



MINISTERIO DA EDUCAÇÃO  
FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE RONDÔNIA  
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE FÍSICA - JI-PARANÁ  
RELATÓRIO

Processo nº 23118.015180/2023-15

**RELATÓRIO FINAL DE ATIVIDADES DESENVOLVIDAS BOLSISTA FAPERO Edital 009/2022**

## 1 - IDENTIFICAÇÃO

PROGRAMA/EDITAL FAPERO: PBIC/PBIT NO. 009/2022

Título Projeto de Pesquisa: [Cálculos ab-initio via método DFT: análise espectral vibracional e conformacional de ácidos graxos](#)

Título Plano de Trabalho: 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

Nome do Bolsista: Asaf Ribas

Nome do Orientador: Quesle da Silva Martins

Faixa de enquadramento: PBIC

Instituição executora: Fundação Universidade Federal de de Rondônia, *campus* Ji-Paraná

## 2 - INTRODUÇÃO

O presente relatório detalha as atividades desenvolvidas no projeto "Cálculos ab-initio via método DFT: análise espectral vibracional e conformacional de ácidos graxos", centrando-se na aplicação do método DFT na análise vibracional de ácidos graxos específicos. A aplicação de métodos teóricos avançados na investigação molecular desempenha um papel crucial no entendimento das propriedades vibracionais e conformacionais de compostos orgânicos, especialmente quando se trata de ácidos graxos. Este relatório final do plano de trabalho detalha as atividades desenvolvidas no projeto "Cálculos *ab-initio* via método DFT: análise espectral vibracional e conformacional de ácidos graxos", com foco na aplicação do método DFT (Teoria Funcional da Densidade) na análise vibracional de ácidos graxos específicos.

Durante os encontros realizados nos laboratórios de Física Aplicada e do grupo de pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional, foram abordados diversos aspectos relacionados à pesquisa, incluindo orientações sobre apresentação de pesquisa, busca bibliográfica e introdução à pesquisa. O Prof. Dr. Quesle orientou a leitura e estudo de materiais fundamentais, como "Modern Raman Spectroscopy: A Practical Approach" de Ewen Smith e Geoffrey Dent, "Infrared And Raman Spectroscopy Principles And Spectral Interpretation" de Peter Larkin, "Manual da Espectroscopia Vibracional" de Bueno, Alves, Willie, e "Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho" de Oswaldo Sala [1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14].

Foram definidas as moléculas objeto de estudo, incluindo ácidos linoleico, linolênico, oleico, palmítico e esteárico, juntamente com as bases e funcionais B3LYP e 6311G; LANL2DZ; CCPVDZ, para os cálculos no *software* Gaussian 09 e visualização em Gaussview 06. A análise dos cálculos *ab-initio*, DFT revelou a eficácia da base LANL2DZ, que proporciona informações cruciais, como momento de dipolo, polarizabilidade, e energia da molécula, em um tempo significativamente menor em comparação com outras bases testadas.

Destaca-se a utilização do *software* VEDA para analisar a Distribuição de Energia Potencial (PED) de espectros vibracionais teóricos, apresentado e ensinado pelo orientador. O programa VEDA oferece a vantagem única de otimização automática das contribuições PED, um recurso exclusivo ausente em outros programas de análise PED.

O relatório também destaca eventos científicos, como a conversa virtual com a doutoranda Laura Maiza, assim como com o Prof. Dr. Jorge Luiz Brito de Faria. A aceitação para publicação do artigo "*Método DFT na investigação do Butano (C4H10): Sua conformação de energia, modos vibracionais e espectro Raman teórico*", e a apresentação de resultados em reuniões presenciais do grupo de pesquisa, incluindo a participação no I Simpósio FAPERO - SIMFAP.

