelece que o aumento da concentração implica em um aumento linear da absorbância.

Os instrumentos normalmente utilizados e que exploram a lei de Beer na análise de soluções são os fotocolorímetros ou espectrofotômetros. Estes instrumentos apresentam valores relativamente elevados para serem adquiridos, por exemplo, por escolas públicas, para a realização de atividades experimentais utilizando-se técnicas espectrométricas. Entretanto, utilizando-se materiais alternativos, é possível se construir instrumentos espectrométricos com baixo custo para serem utilizados em atividades acadêmicas com fins educacionais em escolas públicas de nível médio. Por exemplo, Marques e Cavalcanti (2021) construíram um espectroscópio alternativo, baseado no modelo de Bunsen, para avaliar raias espectrais de elementos químicos na chama. Sobre a importância das aulas experimentais de Química os autores pontuam que as mesmas “se tornam primordiais para a aprendizagem de uma área do conhecimento sabidamente experimental, facilitando a compreensão dos temas trabalhados em sala, além de permitir a construção do conhecimento de forma sistemática”. Segundo Oliveira e Leite (2015), “[...] o ensino da espectrofotometria no ensino médio pode, além de levar a experimentação às salas de aula, estimular o interesse dos estudantes pela química. O estudo desse tema também pode mostrar a utilização prática dos princípios de interação da luz com a matéria”. Neste sentido, eles propuseram a construção de um fotocolorímetro alternativo a base de LEDs como fonte de luz e LDR como detector para ser aplicado em aulas experimentais de Química de nível médio. O inconveniente do trabalho é que os LEDs devem ser substituídos para cada comprimento de onda de medida e os cálculos são realizados por uma planilha eletrônica após os procedimentos experimentais.

De uma forma geral, instrumentos espectrométricos necessitam de uma fonte de radiação policromática (que emitem vários comprimentos de onda), um dispositivo monocromador para selecionar o comprimento de onda de interesse, um recipiente para a

amostra, um detector de radiação e um dispositivo para apresentar os resultados da absorção de radiação pela amostra. A Figura 1 apresenta o esquema de um espectrofotômetro que apresenta um prisma como elemento dispersor da radiação visível.

Figura 1. Esquema geral de um espectrofotômetro que opera na região espectral visível.



Fonte: Martinez (2024).

Como pode ser verificado da Figura 1, o sistema monocromador exige óptica com lentes, fendas de entrada e de saída para selecionar o comprimento de onda de interesse, além de mecanismos para controlar a posição do dispositivo dispersor da radiação (no caso um prisma) e selecionar o comprimento de onda que emerge da fenda de saída. Além dos aspectos instrumentais, os espectrofotômetros necessitam de microprocessadores para transformar as informações de atenuação do sinal analítico devido às absorções, em medidas de absorvância que serão correlacionadas à concentração do analito. Esta complexidade de mecanismos torna o espectrofotômetro um instrumento de custo elevado, especialmente para escolas públicas.

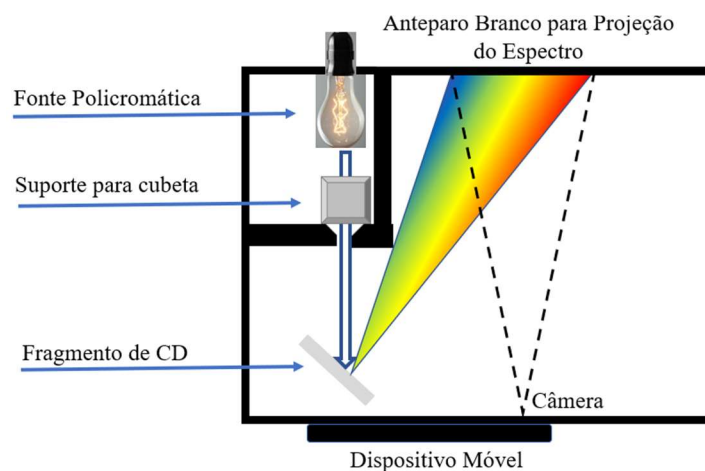
O objetivo deste trabalho foi desenvolver um espectrofotômetro de baixo custo para ser utilizado em aulas experimentais de Química em laboratórios ou em salas de aula de modo a contribuir para o processo de ensino-aprendizagem em escolas públicas. O instrumento proposto apresenta apenas LEDs brancos como fonte de radiação e um fragmento de CD como elemento dispersor da radiação. O espectro produzido pelo CD é projetado em um anteparo na parede do instrumento cuja imagem é capturada e tratada por um aplicativo de análises químicas por imagens digitais. Com esta configuração permite realizar medidas espectrais em pelo menos vinte regiões espectrais.

