

ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DO 2-ISOPROPIL-5-METIL-FENOL

MARIA NAIARA LOURENÇO GONÇALVES, BEATRIZ GONÇALVES CRUZ, DINIZ MACIEL DE SENA JUNIOR, RAYLANE NOGUEIRA SANTOS, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA

O 2-isopropil-5-metil-fenol, também conhecido como Timol apresenta-se em forma de cristais grandes translúcidos, incolores ou brancos naturalmente encontrados em óleos essenciais de algumas plantas, como Tomilho (*Thymus vulgaris*) e Alecrim Pimenta (*Lippia sidoides*). O timol apresenta efeito inibitório contra *Pseudomonas aeruginosa* e *Staphylococcus aureus* indicando a aplicação dessa substância como conservante de alimento. Nesse trabalho foi realizado um estudo por espectroscopia Raman e Infravermelho, para identificar a intensidade das bandas vibracionais. O espectro Raman foi coletado com um espectrômetro Bruker RFS100/S FTR, a análise do Espectro FT-IR foi realizada no equipamento Agilent Technologies Cary 600 series FT-IR spectrometer. Os espectros de FT-IR e Raman de amostras policristalina do Timol foram registrados à temperatura ambiente nas regiões 400 cm^{-1} a 4000 cm^{-1} e 50 cm^{-1} a 4000 cm^{-1} , respectivamente. Foi utilizado o programa Gaussian para a realização dos cálculos da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e as atribuições das vibrações moleculares usando a Distribuição de Energia Potencial (PED%), calculadas usando o programa Veda. O composto $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}$ possui 25 átomos e foram obtidas 43 e 37 frequências experimentais para os espectros Raman e Infravermelho, respectivamente. No espectro Raman foi observada uma banda muito forte com número de onda de 68 cm^{-1} que corresponde a uma torção (?) dos grupos CC. A banda mais intensa no espectro infravermelho observada em 806 cm^{-1} corresponde a uma torção (?) do $\text{HC}_6\text{C}_2\text{C}_1$. As frequências calculadas quando ajustadas pelo fator de escala 0,9398 estão em boa concordância com aquelas obtidas experimentalmente. Essa concordância possibilitou a atribuição completa das bandas Raman e Infravermelho juntamente com o (PED%) para cada modo normal de vibração do composto 2-isopropil-5-metil-fenol.

PALAVRAS-CHAVE: CÁLCULOS DFT, ESPECTROSCOPIA, TIMOL

ÁREA TEMÁTICA: FÍSICA

FORMA DE APRESENTAÇÃO: PÔSTER