### 3 - METODOLOGIA

As atividades realizadas no período de forma presencial, integraram,

- aulas expositivas;
- reuniões de grupo;
- seminários;
- palestras;
- apresentações de trabalhos e etc;
- fundamentos básicos para a pesquisa, fundamentos de cálculos *ab-initio*, método DFT, composição e estruturas moleculares, foram realizadas em computadores de laboratório e de uso pessoal, com uso de softwares: Molview, GaussView e Gaussian 09.
- Verificação de escrita através de relatórios diários de atividades e apresentação de seminários;

além de:

#### 3.1 Definição das Moléculas de Estudo:

No início do projeto, foram selecionadas as moléculas de interesse, nomeadamente ácido linoléico, ácido linolênico, ácido oléico, ácido palmítico e ácido esteárico. A escolha dessas moléculas levou em consideração sua importância biológica e relevância na pesquisa de ácidos graxos.

#### 3.2 Escolha de Bases e Funcionais:

Com base na revisão bibliográfica e orientação do Prof. Dr. Quesle, foram escolhidas as bases e funcionais B3LYP e 6311G; LANL2DZ; CCPVDZ apropriados para realizar os cálculos DFT.

#### 3.3 Execução dos Cálculos DFT:

Utilizando o software Gaussian 09 e Gaussview 06 [5], os cálculos Ab Initios DFT foram realizados para as moléculas selecionadas, empregando a base LANL2DZ e os funcional B3LYP. O objetivo foi obter informações precisas sobre a estrutura eletrônica, modos vibracionais e propriedades espectroscópicas das moléculas.

### 3.4 Análise da Distribuição de Energia Potencial (PED) com o Software VEDA:

O software VEDA foi introduzido e utilizado para analisar a Distribuição de Energia Potencial (PED) dos espectros vibracionais teóricos. Esse programa automatizado leu os dados de entrada dos arquivos de saída do Gaussian, propondo um conjunto introdutório de coordenadas de modo local. As coordenadas mais adequadas foram otimizadas para obter os elementos máximos de cada coluna (coordenada interna) da matriz PED.

As atividades ocorreram no Laboratório de Física Aplicada do DEFIJ, no Laboratório do Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional e, quando necessário, por videoconferência. A figura 1 apresenta registro de encontro semanal.

Figura 1: Reunião presencial de grupo de pesquisa (IC/ PBIC-FAPERO e PIBIC-UNIR) realizada na Fundação Universidade Federal de Rondônia, no campus de Ji-Paraná.



Fonte: Arquivo pessoal

## 4 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados apresentados nessa seção, correspondem ao conhecimento estudado e adquirido, durante o desenvolvimento do plano de trabalho.

A Tabela 1 mostra tabela com dados importantes, como: tempo de trabalho; energia; estrutura da molécula; dipolo; polarizabilidade e a base utilizada. Na Tabela 1 temos a Energia de conformação (Energia), que é uma resposta da máxima efetividade do cálculo na tentativa de “colocar” a molécula em seu menor estado energético (estado fundamental). Os dados apresentados estão numa unidade convencional da área, Hartree, no qual pode ser interpretado como: Um hartree é igual a 2.625,5 kJ/mol, 627,5 kcal/mol, 27,211 eV e 219.474,6  $\text{cm}^{-1}$  [15]. A polarizabilidade é a “dureza” da molécula ceder vibracionalmente devido a interações moleculares. A polarizabilidade é um termo importante da espectroscopia Raman, sendo a grandeza física que diferencia o princípio de ativação vibracional. A tabela 1 também indica que o cálculo atribuído ao ácido palmítico é mais rápido em relação ao oleico. Isso é

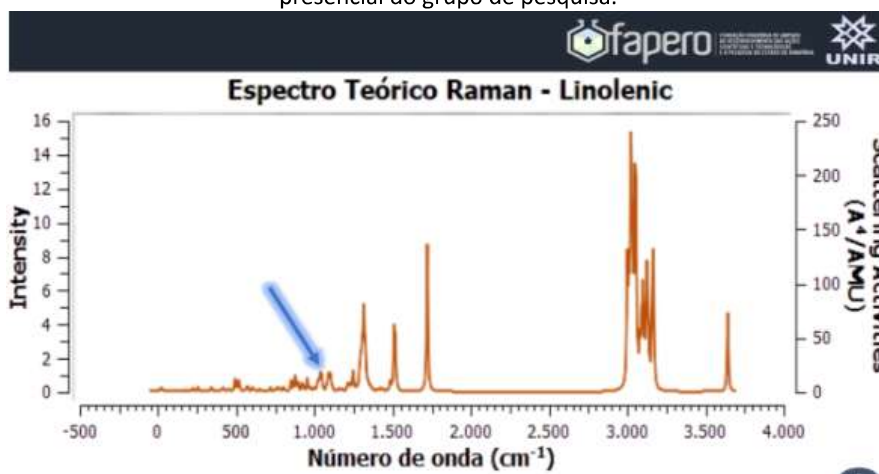
explicado pela ausência de insaturação no conjunto molecular, tornando a molécula mais simples do ponto de vista analítico.

