

## **CLASSIFICAÇÃO DOS MODOS NORMAIS DE VIBRAÇÃO DO COMPOSTO LIMONENO**

MARIA REGIVANIA XAVIER, IGOR KLEBER CAMPOS LIMA, BEATRIZ GONÇALVES CRUZ, MARIA NAIARA LOURENÇO  
GONÇALVES, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA

O limoneno de nomenclatura 1-metil-4-isopropenilciclohex-1-eno trata-se de um terpeno monocíclico de fórmula molecular C<sub>10</sub>H<sub>16</sub> encontrado principalmente em óleos essenciais de plantas cítricas. Apresenta alta atividade repelente, efeito antitumoral, antifúngico e antimicrobiano, utilizado como aromatizante de alimentos, solventes, cosméticos e perfumes. Neste trabalho foi realizado um estudo de espectroscopia vibracional do limoneno por cálculos computacionais usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). O programa Gaussian 03 empregando o método DFT com o funcional híbrido B3LYP e o conjunto de base 6-31G (d,p) permitiu calcular as frequências vibracionais e obter o espectro teórico infravermelho deste composto. O espectro teórico foi normalizado e classificado o quanto forte são as intensidades de suas bandas. Em adição, as vibrações moleculares foram analisadas em termos da distribuição de energia potencial, utilizando o programa VEDA. Na região de 60 cm<sup>-1</sup> a 1200 cm<sup>-1</sup> identificou-se as vibrações do tipo torção e as deformações do anel aromático. Foi possível observar uma localização acentuada dos modos CH<sub>3</sub>: as vibrações do tipo wagging do CH<sub>3</sub> são observadas entre 1300 cm<sup>-1</sup> a 1400 cm<sup>-1</sup> e as vibrações do tipo scissorig do CH<sub>3</sub> aparecem entre 1500 cm<sup>-1</sup> a 1600 cm<sup>-1</sup>. As bandas originadas a partir de estiramento dos grupos funcionais CH e CH<sub>3</sub> são observadas nas regiões entre 2800 cm<sup>-1</sup> a 3200 cm<sup>-1</sup>.

**PALAVRAS-CHAVE:** LIMONENO; CÁLCULOS DFT; CLASSIFICAÇÃO VIBRACIONAL

**ÁREA TEMÁTICA:** BIOLOGIA MOLECULAR

**FORMA DE APRESENTAÇÃO:** PÔSTER