

CHAMADA FAPERÓ PBIC/PBIT No. 009/2022

PLANO DE TRABALHO 1

PLANO DE TRABALHO 1

TÍTULO PLANO DE TRABALHO: Aplicando o método DFT na análise vibracional e conformacional de ácidos graxos

TÍTULO DO PROJETO: Cálculos *ab-initio* via método DFT: análise espectral vibracional e conformacional de ácidos graxos

Coordenador: Quesle da Silva Martins

Área: Ciências exatas e da Terra

Área de concentração: Física da matéria condensada

Faixa de enquadramento: PBIC

Instituição executora: Fundação Universidade Federal de Rondônia - UNIR

1. INTRODUÇÃO

Na caracterização por espectroscopia Raman ou no Infravermelho, o estudo se baseia em verificar de imediato os modos vibracionais das moléculas na análise. Assim podemos obter respostas gráficas de forma qualitativa [1-3]. Com esse procedimento se pode indicar a presença de grupos carboxílicos ligados a ácidos graxos.

Nesse contexto é apropriado o uso de cálculos *ab initio*. O método é apropriado em análises de sistemas moleculares com muitos elétrons, o que seria impraticável de forma analítica devido ao grande número de elementos interagentes. Sob esse contexto, o método DFT (Density Functional Theory) é empregado na análise conformacional de grupos moléculas de interesse [5-9]. A análise conformacional, é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos, o que indica saber as características primárias numa análise vibracional.

Tal versatilidade possibilita o estudo teórico-computacional de ácidos graxos. A rotina empregada para o método em questão, possibilitará a formação básica no estudo dos espectros vibracionais gerados, incorporando assim, todo campo da espectroscopia vibracional e também a análise conformacional, que é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido

pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos possibilitando a correta interpretação de resultados experimentais. Além disso, têm-se: Etapa de análise qualitativa da identificação da(s) amostra(s), suas principais características físico-químicas e contextos potenciais de aplicações futuras; Identificação de componentes majoritários de amostras estudadas com base no tema central do projeto; Cálculos computacionais sob o método DFT; e análise conformacional vibracional via DFT de estruturas obtidas.

A compreensão de técnicas computacionais (e experimentais) proporciona uma interação interdisciplinar entre cursos das ciências exatas, assim, podendo ser estudada de forma paralela em áreas correlatas visando diversas aplicações.

2. OBJETIVO(S)

Geral:

→ O desenvolver habilidades e domínio na aplicação do método DFT na investigação vibracional de grupos moleculares e conhecer teorias relacionadas, seu desenvolvimento, importância e aplicações na Física e ciências em geral.

Específicos:

→ Estudar fundamentos básicos do método DFT, aplicações, tecnologias associadas e cálculos *ab initio* e sobre a natureza da espectroscopia (espectroscopia Raman e no Infravermelho);

→ Obter análises conformacionais dos grupos moleculares compreendidos no âmbito da pesquisa;

→ Contribuir para a formação científica, profissional e pessoal do educando;

→ Incorporar na rotina do aluno de graduação conceitos da pesquisa científica, como a leitura de artigos científicos, revistas especializadas, *softwares* etc;

3. METODOLOGIA

As atividades ocorrerão no Laboratório de Física Aplicada do DEFIJI, no Laboratório do Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional e, quando necessário, por videoconferência.

As atividades se baseiam em preparar o bolsista para a instrução específica ao qual ele deverá executar ao longo do período de projeto, conceituando as teorias, os fundamentos básicos para a pesquisa, fundamentos de cálculos *ab initio*, método DFT, composição e estruturas moleculares. Verificação de escrita através de relatórios diários de atividades e apresentação.

Verificação de escrita através de relatórios diários de atividades e apresentação de seminários, dando-lhe suporte para seguir as atividades do cronograma sem impedimentos, minimizando as dificuldades encontradas.

Sanadas as lacunas iniciais na preparação específica para cada caso, o bolsista seguirá à constituição de sua responsabilidade no projeto de pesquisa, seguindo as etapas conforme indicada em cronograma estabelecido.

4. CRONOGRAMA DAS AÇÕES A SEREM DESENVOLVIDAS

Tabela 1. Cronograma geral de atividades do plano de trabalho 1.

Edital/Chamada FAPERRO PBIC/PBIT N°. 003/2022 (ID 0030489437)												
Atividades	Mês											
	1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	8°	9°	10°	11°	12°
Introdução bibliográfica/método científico	X	X										
Cálculos ab-initio/método DFT	X	X	X	X	X							
Conhecendo recursos de máquina/ <i>softwares</i>		X	X	X	X							
Aplicações análise conformacional			X	X	X	X						
Estruturas e moléculas/ácidos graxos/arquivos executáveis			X	X	X	X						
Simulação/modelagem/recursos computacionais					X	X	X	X	X			
Resultados/análise vibracional/conformacional						X	X	X	X	X		
Resultados/análise do método						X	X	X	X	X		
Resultados/divulgação científica/seminários/relatórios/artigos/resumos etc									X	X	X	X