Tabela 1. Dados obtidos após a realização dos cálculos computacionais para diversas bases.

Molécula	Base	Tempo de Trabalho	Energia	Estrutura	Parâmetro VEDA	Dipolo	Polarizabilidade
Linolênico	CC-pVDZ	8H:18	-854.44228 7	50 Átomos 154 elétrons	30,96	1.32669 9	209.690333
Linolênico	LANL2DZ	1H:06	-854.26670 3	50 Átomos 154 elétrons	29,70	1.32946 1	195.745000
Linolênico	631G(d,p)	NÃO	RODOU	50 Átomos 154 elétrons	-	-	-

Os dados são exportados diretamente do GaussView 6 após a execução da tarefa computacional realizado no Gaussian 09, após verificar os cálculos Ab Initio, DFT, para as moléculas citadas no relatório, verificamos que a base LANL2DZ é a mais eficiente. Um diferencial significativo é o fato dela realizar os cálculos em menor tempo comparado às outras bases testadas, como mostrado na Tabela 1. Para a base 631G(d,p) o cálculo computacional não rodou em condições normais, determinando parâmetros específicos como o uso de memória e renomeação do arquivo de saída .chk o cálculo é executado porém com uma deficiência em um dos arquivos de saída o que impossibilita a otimização no software VEDA. Via cálculos *ab-initio* em conjunto com a Teoria Funcional de Densidade, obtivemos espectros teóricos para as moléculas objeto de estudo deste plano de trabalho, a exemplo a Figura 2, mostra o espectro Raman teórico para a molécula linolênico.

Figura 2. Espectro Raman teórico para a molécula linolênico. Slide número 5 da apresentação do discente Asaf Ribas em reunião presencial do grupo de pesquisa.



Também foram obtidos os modos vibracionais associados a cada banda do espectro como demonstrado pelas Figuras 3 e 4.

Figura 3. Análise do espectro Raman teórico, para um número de onda definido assim como as ligações atômicas e a caracterização da vibração.

Slide da apresentação do discente Asaf Ribas em reunião presencial do grupo de pesquisa.

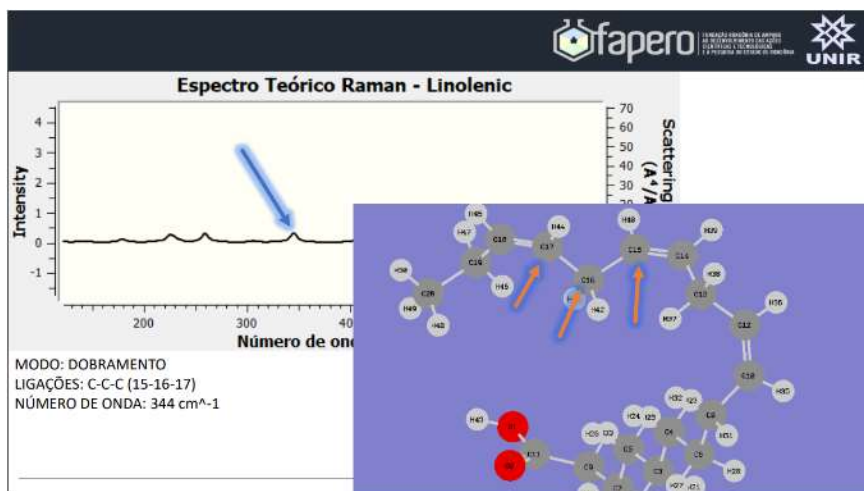
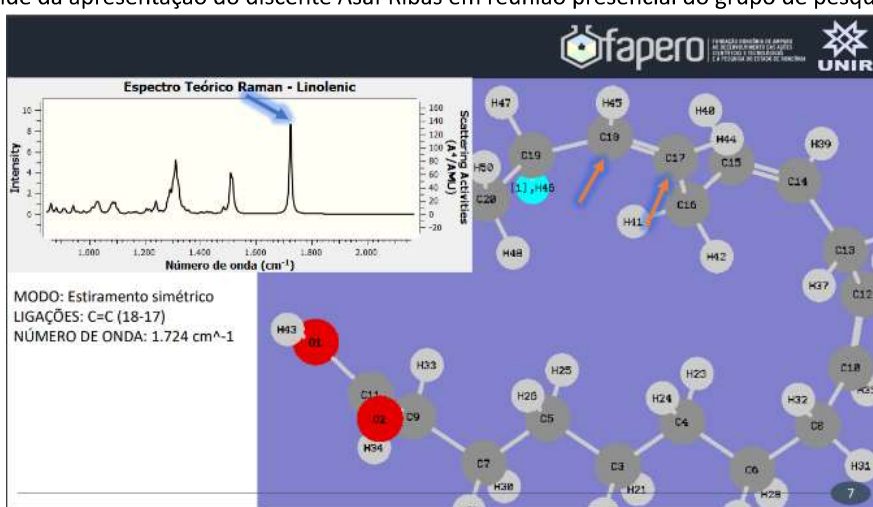


