

GRUPO DE PESQUISA:

ENGENHARIA DE MATERIAIS

LÍDER: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

INTEGRANTES: Dr. Basílio Baseia, Dr. Francisco Aparecido Pinto Osorio, Prof. Adailton Neres de Castro, Profa. Daphne Cristine Fernandes, Prof. Florisberto Garcia dos Santos, Prof. Sixelizio Alves de Lima e Castro, Andre Duarte da Silva, João Victor Batista Soares e Ítalo Nuta Ribeiro

O “Grupo de Pesquisa em Engenharia de Materiais” (GPEM) surgiu em 2018, em Goiânia, Goiás, ainda restrito à área da Engenharia, Química e Física, com o objetivo de atuar no desenvolvimento e aplicação de métodos de mecânica quântica molecular na modelagem de sistemas orgânicos que apresentam interesse tecnológico.

O GPEM está envolvido na síntese, na determinação experimental, na modelagem e desenvolvimento de métodos de cálculos que permitem a descrição meticulosa das propriedades de sistemas moleculares reais.

Nossa atenção está direcionada, principalmente, na simulação de dinâmica molecular quântica usando DFT via *Gaussian* ou ondas planas via SIESTA ou VASP. Também trabalhamos na determinação experimental de estruturas cristalinas usando a difração de raios-X, com impacto direto no desenvolvimento de novos compostos e nas ciências dos materiais.

O GPEM tem por objetivo dar continuidade aos nossos estudos recentemente desenvolvidos, submetidos e publicados: neles nos envolvemos nos cálculos de propriedades lineares e não lineares de novos cristais orgânicos produzidos em laboratório, preparados por diversas técnicas e determinados estruturalmente por raios-X, usando variadas técnicas tratando diversos tipos de cristais. O escopo desses cálculos tem duas vertentes: uma delas consiste em entender as características de novos cristais orgânicos, a

partir de primeiros princípios, bem como seu comportamento ante a ação de campos elétricos externos, estáticos e dinâmicos, e como eles afetam o cristal com respeito ao seu caráter anisotrópico; a segunda vertente consiste na procura de propriedades de destaque, de interesse aplicativo.

O GPEM mantém o compromisso de fazer-se presente em eventos importantes, visando a participação efetiva em grupos de cooperação internacional, fortalecendo a imagem da universidade como instituição, assim, despertando maior interesse da comunidade científica estrangeira. Em 2020, O GPEM consolidou suas parcerias internacionais com os seguintes grupos de Pesquisa:

- Professor Krishna Murthy Potla do Departamento de Química, Bapatla Engineering College (Autonomous), Acharya Nagarjuna University Post Graduate Research Centre, Bapatla, 522 102, A.P, India.
- Professor Md. Serajul Haque Faizi do Departamento de Química, Langat Singh College, B. R. A.Bihar University, Muzaffarpur, Bihar, 842001, India

Dessas parcerias podemos destacar os seguintes trabalhos [1–3].

No ano de 2020 o Grupo Publicou 11 trabalhos dos quais 10 internacionais e 1 nacional [1–11].

Acreditamos que esse projeto posto em execução contribuirá para um desenvolvimento ainda maior do Grupo de Pesquisa que já opera nessa área há algum tempo, dispondo de alguma tradição na determinação das propriedades não lineares mencionadas.