## Material e Métodos

O trabalho foi realizado de acordo com as seguintes etapas: 1. Elaborar um projeto para o espectrofotômetro alternativo; 2. Selecionar um aplicativo para tratamento de imagens digitais com fins químico-analíticos; 3. Construir o instrumento com base no projeto; 4. Aplicar o instrumento na análise de corantes alimentícios; 5. Avaliar os resultados.

A Figura 2 apresenta o projeto elaborado para o espectrofotômetro alternativo onde se pode verificar a sua simplicidade de construção. Toda a complexidade instrumental se encontra no dispositivo móvel e no aplicativo de análises de imagens facilmente adquirido.

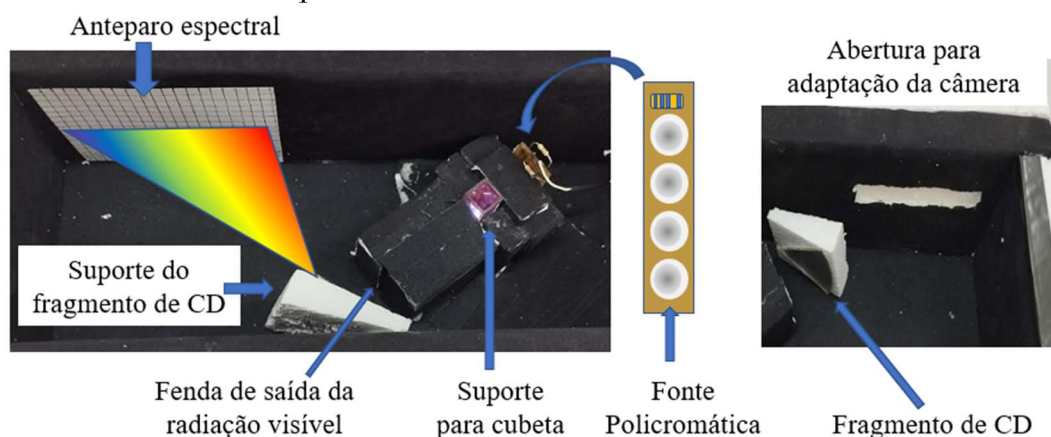
Figura 2. Projeto do Espectrofotômetro Alternativo.



Fonte: autores (2024).

A Figura 3 apresenta o espectrofotômetro desenvolvido com detalhes do projeto da fonte de radiação policromática com quatro (4) LEDs brancos. Para a construção da caixa do instrumento foi utilizada folha de isopor número 20 e papel camurça para cobertura interna com objetivo de minimizar a radiação espúria vinda do ambiente. Como fonte de radiação foram utilizados quatro LEDs brancos adaptados em uma placa de circuito impresso e cuja corrente foi limitada por dois resistores em paralelo de  $1K\Omega$ . Foi utilizada uma fonte de alimentação de celular de  $5V\Omega$  o que produz uma corrente elétrica nos LEDs de aproximadamente  $5mA$ .

Figura 3. Visão interna do espectrofotômetro alternativo construído.



Fonte: autores (2024).

A Figura 4 apresenta a visão do espectro projetado no anteparo e captado pela câmera do celular e que foi dividido em pequenos quadrados para melhor localizar o comprimento de onda de interesse no momento das medidas analíticas. Para registro espectral foi utilizado o aplicativo de análises químicas *ChemEye*, desenvolvido pela Universidade Batista de Hong Kong para transformar o celular em um colorímetro móvel.

