

## Caracterização de fosfatos naturais nacionais pela técnica de espectroscopia na região do infravermelho médio por reflexão total atenuada<sup>(1)</sup>

Ágatha Ayra Araújo Borges<sup>(2)</sup>, Etelvino Henrique Novotny<sup>(3)</sup>, Jéssica Franciele Kaminski Ramos<sup>(2)</sup>, Vinicius de Melo Benites<sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup> Trabalho realizado com apoio da Anton Paar, do Engenheiro Químico Waldinei Teodoro, do CNPq (bolsa 307694/2023-2), da FAPERJ (E-26/200.470/2023) e do FNDCT/FINEP (Convênio 01.22.0080.00, Ref. Finep 1219/21). <sup>(2)</sup> Bolsista, Embrapa Solos, Rio de Janeiro, RJ. <sup>(3)</sup> Pesquisador, Embrapa Solos, Rio de Janeiro, RJ.

**Resumo** — Fosfatos naturais são uma fonte de baixo custo que podem ser utilizadas na recuperação de solos ácidos tropicais. Contudo, a viabilidade do uso dessas fontes depende de características químicas e mineralógicas que permitam sua rápida solubilização e disponibilização do fósforo nos sistemas agrícolas. Uma forma de caracterização rápida desses materiais são as técnicas espectroscópicas, entre essas, a espectroscopia vibracional. A obtenção de espectros na região do infravermelho médio (IR) no modo ATR apresenta como grande vantagem dispensar o extensivo preparo da amostra. Porém, a amostra a ser analisada precisa ter um índice de refração menor que o cristal da célula de ATR. Testou-se dois cristais, Germânio e diamante, o primeiro apresenta o maior índice de refração, 4,01 contra 2,4 do diamante, porém há uma relação inversa entre os índices de refração e a profundidade de penetração da onda evanescente, que efetivamente interage com a amostra e produz o espectro. Por exemplo, uma amostra com índice de refração de 1,5 (comum para fosfatos naturais), a  $1000\text{ cm}^{-1}$  incidindo a  $45^\circ$  (ângulo de incidência do equipamento utilizado: Anton Paar Lyza 7000 com célula Iris ATR da Pike), tem uma profundidade amostrada de  $2\ \mu\text{m}$  utilizando cristal de diamante e apenas  $0,66\ \mu\text{m}$  com o cristal de germânio. Foram estudadas 19 amostras de diferentes fosfatos naturais nacionais e os espectros foram correlacionados com outras características químicas e mineralógicas desses materiais. Visto que a absorvância é proporcional à concentração da espécie responsável pela banda de IR, modelos multivariados, relacionando os espectros de IR com valores de referência foram elaborados e avaliados de acordo com as principais figuras de mérito. Para  $P_{\text{total}}$  e cristal de diamante, com apenas uma variável latente obteve-se um excelente modelo com  $R^2_{\text{v}}$ : 0,94; RMSEP: 3,03; SEP: 3,07; seletividade: 0,15, sensibilidade analítica de 473,67 e RER de 15, classificando o modelo como excelente para quantificação.

**Termos para indexação:** espectroscopia vibracional, p total, pls, mid-ftir, fosfatos naturais.