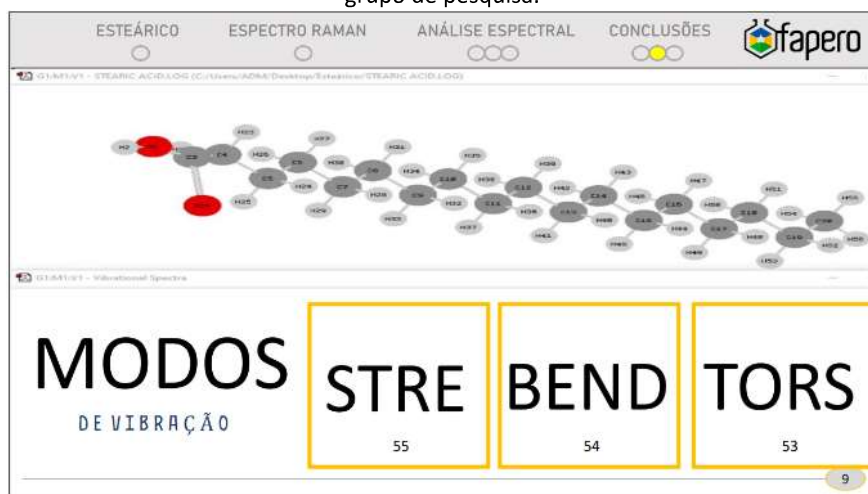
Figura 4. Análise do espectro Raman teórico, para um número de onda definido assim como as ligações atômicas e a caracterização da vibração.

Slide da apresentação do discente Asaf Ribas em reunião presencial do grupo de pesquisa.



Os cálculos via os softwares mencionados foram essenciais pois assim obtivemos a assinatura/impressão digital de cada molécula estudada, a figura 5 ilustra essa afirmativa, pois para o ácido esteárico verificamos que ele possui ao menos 162 modos de vibração e caracterizamos cada modo sendo: 55 de estiramento; 54 deformação e 53 de torção.

Figura 5. Análise dos modos vibracionais para o ácido esteárico. Slide da apresentação do discente Asaf Ribas em reunião presencial do grupo de pesquisa.



Com base nos etapas pretendidas e resultados obtidos através dos cálculos executados no programa Gaussian, a análise do comportamento molecular, baseados no efeito Raman cumpriu seu objetivo de localizar diversos modos vibracionais para as moléculas estudadas. Essa análise fornece uma base sólida para compreender as propriedades vibracionais específicas de ligações C=O, C=C, CC e CH em para um diversificado conjunto de moléculas, contribuindo assim para o entendimento mais profundo do comportamento molecular dos chamados ácidos graxos.

Os resultados podem ser úteis na composição de estudos de natureza vibracional e conformacional de ácidos graxos. O uso de recursos computacionais são muito úteis nesta etapa, para qualquer processo investigativo experimental.