O aplicativo *ChemEye* pode ser baixado nas plataformas *Google Play* ou *Apple Store* de forma livre. Ele foi selecionado entre os aplicativos de cor existentes pois foi desenvolvido para aplicações analíticas por imagens digitais.

Figura 4. Visão frontal do espectrofotômetro alternativo e do espectro captado pelo celular.

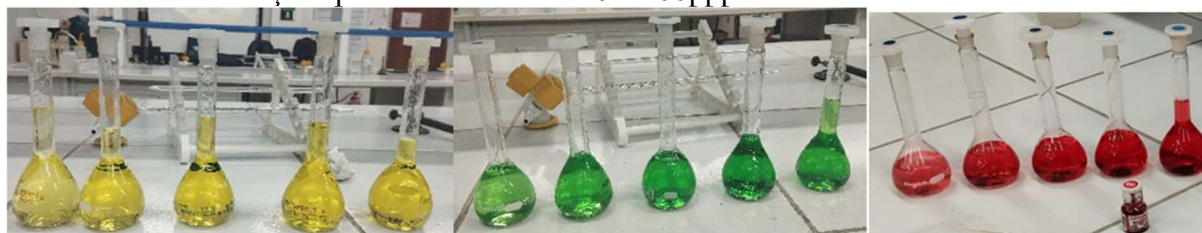


Fonte: autores (2024).

Entre as funcionalidades do aplicativo *ChemEye*, é possível a seleção de medidas entre absorbância e transmitância, do tipo de unidades de concentração a ser utilizada, a correção de dados incorretos, ou por digitações errôneas ou por aquisição de imagens inadequadas para análise, além de apresentar curvas analíticas para três parâmetros do sistema RGB e salvamento da melhor curva obtida. Após salvamento das curvas obtidas a partir de soluções padrão, o aplicativo permite capturar as imagens das amostras com concentração desconhecida e apresenta o resultado da análise com base nas curvas salvas.

Para avaliar o espectrofotômetro alternativo, soluções padrão de corantes alimentícios amarelo damasco, verde folha e vermelho natal na faixa de concentrações de 20 a 100ppm foram analisadas e aplicadas na determinação da concentração de amostras sintéticas destes corantes. A Figura 5 apresenta as soluções de corantes preparadas e utilizadas nas análises utilizando-se o espectrofotômetro alternativo.

Figura 5. Soluções de corantes alimentícios amarelo damasco, verde folha e vermelho natal utilizadas como soluções padrão na faixa de 20 a 100ppm.



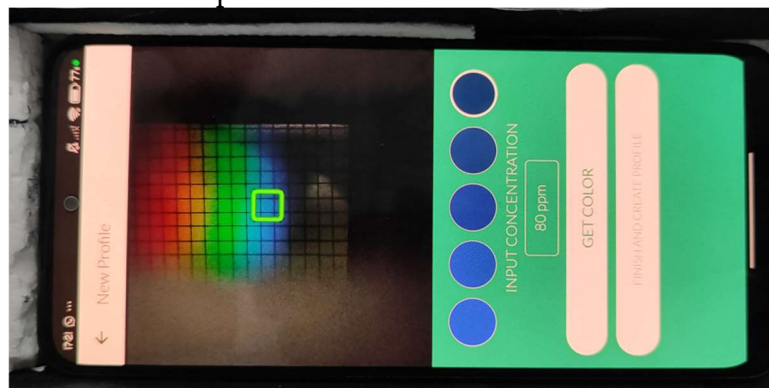
Fonte: autores (2024).

Estas soluções foram selecionadas pois exploram absorção de radiação nas principais regiões espectrais, especificamente as regiões azul, verde e vermelha. O corante amarelo damasco absorve comprimentos de onda da região azul do espectro. O corante verde folha absorve comprimentos de onda da região espectral vermelha enquanto o corante vermelho natal absorve comprimentos de onda da região espectral verde.

## Resultados e Discussão

A Figura 6 apresenta a sequência de imagens capturadas para análises do corante amarelo damasco. As medidas foram registradas para a região espectral azul. A sequência de registros de cores apresentado corresponde às concentrações 0 (branco), 20, 40, 60 e 80ppm do corante, respectivamente. Pode-se verificar a diminuição da luminosidade das imagens devido à absorção de radiação azul pelo corante.

