

**PORTAL DO DOCENTE > RELATÓRIO FINAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA****RELATÓRIO FINAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA****Discente:** 20201011955 - DUÍLLIO LUIS LOPES DE OLIVEIRA**Plano:** Análise conformacional de ácidos graxos via método DFT**Orientador:** QUESLE DA SILVA MARTINS**Data de Envio:** 12/08/2023 16:23**Tipo de Pesquisa:** Pesquisa Científica**Progresso da Pesquisa:** Em andamento**OBJETIVOS DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL DA AGENDA 2030 DA ONU**

- Assegurar padrões de produção e de consumo sustentáveis.

**RESUMO****Resumo:**

Neste plano de trabalho temos o objetivo de identificar qual é o melhor funcional e conjunto de base que tenha melhor aproximação com o espectro real, e qual obtenha a melhor conformação em nível de energia, utilizando as ferramentas disponíveis tais como o Gaussian e o Veda.

**Palavras-chave:**

DFT, Caracterização espectroscópica Raman, ácidos graxos.

**ABSTRACT****Title:**

Conformational analysis of linolenic and palmitic fatty acids

**Abstract:**

In this work plan we aim to identify which is the best functional and basis set that has the best approximation with the real spectrum, and which obtains the best conformation in energy level, using available tools such as Gaussian and Veda.

**Keywords:**

DFT, Raman spectroscopic characterization, fatty acids.

**CORPO DO RELATÓRIO****Introdução**

Na primeira etapa deste projeto foi iniciado principalmente ao que era Espectroscopia vibracional Raman e após ser introduzido ao que era espectroscopia, foi nos ensinado a como utilizar softwares no processo de caracterização de estruturas em física dos materiais e aplicação do método DFT, executamos pesquisa sobre ácidos graxos tais como ácido oleico, linoleico, linolênico, palmítico e esteárico os quais estão presentes no óleo de castanha do Brasil [Bertholletia excelsa]. E neste plano de trabalho iremos decorrer principalmente sobre análises de cálculos computacionais a fim de demonstrar qual é o funcional mais eficiente para os cálculos de ácidos graxos e óleos essenciais e como os menos eficientes alteram a conformação.

**Metodologia**

Utilizando o Gaussian 09W como o software para realização dos cálculos e o GaussView como uma interface, o propósito de utilizar o DFT, Para maximizar a velocidade foi dividido os ácidos sendo assim da minha parte foi selecionados os ácido linolênico e o palmítico, então prosseguimos para a produção de dados com o Gaussian utilizando o funcional B3LYP e tipos de bases diferentes em busca da máxima eficiência e peculiaridades em cada tipo de base, sendo assim as bases utilizadas foram 631G(d,p), cc-pVDZ e LanL2DZ. os cálculos foram feitos utilizando otimização+frequência o que nos dá como resultado a otimização que procura o estado de menor energia para a molécula e a "frequência" que nos dá o espectro vibracional da molécula específica.

**Resultados e Discussões**

O que podemos esperar do espectro raman do Ácido Palmítico como diz em [1] na faixa de 30 a 800 cm<sup>-1</sup> Temos principalmente modos de torção, sendo os principais modos os de HOCC, CCCC, HCCC. No espectro Raman, a região de 850-1700 cm<sup>-1</sup> contém vibrações associadas à flexão dos grupos CCH, HCO, metil e metileno. As vibrações de flexão do HCO foram observadas em 1176 e 1298 cm<sup>-1</sup>, enquanto a flexão assimétrica do metil (C16H3) foi observada em 1439 cm<sup>-1</sup>. Agora comprando diretamente os espectros calculados no gráfico 1 podemos observar um distanciamento crescente no sentido das bandas de maior frequência. Além disso, bandas de alta intensidade com altos números de onda foram observado entre 2800 cm<sup>-1</sup> e 3200 cm<sup>-1</sup> envolvendo apenas os modos vibracionais de estiramento (ν) do CH, CH<sub>2</sub> e CH<sub>3</sub>. O ácido Linolênico tem uma estrutura mais complexa comparada ao palmítico por ser um ácido graxo poli-insaturado possuindo um total de 3 insaturações, e possuindo 3 picos bem marcantes na faixa entre 1000 cm<sup>-1</sup> a 1800 cm<sup>-1</sup> que são relacionadas às 3 insaturações presentes no ácido. As principais características de ambos os ácidos foram preservadas nos espectros independente das bases utilizadas.

**Conclusões**

Comparado com os resultados de DFT-Raman dos funcionais

-Todos espectros teóricos apresentam grupos picos para grupos funcionais importantes da molécula;  
-É possível notar que na base LanL2dz possui deslocamento no sentido de menor frequências, e também é possível notar o agrupamento de algumas bandas porém mantendo os picos dos funcionais importantes.  
-Já o conjunto funcional ccpvdz ainda mantém características do 631g\*\* sem o agrupando alguns picos de menor intensidade.  
-Já para o valor EPM do Ácido Linolênico se aproxima do esperado de 31.078 de acordo com [1].

**Referências**

- [1] MARTINS, Q. S. et al. Investigation of ostrich oil via Raman and infrared spectroscopy and predictions using the DFT method. *Vibrational Spectroscopy*, v. 104, p. 102945, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2019.102945>
- [2] PENG, Heng; HOU, Hua-Yi; CHEN, Xiang-Bai. DFT CALCULATION AND RAMAN SPECTROSCOPY STUDIES OF α-LINOLENIC ACID. *Química Nova*, v. 44, p. 929-935, 2021. DOI: <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170749>
- [3] ITUEN, E. B.; AKPAN, I. J.; OLUWASEYI, O. R. Molecular structure, chemical reactivity, stability and vibrational spectroscopic investigation of stearic and palmitic acid using density functional theory. *Int'l. Organization of Scientific Research, J. App. Chem.*, v. 7, n. 5, p. 8-12, 2014. DOI:
- [4] DE SOUSA, F. F. et al. Conformational change in the C form of palmitic acid investigated by Raman spectroscopy and X-ray diffraction. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, v. 161, p. 162-169, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2016.02.035>
- [5] National Center for Biotechnology Information. "PubChem Compound Summary for CID 5280934,

Linolenic Acid" PubChem, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Linolenic-Acid>. acessado em: 28 junho, 2023.

**PARECER (EMITIDO EM 13/08/2023 08:36)**

Facilidade no aprendizado de conteúdo e bom ambiente organizacional. Conclui atividades dentro e/ou cronograma previstos e demonstra habilidades no processos computacionais exigidos para o plano de trabalho.

[<< Voltar](#)

[Portal do Docente](#)

---

SIGAA | Diretoria de Tecnologia da Informação - (69) 2182-2176 | Copyright © 2006-2023 - UNIR - SigBoss2.unir.br;SigBoss2 - v4.10.6