## 5 - OUTROS RESULTADOS ALCANÇADOS NO PERÍODO

### 5.1 Participação e apresentação em eventos científicos como:

- I Simpósio FAPERO - SIMFAP<sup>[1]</sup> (Figura 2);
- VII ENBRAER<sup>[2]</sup> - Encontro Brasileiro de Espectroscopia Raman;
- Conversas científicas com a doutoranda Laura Maisa<sup>[3]</sup> (Figura 3);
- Conversa científica com o Prof. Dr. Jorge Luiz Brito de Faria<sup>[4]</sup> (Figura 4), que proporcionaram uma troca valiosa de conhecimentos e perspectivas na área de Física Computacional e Espectroscopia Vibracional.

Figura 2. Simpósio FAPERO - SIMFAP, na parte (a) encontra-se aluno e orientador, na parte (b) aluno sendo avaliado no evento com outras pessoas no ambiente.



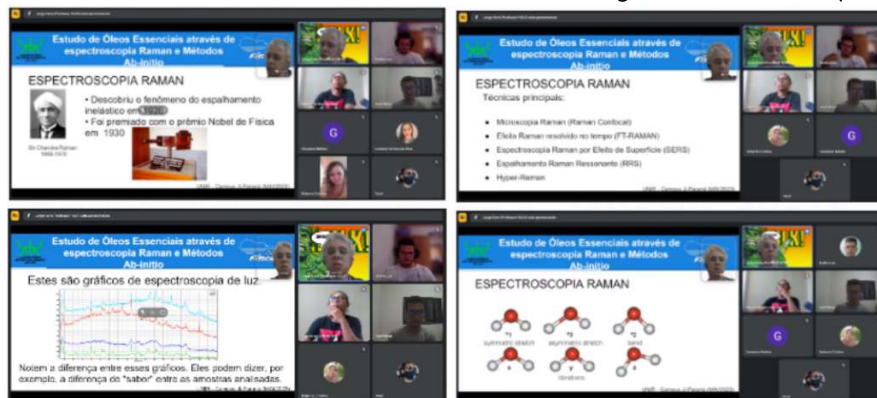
Fonte: Arquivo pessoal

Figura 3. Banner do evento: Conversa científica com Laura Maisa.



Fonte: <https://queslemartins.unir.br/homepage>

Figura 4. Print da conversa científica com o convidado Prof. Dr. Jorge Luiz Brito de Faria (Prof. Hulk).



Fonte: <https://queslemartins.unir.br/homepage>

## 5.2 Publicações técnicos-científicas:

### Artigos publicados em periódicos

- L.G.F. Silva, 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>
- A. Ribas, Método DFT na investigação do Butano (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>): sua conformação da energia, modos vibracionais e espectro Raman teórico, *Scientia Amazonia*, (2023). doi: [/10.5281/zenodo.8165113](https://doi.org/10.5281/zenodo.8165113)

### Apresentações

- XIV SEMANA DA FÍSICA<sup>[5]</sup> ;
- (VII ENBRAER) Espectroscopia Raman e Infravermelho aplicados a estudo de grupos carboxílicos de óleo vegetal<sup>[6]</sup> ;
- (I SIMFAP) Aplicando o método DFT na análise vibracional e conformacional de ácidos graxos.

Obs: Inscrição confirmada para apresentação de trabalho em XV Semana da Física - 2023<sup>[7]</sup> .

## 6 - CONCLUSÕES

O presente relatório detalhou as atividades desenvolvidas no projeto "Cálculos ab-initio via método DFT: análise espectral vibracional e conformacional de ácidos graxos", centrando-se na aplicação do método DFT na análise vibracional de ácidos graxos específicos. Ao longo desse processo, foram realizados cálculos Ab Initio DFT utilizando as bases LANL2DZ; CCPVDZ e 6311G e o funcional B3LYP no software Gaussian 09, com visualização no software Gaussview 06. A análise dos resultados destacou a eficácia da base LANL2DZ, proporcionando informações cruciais de forma mais eficiente, com relação ao parâmetro tempo. A metodologia adotada permitiu a obtenção de dados significativos sobre as propriedades vibracionais e conformacionais dos ácidos graxos estudados. A apresentação desses resultados em eventos científicos, como o I Simpósio FAPERÓ - SIMFAP e VII EnBraER, e as conversas científicas com especialistas na área, contribuíram para a validação e enriquecimento do projeto. Os artigos científicos aceitos para publicação em periódicos renomados, como a revista *Scientia Amazonia* e a *Revista Mexicana de Física*, atestam a relevância e qualidade dos resultados obtidos. Além disso, a participação em reuniões presenciais do grupo de pesquisa permitiu a discussão aprofundada dos dados, promovendo uma compreensão abrangente das propriedades moleculares estudadas.