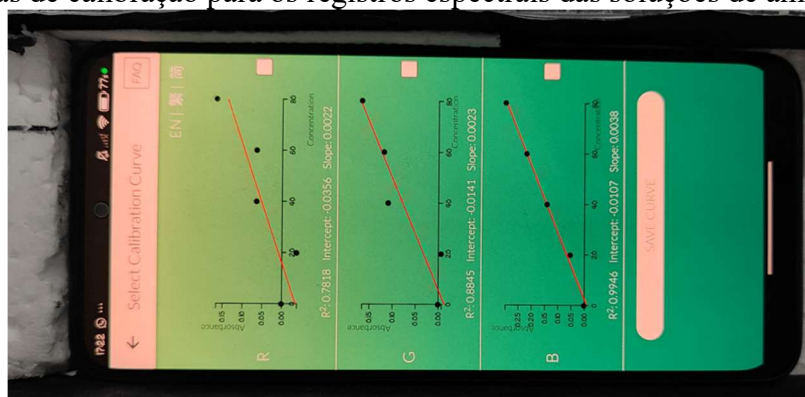
Figura 6. Registros de imagens da região espectral azul quando se introduz soluções do corante amarelo damasco na cubeta do espectrofotômetro alternativo.



Fonte: autores (2024)

A Figura 7 apresenta o resultado das análises baseadas nos registros espectrais produzidos pelo uso do aplicativo *ChemEye* no espectrofotômetro alternativo. São apresentadas três curvas analíticas, baseadas na decomposição da imagem nos três parâmetros do sistema RGB.

Figura 7. Curvas de calibração para os registros espectrais das soluções de amarelo damasco.



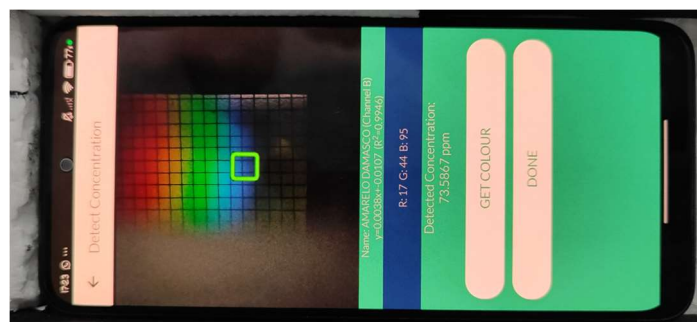
Fonte: autores (2024)

Como esperado, as curvas relativas às cores vermelha e verde não produziram curvas de calibração adequadas enquanto a curva construída para absorções de radiação na região espectral azul apresentou um bom comportamento com coeficiente de correlação  $r = 0,997$ . A curva apresentou coeficiente de correlação linear de  $-0,0107$ , próximo de zero, o que é esperado para soluções que se comportam segundo lei de Beer. As medidas também sugerem que a luminosidade e o anteparo utilizados para os registros espectrais são adequados.

Finalizada a calibração, a curva analítica foi salva e pôde ser utilizada para análises de amostras. No caso do corante amarelo damasco, uma amostra sintética com concentração de 70ppm foi preparada e avaliada segundo o modelo de calibração obtido. Como pode ser verificado na Figura 8, um resultado de 73,6ppm foi obtido, produzindo 5,1% no resultado da análise.

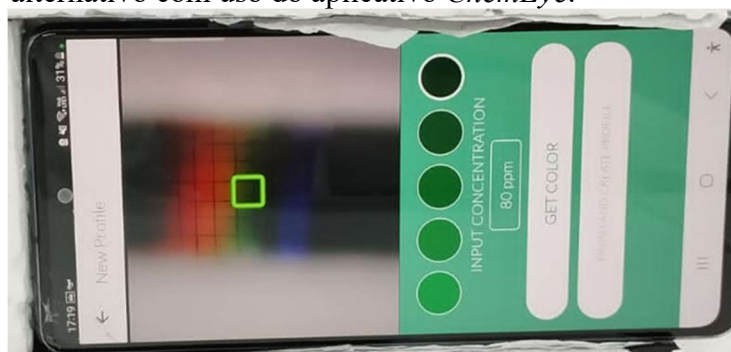
Uma análise semelhante foi realizada para o corante vermelho natal cujos registros de imagens foram realizados para a região espectral verde, como apresentado na Figura 9. Assim como verificado para as soluções do amarelo damasco, uma queda na intensidade da radiação espectral verde foi verificada com o aumento da concentração do corante vermelho natal que absorve nesta região espectral.