Relação dos Trabalhos Publicados:

- [1] N. Poojith, K.M. Potla, F.A.P. Osório, C. Valverde, S. Vankayalapati, P.A. Suchetan, M. Raja, Y-shaped potential third-order nonlinear optical material-3-(2-amino-2-oxoethyl)-5-methyl hexanoic acid: An analysis of structural, spectroscopic and docking studies, New J. Chem. 44 (2020) 18185–18198. <https://doi.org/10.1039/d0nj02658a>.
- [2] K.M. Potla, N. Poojith, F.A.P. Osório, C. Valverde, S. Chinnam, P.A. Suchetan, S. Vankayalapati, An analysis of spectroscopic, computational and biological activity studies of L-shaped sulfamoylbenzoic acid derivatives: A third order nonlinear optical material, J. Mol. Struct. 1210

- (2020). <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128070>.
- [3] M.S.H. Faizi, F.A.P. Osório, C. Valverde, Synthesis, crystal structure, spectroscopic and nonlinear optical properties of organic salt: A combined experimental and theoretical study, *J. Mol. Struct.* 1210 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128039>.
- [4] C. Valverde, J.V.B. Soares, A.D. da Silva, B.V. da Luz, D.J.A. dos Santos, E.G.B. Carvalho, Y.C.M. Oliveira, H.B. Napolitano, B. Baseia, F.A.P. Osório, Theoretical study of solvent effects on the hyperpolarizabilities of two chalcone derivatives, *Rev. Colomb. Química.* 49 (2020) 33–39. <https://doi.org/10.15446/rev.colomb.quim.v1n49.82156>.
- [5] I.D. Borges, J.A.V. Danielli, V.E.G. Silva, L.O. Sallum, J.E. Queiroz, L.D. Dias, I. Iermak, G.L.B. Aquino, A.J. Camargo, C. Valverde, C. Valverde, F.A.P. Osório, F.A.P. Osório, B. Baseia, B. Baseia, H.B. Napolitano, H.B. Napolitano, Synthesis and structural studies on (: E)-3-(2,6-difluorophenyl)-1-(4-fluorophenyl)prop-2-en-1-one: a promising nonlinear optical material, *RSC Adv.* 10 (2020) 22542–22555. <https://doi.org/10.1039/d0ra03634j>.
- [6] I.N. Ribeiro, R.L.G. de Paula, P.R.S. Wenceslau, F.S. Fernandes, V.S. Duarte, W.F. Vaz, G.R. Oliveira, C. Valverde, H.B. Napolitano, B. Baseia, Growth and characterization of a new chlorine substituted chalcone: A third order nonlinear optical material, *J. Mol. Struct.* 1201 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127137>.
- [7] J.M.F. Custodio, W.F. Vaz, E.C.M. Faria, M.M. Anjos, C.E.M. Campos, G.R. Oliveira, F.T. Martins, C.C. da Silva, C. Valverde, F.A.P. Osório, B. Baseia, H.B. Napolitano, On the potential as nonlinear optical material of a new chalcone derivative and its crystal and topological analysis, *J. Mol. Struct.* 1201 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127131>.
- [8] L.F. Ribeiro, B. Baseia, C. Valverde, A Study of the Nonlinear Optical Properties of Stilbazolium Derivative Crystal, *J. At. Mol. Condens. Nano Phys.* 7 (2020) 73–81. <https://doi.org/10.26713/jamcnp.v7i2.1410>.
- [9] J.M.F. Custodio, C.N. Perez, C. Valverde, F.A.P. Osório, H.B. Napolitano, Enhanced nonlinear optics properties of a bromine chalcone from a novel polymorph, *Chem. Phys. Lett.* 738 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.136852>.

- [10] J.M.F. Custodio, J.J.A. Guimarães-Neto, R. Awad, J.E. Queiroz, G.M.V. Verde, M. Mottin, B.J. Neves, C.H. Andrade, G.L.B. Aquino, C. Valverde, F.A.P. Osório, B. Baseia, H.B. Napolitano, Molecular modelling and optical properties of a novel fluorinated chalcone, *Arab. J. Chem.* 13 (2020) 3362–3371. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2018.11.010>.
- [11] C. Valverde, V.G. de Sousa, Priscila Batista, Gonçalves, Desenvolvimento de um aplicativo mobile para aplicação no mercado de segurança do trabalho, *Cad. FÍSICA DA UEFS.* 18 (2020) 1–14.