

CHAMADA Nº 009/2022

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

Ciências exatas e da Terra

**Quesle da Silva Martins**

Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional  
<http://www.emfc.unir.br/>

---

## 1. IDENTIFICAÇÃO DA PROPOSTA

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

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

Coordenador: Quesle da Silva Martins

Endereço profissional: Rua Rio Amazonas, 351, Jardim Dos Migrantes, Ji-Paraná - RO, 78960-000 (campus Ji-Paraná)

Endereço residencial: Rua Raimundo Rufino Machado, 2033, Ji-Paraná - RO, 76906-380

e-mail: [quesle.martins@unir.br](mailto:quesle.martins@unir.br)

Tel: (65) 98465-8150 / (65)992500540

---

Lattes: <http://buscatextual.cnpq.br/buscatextual/visualizacv.do?id=K4418025D6>

Orcid: <https://orcid.org/0000-0002-1315-2164>

## 2. RESUMO DO PROJETO E PALAVRAS-CHAVE

---

Este trabalho enfatiza o estudo cálculos *ab-initio* por meio do método DFT no processo de caracterização de grupos moleculares (ácidos graxos). Os ácidos graxos são formados por cadeias hidrocarbonadas de comprimento variando de 4 a 36 carbonos. Com um radical carboxílico, estes também podem ser chamados de ácidos carboxílicos, podendo ser diferenciados, pela presença de insaturações, isto é, uma ou mais ligações duplas (ligações C=C). Óleos como de copaíba, castanha-do-brasil etc, são amplamente citados por suas associações com esses compostos. Cálculos *ab initio* são métodos da química computacional baseados na química quântica. São utilizados para resolver a equação de Schrödinger para muitos corpos (moléculas). O método DFT (Density Functional Theory) é o método *ab-initio* escolhido nessa proposta para estudo de ácidos graxos.

**Palavras Chave:** Cálculos *ab-initio*, método DFT, ácidos graxos, análise vibracional, análise conformacional.

### 3. QUALIFICAÇÃO DO PRINCIPAL PROBLEMA

---

Por meio da pesquisa, o conhecimento científico constitui-se de uma enorme gama de fatos verificados, ou verificáveis (GRESSLER, 2004).

Cálculos *ab initio* são métodos da química computacional baseados na química quântica. São utilizados para resolver a equação de Schrödinger para muitos corpos, uma vez que a solução analítica é impraticável. Numa abordagem moderna, o termo *ab-initio* pode ser encontrado como “primeiros princípios”(PARR, 1990; ALLEN, 1960; CHEN, 1955).

O método DFT (Density Functional Theory) é o método *ab-initio* escolhido nessa proposta. Esse método é amplamente utilizado em vários segmentos da pesquisa científica. Em mecânica quântica é utilizada para descrever propriedades eletrônicas na física do estado sólido, química quântica, ciência dos materiais e sistemas em escala atômica. Com uso da DFT, as propriedades de um sistema de muitos corpos (elétrons) pode ser determinado aplicando funções pré-definidas (funcionais) que recebem como argumento uma outra função, que detalha a densidade eletrônica do grupo investigado (MARTINS, 2020; FARIA, 2013; WU, 2012; FAZZIO, 2004; BECKE, 1993). Por não usarem parâmetros experimentais ou empíricos, os cálculos *ab-initio* apresentam grande impacto em ciência dos materiais por seu poder preditivo com um custo computacional praticável.

Tal versatilidade possibilita o estudo teórico-computacional de ácidos graxos. Os ácidos graxos são componentes abundantes em materiais de origem vegetal. Na região Amazônica, óleos de copaíba, andiroba, castanha-do-brasil, tucumã, buriti, babaçu etc, são amplamente citados por suas associações com esses compostos. 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, como no campo da espectroscopia vibracional (MARTINS, 2020; LARKIN, 2017; JAMROZ, 2013; FRISCH, 2009).

Assim, a primeira justificativa para tal iniciativa é promover conhecimento no uso de técnicas computacionais e na análise computacional de sistemas moleculares de muitos corpos através de cálculos *ab-initio*. Posteriormente, a diversificação em ciência aplicada na região norte, especificamente no estado de Rondônia, proporcionando o aperfeiçoamento técnico-científico local. Por fim, para a popularização da pesquisa científica através de técnicas computacionais de alta relevância e impacto no meio acadêmico, amplificando as áreas de atuação nas ciências exatas, física da matéria condensada e técnicas de análise vibracional.

## 4. OBJETIVOS

---

### 4.1 Geral

Conhecer, aplicar e difundir uso de cálculos *ab-initio* sob a utilização do método DFT.