Figura 8. Resultado da análise da solução de amostra sintética de concentração 70ppm apresentado pelo espectrofotômetro alternativo. O resultado de 73,6ppm indica um erro de 5,1%.



Fonte: Autores (2024).

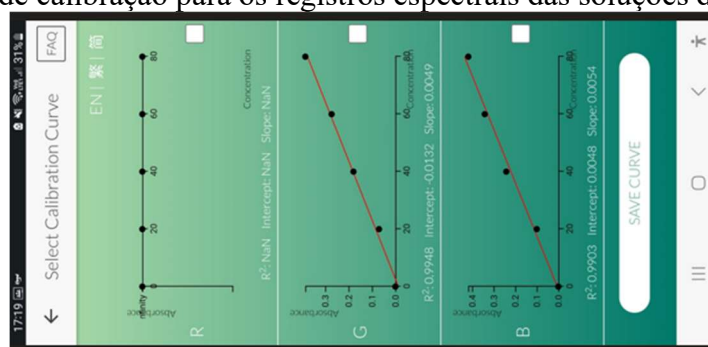
Figura 9. Queda na intensidade da radiação da região espectral verde registrada no espectrofotômetro alternativo com uso do aplicativo *ChemEye*.



Fonte: autores (2024).

Com base nos registros indicados na Figura 9, as curvas de calibração foram construídas e apresentadas como indicado na Figura 10. Novamente, três curvas são elaboradas baseadas em parâmetros do sistema RGB de cores. Como se pode verificar da Figura 10, apenas a curva baseada no valor de G apresentou um comportamento linear adequado, com valor de coeficiente de correlação linear  $r=0,997$ .

Figura 10. Curvas de calibração para os registros espectrais das soluções de vermelho natal.



Fonte: autores (2024).

Após o salvamento do modelo, o mesmo foi utilizado na avaliação de uma amostra sintética de vermelho natal com concentração de 80 ppm. O valor com o uso de espectrofotômetro alternativo foi de 81,9, como apresentado na Figura 11. Este resultado equivale a um erro de determinação de apenas 2,1%, demonstrando a exatidão possível de ser alcançada com o instrumento.

Figura 11. Resultado apresentado pelo espectrofotômetro alternativo para a análise de uma amostra sintética do corante vermelho natal 80ppm com erro de apenas 2,1%.



Fonte: autor (2024).

Para finalizar, a Figura 12 apresenta os registros espectrais das absorções de radiação vermelha pelas soluções de corante verde folha. Observa-se que a intensidade da cor da imagem para a região espectral vermelha diminui com o aumento da concentração do corante, como esperado. O segundo círculo (de baixo para cima) da imagem corresponde à concentração de 80 ppm e o último à concentração de 60ppm.

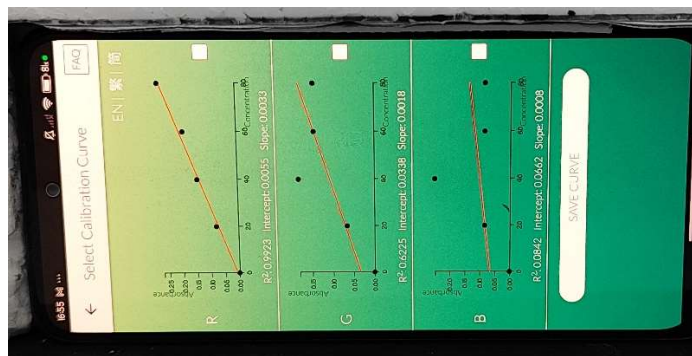
Figura 12. Registros de imagens da região espectral vermelha quando se introduz soluções do corante verde folha na cubeta do espectrofotômetro alternativo.



