ESTUDO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E VIBRACIONAIS DO COMPOSTO 2-ISOPROPIL-5-METIL-FENOL POR ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO E CÁLCULOS COMPUTACIONAIS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS

BEATRIZ GONÇALVES CRUZ, MARIA NAIARA LOURENÇO GONÇALVES, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA,

Estudo das Propriedades estruturais e vibracionais do composto 2-isopropil-5-metil-fenol por espectroscopia de infravermelho e cálculos computacionais de primeiros princípios.

PALAVRAS-CHAVE: SUBSTANCIA TIMOL, ESPECTRO DE INFRAVERMELHO, CÁLCULOS COMPUTACIONAIS E VIBRAÇÕES MOLECULARES

ÀREA TEMÁTICA: CIÊNCIAS BIOLÓGICAS (PESQUISA)

FORMA DE APRESENTAÇÃO: RELATO DE EXPERIÊNCIA