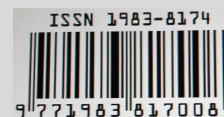


V SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXIII Semana de Iniciação Científica

07 a 11 de Dezembro de 2020

Tema: "Os impactos e desafios da pandemia COVID no ensino, pesquisa e extensão"



Investigação das potencialidades de uso de softwares de física e química molecular para obtenção de dados de propriedades estruturais e espectroscópicas

Filipe Dantas de Souza¹, Igor Kleber Campos Lima², Alexandre Magno Rodrigues Teixeira³, Hércio S. dos Santos⁴

Resumo: O uso de softwares de química molecular para obtenção de dados de propriedades estruturais, espectroscópicas e para obtenção de parâmetros químicos vem sendo cada vez mais utilizados em várias áreas do conhecimento, em particular na Física, Química, Biologia e Engenharia dos Materiais. Os métodos *ab initio* também denominado de primeiros princípios, descreve de maneira rigorosa a natureza quântica dos elétrons. As pesquisas a serem desenvolvidas no desenvolvimento deste projeto estão relacionadas a investigação das potencialidades de uso de softwares de física e química molecular para obtenção de dados de propriedades estruturais, espectroscópicas e de parâmetros químicos de compostos orgânicos. Neste trabalho faremos uso dos softwares *Gaussian 09*, *Gaussview 05* e *Chemcraft* para investigar as os espectros característicos de óleos essenciais das folhas e frutos verdes de *Schinus terebenthifolius* Raddi, popularmente conhecida como aroeira da praia. O monoterpeneo D-limoneno foi apresentado como o principal componente volátil das folhas com 96,6 %. Enquanto que os principais componentes do óleo essencial de frutas verdes de *Schinus terebenthifolius* foram identificados foram o D-Limoneno com 39,5 % e o Terpinen-4-ol com 31,1 %. Os espectros experimentais ATR-FTIR dos óleos essenciais de *Schinus terebenthifolius* e os espectros calculados de absorção no infravermelho de seus constituintes químicos foram devidamente comparados. Este procedimento permitiu a atribuição completa dos modos vibracionais para estes óleos essenciais.

Palavras-chave: Gaussian 09, Gaussview 05, Chemcraft.

Agradecimento: Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq pelo concessão da bolsa de Iniciação Científica.

¹ Universidade Regional do Cariri, email: filipe.sousa@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: igor16kleber@gmail.com

³ Universidade Regional do Cariri, email: alexandre.teixeira@urca.br

⁴ Universidade Estadual Vale do Acaraú, email: helciodossantos@gmail.com

V SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXIII Semana de Iniciação Científica

07 a 11 de Dezembro de 2020

*Tema: "Os impactos e desafios da pandemia COVID no ensino,
pesquisa e extensão"*

ISSN 1983-8174



9 771983 817008