Fonte: autores (2024).

A partir dos registros espectrais da Figura 12, curvas de calibração construídas pela decomposição da imagem em parâmetros do sistema RGB, produziram as curvas analíticas apresentadas na Figura 13 que indicam um ajuste dos dados experimentais mais preciso para o parâmetro de cor G. Para este, a curva de calibração apresentou um coeficiente de correlação linear  $r=0,996$  com intersecção na origem em 0,005, muito próximo de zero, como esperado para soluções que se comportam segundo a lei de Beer.

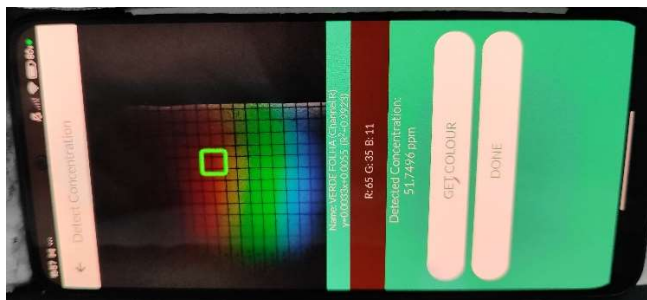
Figura 13. Curvas de calibração obtidas na análise de soluções de verde folha com o espectrofotômetro alternativo.



Fonte: autores (2024).

A aplicação destas curvas para a análise de uma solução sintética de corante verde folha de concentração 50ppm forneceu uma resposta analítica de 51,7ppm como mostra a Figura 14, produzindo um erro percentual de 3,4%.

Figura 14. Resposta analítica para a avaliação de uma amostra sintética do corante verde folha de concentração 50ppm.



Fonte: autores (2024).

De acordo com os resultados obtidos, pode-se afirmar que o espectrofotômetro alternativo mostrou ser uma ferramenta interessante para uso em aulas experimentais de Química em escolas públicas devido à facilidade de construção e à aplicabilidade possível em aulas experimentais de Química.

## Conclusões

Um espectrofotômetro alternativo e de baixo custo foi construído para ser utilizado no ensino de Química experimental em escolas públicas. O instrumento realiza as análises químicas por imagens digitais capturadas por um aparelho celular. Ele apresenta como fonte de radiação policromática quatro LEDs brancos e como elemento de dispersão da radiação um fragmento de CD. O espectro produzido pelo elemento dispersor é projetado em um anteparo branco e as imagens geradas são digitalizadas pelo aplicativo *ChemEye* de análises colorimétricas. Soluções de corantes alimentícios amarelo damasco, vermelho natal e verde folha foram analisadas na faixa de concentrações de 20 a 100ppm utilizando-se o espectrofotômetro alternativo com bons resultados. Erros inferiores a 5% foram obtidos e as curvas analíticas apresentaram coeficientes de correlação linear superiores a 0,996. Pela simplicidade de construção, fácil manuseio e qualidade dos resultados obtidos, é possível afirmar que o espectrofotômetro alternativo que realiza análises por imagens digitais pode ser utilizado em aulas práticas explorando análises espectrométricas de forma simples e rápida em escolas públicas de nível médio.

## Referências

- MARQUES, A. V. L., CAVALCANTI, H. L. B. Construção de um Espectroscópio Alternativo para o Ensino do Modelo Atômico de Bohr e Linhas Espectrais de Elementos Químicos. *Química Nova na Escola*, 44(1), 4-8, 2022.
- MARTINEZ, M. Espectrofotômetro. Artigo acessado em 10 de setembro de 2024. Endereço eletrônico: <https://www.infoescola.com/materiais-de-laboratorio/espectrofotometro/>.
- OLIVEIRA P. C. C., LEITE, M. A. P. Espectrofotometria no Ensino Médio: Construção de Um Fotômetro de Baixo Custo e Fácil Aquisição. *Química Nova na Escola*, 38(2), 181-184, 2016.