

CHAMADA Nº 004/2023

Plano de Trabalho

**Investigação estrutural molecular de ácidos graxos via método
DFT e espectroscopia Raman**

1. IDENTIFICAÇÃO DA PROPOSTA

TÍTULO: Método computacional DFT: correlação com a espectroscopia Raman no estudo de ácidos graxos

Título Plano de Trabalho: Investigação estrutural molecular de ácidos graxos via método DFT e espectroscopia Raman

Área: Ciências exatas e da Terra

Área de concentração: Física da matéria condensada

Faixa de enquadramento: PBIC/PBIT N°. 004/2023

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 / quesle@fisica.ufmt.br

Tel: (65) 98465-8150

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

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

1. INTRODUÇÃO

O método computacional é apropriado em análises de sistemas moleculares com muitos elétrons, o que seria impraticável de forma analítica devido ao grande número de elementos interagentes.

O método DFT (Density Functional Theory) é empregado na análise conformacional de grupos moléculas de interesse, pois torna-se 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 estrutural e vibracional (PARR, 1990; ALLEN, 1960; CHEN, 1955).

Na caracterização por espectroscopia Raman, o estudo se baseia em verificar de imediato os modos vibracionais das moléculas na análise. Assim podemos obter respostas gráficas de forma qualitativa. Com esse procedimento se pode indicar a presença de grupos carboxílicos ligados a ácidos graxos (Silva, 2023; Silva, 2022; Ribas, 2022; Martins, 2019).

A rotina empregada para o estudo de ácidos graxos, possibilitará a estrutura básica de conhecimento necessário para organizar o processo de caracterização de materiais, especialmente no atributo da investigação estrutural e vibracional de moléculas, compreendendo uma ampla área 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.

A compreensão e correta aplicação de técnicas computacionais e experimentais proporcionará 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 computacionais e sobre a natureza da espectroscopia Raman;
- 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 do 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°. 004/2023												
Atividades	Mês											
	1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	8°	9°	10°	11°	12°

Introdução bibliográfica/método científico	X	X										
Cálculos/método DFT	X	X	X	X	X							
Conhecendo recursos de máquina/ <i>softwares</i>		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/computacional						X	X	X	X	X		
Resultados/divulgação científica/seminários/relatórios/artigos/resumos etc									X	X	X	X

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 técnica computacional de alta relevância no cenário internacional de análise molecular; 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.

Referencias 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)

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

PARR, R. G. *Int. J. Quantum Chem.* 37, 327–347 (1990)
[doi:10.1002/qua.560370407](https://doi.org/10.1002/qua.560370407)

MARTINS, Q. S.; AGUIRRE, C. A. ; FARIAS, AND J.L.B. Approach by Raman and infrared spectroscopy in three vegetable oils from the Brazilian Amazon. *REVISTA MEXICANA DE FISICA*, v. 65, p. 328, 2019.
<https://doi.org/10.31349/RevMexFis.65.328>

Ribas, Asaf, Lima, Roberta Cristina, Martins, Quesle da Silva. DFT method in ALA, DHA and EPA molecules in Raman vibrational analysis of ostrich oil from the Amazon, *Scientia Amazônia*, (2022). <https://doi.org/10.5281/zenodo.7063085>

Silva, L.G.F.; Q.S. Martins, A. Ribas, D.L.L. Oliveira, R.C.S Lima, J.G. Santos, Raman and FTIR spectroscopy experimental and theoretical in magnetic nanoemulsion from *Carapa Guianensis Aublet*, *Revista Mexicana de Física* (2023). <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.69.051003>

Silva, L.G.F., Pacheco, H. P., Martins, Q. S., Santos, J. G. and Silveira, L. B. Development of magneto-polymer nanoemulsions based on the amazon oil of *carapa guianensis aubl.*, *International Journal of Development Research*, 12 (2022). <https://doi.org/10.37118/ijdr.25736.11.2022>