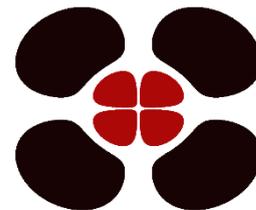




ESTRUTURA DA MATÉRIA E FÍSICA COMPUTACIONAL



Seminário de Grupo

Espectroscopia Raman do comportamento Térmico de Óleo de Castanha

Quesle da Silva Martins

Departamento de Física - UNIR

Resumo: Neste estudo, foram coletados espectros Raman (RS) do óleo de castanha-do-pará (BNO) através de um processo de fritura em temperaturas variando de 50 °C a 250 °C, e do ácido oleico (OA) em temperatura ambiente para comparação de seus respectivos valores vibracionais. bandas. Frequências Raman teóricas e escalonadas da molécula OA também foram obtidas. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foi empregada usando o conjunto de bases do orbital tipo gaussiano 6-311G+(d,p) e o parâmetro B3LYP. Resultados experimentais revelam mudanças sutis nos espectros do BNO a partir de 210 °C, caracterizadas principalmente pela perda de intensidade e alargamento de certas bandas, como aquelas observadas em 1746 cm⁻¹, 2726 cm⁻¹ e 3012 cm⁻¹. Em temperaturas em torno de 230 °C a 250 °C, o BNO sofre degradação térmica avançada. Os dados de ajuste linear demonstram uma relação linear entre o sinal Raman e o aumento de temperatura, particularmente notável para os picos em 2726 cm⁻¹ e 3012 cm⁻¹, com valores R^2 de 0,999 e 0,977, respectivamente. O método DFT mostrou-se útil na previsão dos espectros do ácido oleico, e os modos vibracionais tanto para o BNO quanto para o ácido oleico foram atribuídos com a ajuda de dados VEDA.

23 de fevereiro de 2024, sexta-feira, 14 h

Miniauditório do Campus de Ji-Paraná - UNIR