### 4.2 Específicos

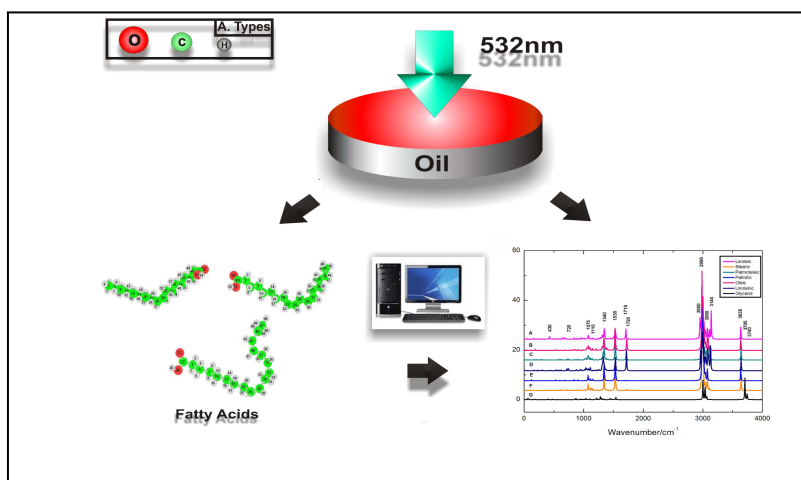
- Estudar teorias e aplicações de métodos computacionais;
- Estudar o método DFT;
- Estudar estruturas de grupo carboxílico (ácidos graxos);
- Desenvolver habilidades no estudo vibracional e conformacional de moléculas;
- Disseminar conhecimento científico através de técnicas computacionais.

## 5. METODOLOGIA

### 5.1 Materiais e métodos

O método DFT é um método computacional, utilizado na obtenção de informações físico-químicas de amostras de forma controlada. O DFT será útil na obtenção da otimização de estruturas atribuídas às amostras do estudo. Também é possível obter a energia harmônica e frequências vibracionais teóricas, e as condições essenciais da estrutura no estado de interesse (estado fundamental). Para refinar o processo de análise, o DFT exige que parâmetros sejam pré-estabelecidos, que se baseiam no tipo de estudo e característica da amostra. Nessa proposta, se fará uso da função híbrida (funcional) B3LYP, que representam três parâmetros (B3) usada para a troca de Lee-Yang-Parr (LYP) e parte de correlação funcional (um funcional correlação que tem termos locais e não locais) como parâmetro principal. A função de correlação LYP é aceita como a abordagem mais econômica para calcular a estrutura molecular, frequências vibracionais e energia de estruturas otimizadas. Além do funcional, o conjunto de base polarizado denominado, 6-31G(d,p), será empregado no processo. Essa base admite bons resultados de otimização em grupos moleculares orgânicos, a polarização ("d" e "p") indicam uma performance mais apurada sobre átomos de hidrogênio e oxigênio respectivamente. Cálculos DFT serão compilados no *software* GAUSSIAN 09 (FRISCH, 2009), tanto para obtenção de espectros vibracionais como os dados de energia conformacional. O refinamento dos resultados serão distribuídos, identificação dos modos vibracionais da estrutura teste, da identificação das energias de conformação, e de plotagem de gráficos, respectivamente utilizando os *software* VEDA (JAMROZ, 2013), Gaussian 09 e Origin Graphics.

Fluxograma de trabalho/Resumo gráfico



## 6. PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES CIENTÍFICAS E/OU TECNOLÓGICAS E INOVADORAS DA PROPOSTA

Em virtude do grande potencial de aplicações, este trabalho possibilitará: 1) Formação de recursos humanos em técnicas computacionais de análise científica: método *ab-initio* e DFT; 2) Estudos relevantes sobre a natureza físico-química de produtos da região, especialmente vinculados a grupos carboxílicos. 3) Implementação de metodologia de análise técnica com base no método científico experimental-prático; 4) fortalecimento das instituições e parceiros envolvidos em âmbito colaborativo em ciências preditivas e aplicadas.

### 6.1 Contribuições gerais

A presente proposta visa cooperar no desenvolvimento de trabalhos como:

- Artigos científicos a serem publicados em revistas especializadas (exemplo);
  - Vibrational Spectroscopy;
  - Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy;
  - Journal of Spectroscopy.
- Teses/Dissertações, TCC etc.

## 7. Cronograma de execução de atividades

Tabela 1. Cronograma geral de atividades da proposta.

CHAMADA FAPERRO PBIC/PBIT No. 009/2022												
Atividade	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 em espectroscopia vibracional			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

## 8. IDENTIFICAÇÃO E DESCRIM. DAS ATIV. DOS DEMAIS PARTICIPANTES AUTORES E CO-AUTORES

(vide critério na Chamada)

Nome: Jorge Luiz Brito de Faria 568.174.601-15 Instituto de Física - UFMT  
 CH: 4h semanais  
 Função na proposta: Colaborador  
 Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/2516125498547643>

Nome: Laffert Gomes 937.823.062-87 Instituto Federal de Educação - IFRO  
 CH: 4h semanais  
 Função na proposta: Colaborador  
 Link para Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/5106163893782670>

