



# ESTRUTURA DA MATÉRIA E FÍSICA



## COMPUTACIONAL

### Seminário de Grupo

---

## *Espectroscopia Raman em Óleos Essenciais e Cálculo de Primeiros Princípios*

---

Prof. Quesle da Silva Martins

Departamento de Física - UNIR

**Resumo:** A espectroscopia Raman é uma técnica de caracterização desenvolvida pelo físico indiano Chandrasekhara Venkata Raman, premiado com o Nobel de Física em 1930. O efeito Raman consiste em descrever a interação de uma onda eletromagnética monocromática sobre uma amostra, com a finalidade de identificar os grupos vibracionais mais abundantes do material em estudo. A espectroscopia Raman torna-se uma técnica eficiente por não exigir uma preparação tão rigorosa no material em estudo, assim, podendo ser aplicado ao estudo de óleos essenciais. Os óleos essenciais têm despertado o interesse da indústria de alimentos (entre outras), pelas atividades antioxidante e antimicrobiano que tem demonstrado. Timol, carvacrol e eugenol são exemplos de componentes dos óleos essenciais de várias especiarias. A produção e a composição do óleo essencial pela planta dependem, dentre outros fatores, da interação planta-ambiente na qual está inserida, época de colheita, fenofase e estágio fisiológico do vegetal. O espectro obtido após o procedimento experimental é comparado com teoria DFT para moléculas orgânicas e assim apresentando as assinaturas vibracionais dos principais grupos funcionais, dessa forma, sugerindo uma metodologia simples para qualificar as proporções desses componentes na composição do óleo e suas possíveis aplicações.

13 de setembro de 2016, terça-feira, 10 h

Laboratório Didático de Física e Química do  
Departamento de Física de Ji-Paraná - UNIR