A proposta pretendida alcançou resultados satisfatórios no estudo que envolve análise computacional de grupos moleculares, aplicado a uma investigação de natureza vibracional baseados no efeito Raman. Essa análise fornece uma base sólida para compreender as propriedades vibracionais específicas de ligações C=O, C=C, CC e CH em para um diversificado conjunto de moléculas, contribuindo assim para o entendimento mais profundo do comportamento molecular dos chamados ácidos graxos. Os resultados podem ser úteis na composição de estudos de natureza vibracional e conformacional de ácidos graxos. O uso de recursos computacionais são muito úteis nesta etapa, para qualquer processo investigativo experimental.

A abordagem via método DFT possibilitou conhecer o comportamento e a natureza das moléculas, com base na natureza vibracional, associando assim, ao estudo da técnica espectroscópica Raman na identificação de componentes de materiais. Dados experimentais e teóricos são complementares e proporcionam maior clareza na análise de dados numa rotina de laboratório.

## **7 - PERSPECTIVAS DE CONTINUIDADE OU DESDOBRAMENTO DO TRABALHO**

O uso de recursos computacionais são muito úteis nesta etapa, para qualquer processo investigativo experimental. O uso do programa Gaussian demonstra ser uma ferramenta eficaz na simulação e interpretação desses fenômenos, possibilitando avanços significativos na pesquisa em química teórica e experimental. Estudos posteriores podem agregar não só ao tratamento investigativo de ácidos graxos em óleos vegetais, mas sim, à uma diversa cadeia de moléculas, nos mais diversos produtos e sistemas e meios de produção, o que possibilitaria valor técnico e científico aos diversos setores envolvidos da cadeia produtiva.

## **8 - OUTRAS ATIVIDADES DE INTERESSE UNIVERSITÁRIO**

Participar de futuras atividades de cunho científico e/ou de incentivo à pesquisa no estado de Rondônia.

## **9 - AGRADECIMENTOS**

À FAPERO (Edital 009/2022 bolsa PBIC), ao orientador prof. Quesle da Silva Martins, aos laboratórios Estrutura da Matéria e Física Computacional e Laboratório de Física Aplicada, da UNIR, Ji-Paraná.

## **10 - BIBLIOGRAFIA**

[1] Ewen Smith, Geoffrey Dent. Modern Raman Spectroscopy A Practical Approach. Copyright 2005, Inglaterra.

[2] Larkin, Peter. Infrared And Raman Spectroscopy Principles And Spectral Interpretation. Copyright 2011 Elsevier, Estados Unidos.

[3] Bueno, Alves, Willie. Manual da Espectroscopia Vibracional. McGraw-Hill 1989, São Paulo.

[4] Sala, Oswaldo. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. Unespe 2ª Edição, São Paulo.

[5] M.J. FRISCH, G.W. TRUCKS, H.B. SCHLEGEL, G.E. SCUSERIA, M.A. ROBB, J.R. CHEESEMAN, G. SCALMANI, V. BARONE, B. MENNUCCI, G. A. PETERSSON, H. NAKATSUJI, M. CARICATO, X. LI, H. P. HRATCHIAN, A. F.