Nome: Asaf Ribas [REDACTED] Departamento de Física/UNIR Ji-Paraná  
 CH: 20h semanais  
 Função na proposta: Colaborador graduação  
 Link para Currículo Lattes:



Nome: Roberta Cristina S Lima (967.348.252-72)

Departamento de Física/UNIR Ji-Paraná

CH: 20h semanais

Função na proposta: Colaboradora graduação

Link para *Currículo Lattes*:

## 9. PERMISSÕES E EXIGÊNCIAS LEGAIS E ÉTICAS

(vide critério na Chamada)

## 10. INDICAÇÃO DE COLABORAÇÕES OU PARCERIAS

---

Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT

Nome: Jorge Luiz Brito de Faria (568.174.601-15) Instituto de Física - UFMT

CH: 4h semanais

Função na proposta: Colaborador

*Currículo Lattes*: <http://lattes.cnpq.br/2516125498547643>

Instituto Federal de Educação de Rondônia - IFRO

Nome: Laffert Gomes (937.823.062-87) Instituto Federal de Educação - IFRO

CH: 4h semanais

Função na proposta: Colaborador

Link para *Currículo Lattes*: <http://lattes.cnpq.br/5106163893782670>

## 11. DESCRIÇÃO DA DISPONIBILIDADE EFETIVA DE INFRAESTRUTURA

---

- Laboratório do Grupo de pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional, Departamento de Física UNIR/Ji-Paraná.
- Laboratório Didático de Física, Departamento de Física UNIR/Ji-Paraná.
- Laboratório de Espalhamento de Luz/ Instituto de Física - IF- UFMT.

## 12. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

ALLEN, L.C.; Karo, A.M. *Rev. Mod. Phys.* 32, 275 (1960)

doi:[10.1103/RevModPhys.32.275](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.32.275)

BECKE, A.D; *J. Chem. Phys.*, 98, 5648 (1993)

CHEN, T. C. *J. Chem. Phys.* 23 (11): 2200–2201 (1955) doi:[10.1063/1.1740713](https://doi.org/10.1063/1.1740713)

FARIA, J.L.B., *Tese de Doutorado*, UFC - Ceará (2003)

FAZZIO, A.; VIANNA, J. D. M.; CANUTO, S. Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional. Livraria da Física, SP, (2004)

FRISCH, M.J et al., Gaussian 09, revision D. 01," (2009)

GRESSLER, Lori Alice. Introdução à pesquisa: projetos e relatórios. 2ª ed. rev. atual. São Paulo: Loyola, 2004.

JAMROZ, M.H., *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 114, 220–230, (2013)

LARKIN, P. Larkin, *Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation*. Elsevier, (2017)

MARTINS, Q.S., *Tese de doutorado*, UFMT – Cuiabá (2020)

MARTINS, Q.S., L.M.S. Santos, J.L.B. Faria, *Vib. Spectrosc.* v. 106, p. 102986, (2020)

PARR, R. G. *Int. J. Quantum Chem.* 37, 327–347 (1990)

[doi:10.1002/qua.560370407](https://doi.org/10.1002/qua.560370407)

WU, X.; S. Gao, J. S. Wang, H. Wang, Y. W. Huanga, Y. Zhaod, *Analyst*, 137, 4226-34 (2012)

## ANEXOS

## PLANO DE TRABALHO 1

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

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 FAPERÓ 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/seminário									X	X	X	X

s/relatórios/artigos/ resumos etc														
--------------------------------------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

## PLANO DE TRABALHO 2

TÍTULO: Cálculos *ab-initio*: recursos computacionais na análise vibracional de grupos moleculares

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

---

### 5. INTRODUÇÃO

No estudo das vibrações moleculares, pode-se conhecer os padrões oscilatórios de diversas moléculas com base na energia eletromagnética envolvida no fenômeno. Assim podemos obter respostas gráficas de forma qualitativa e indicar a presença dos mais diversos grupos moleculares existentes numa determinada amostra.

Os cálculos *ab initio* são inseridos num estudo, quando se deseja obter respostas efetivas, baseadas no conjunto teórico já existente. 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. A análise vibracional, é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos.

A rotina empregada para o estudo 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, assim como: 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 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.

## 6. OBJETIVO(S)

Geral:

→ O desenvolver habilidades e domínio na aplicação do método DFT na investigação vibracional de grupos moleculares:

Específicos:

→ Conhecer teorias relacionadas, seu desenvolvimento, importância e aplicações na Física e ciências em geral.

→ Estudar fundamentos básicos do método DFT, aplicações, tecnologias associadas e cálculos *ab initio*.

→ Obter análises vibracional 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 especializados, *softwares* etc;

## 7. 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

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.

## 8. CRONOGRAMA DAS AÇÕES A SEREM DESENVOLVIDAS

Tabela 1. Cronograma geral de atividades do plano de trabalho 2.

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/software		X	X	X	X							
Aplicações/análise vibracional			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/seminário									X	X	X	X

s/relatórios/artigos/ resumos etc														
--------------------------------------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--