IZMAYLOV, J. BLOINO, G. ZHENG, J. L. SONNENBERG, M. HADA, M. EHARA, K. TOYOTA, R. FUKUDA, J. HASEGAWA, M. ISHIDA, T. NAKAJIMA, Y. HONDA, O. KITAO, H. NAKAI, T. VREVEN, J.A. MONTGOMERY, J.E. PERALTA, F. OGLIARO, M. BEARPARK, J. J. HEYD, E. BROTHERS, K. N. KUDIN, V. N. STAROVEROV, R. KOBAYASHI, J. NORMAND, K. RAGHAVACHARI, A. RENDELL, J. C. BURANT, S. S. IYENGAR, J. TOMASI, M. COSSI, N. REGA, J. M. MILLAM, M. KLENE, J. E. KNOX, J. B. CROSS, V. BAKKEN, C. ADAMO, J. JARAMILLO, R. GOMPERTS, R.E. STRATMANN, O. YAZYEV, A. J. AUSTIN, R. CAMMI, C. POMELLI, J.W. OCHTERSKI, R.

[6] Abkari A, I. Chaabane, K. Guidara, Dft (B3lyp/LanI2dz And 3lyp/6311g+(D,P)) Comparative Vibrational Spectroscopic Analysis Of Organic–Inorganic Compound Bis(4-Acetylanilinium) Tetrachlorocuprate(Ii), Physica E, 81, 136-144 (2016)

[7] Ali H., Nawaz, H., Saleem, M., Nurjis, F., And Ahmed, M. Qualitative Analysis Of Desi Ghee, Edible Oils, And Spreads Using Raman Spectroscopy. J. Raman Spectrosc., 47, 706–711 (2016). Doi:10.1002/Jrs.4891

[8] C.A. Martin,V.V. Almeida, M.M Ruiz, J.E. Visentainer, M. Matshushita, N. Souza, J. Visentainer, Rev. Nutr. 19 (2006) 761-770. HttPs://Doi.Org/10.1590/S1415- 52732006000600011

[9] C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, Phys. Rev. B, 98 (1988) 785-789. httPs://Doi.Org/10.1103/Physrevb.37.785

[10] Dong W, Zhang Y, Zhang B, Wang X, Rapid prediction of fatty acid composition of vegetable oil by Raman spectroscopy coupled with least squares support vector machines, J Raman Spectrosc 44, 1739–1745 (2013). httPs://doi.org/10.1002/jrs.4386

[11] F. HUANG, Y. LI, H. GUO, J. XU, Z. CHEN, J. ZHANG, Y. WANG, J. RAMAN SPECTROSC. 47 (2016) 860–864. HttPS://DOI.ORG/10.1002/JRS.4895

[12] G.I. Smith, P. Atherton, D.N. Juncos, B.S. Maomé, D. Rankin, M.J. Rennie, B. Mittendorfer, Am J Clin Nutr. 9 (2011) 402-412. HttPs://Doi.Org/10.3945/Ajcn.110.005611

[13] Lam H-Y., Roy P.K., Chattopadhyay S., Thermal degradation in edible oils by surface enhanced Raman spectroscopy calibrated with iodine values, Vibrational Spectroscopy, 106, 103018 (2020).

[14] M.H. Jamro'z, Spectrochimica Acta Part A: Molecular And Biomolecular Spectroscopy, 114 (2013) 220–230. HttPs://Doi.Org/10.1016/J.Saa. 2013.05.096

[3] Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase, NIST  
- <https://cccbdb.nist.gov/hartree.asp>

[1] Programação completa disponível em: <https://queslemartins.unir.br/noticia/exibir/27596>

[2] Mais informações em <https://www.enbraer.org/>

[3] Disponível em: <https://queslemartins.unir.br/noticia/exibir/25909>

[4] Disponível em: <https://queslemartins.unir.br/noticia/exibir/26343>

[5] Disponível em: <https://sites.google.com/unir.br/xiv-sef2022/in%C3%ADcio>

[6] Trabalho apresentado (Banner) em VII ENBRAER.

[7] Disponível em: <https://sites.google.com/view/xv-semana-da-fisica/home?authuser=0>



Documento assinado eletronicamente por **QUESLE DA SILVA MARTINS, Docente**, em 20/11/2023, às 15:45, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **LENILSON SERGIO CANDIDO, Diretor(a)**, em 21/11/2023, às 18:38, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [http://sei.unir.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](http://sei.unir.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **1556691** e o código CRC **5F81B226**.

---

Referência: Processo nº 23118.015180/2023-15

SEI nº 1556691