

## **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. Sizelizio Alves de Lima e Castro, Andre Duarte da Silva, Ítalo Nuta Ribeiro e João Victor Batista Soares

Permitam-me apresentar o "Grupo de Pesquisa em Engenharia de Materiais" (GPEM), instituído em 2018 na cidade de Goiânia, Goiás. Originalmente circunscrito às áreas de Engenharia, Química e Física, o GPEM tem como propósito atuar no desenvolvimento e aplicação de métodos de mecânica quântica molecular na modelagem de sistemas orgânicos de interesse tecnológico.

O GPEM dedica-se à síntese, determinação experimental, modelagem e desenvolvimento de métodos de cálculo que possibilitam a descrição metódica das propriedades de sistemas moleculares reais. Nossa principal ênfase recai sobre a simulação de dinâmica molecular quântica, empregando DFT via Gaussian ou ondas planas via SIESTA ou VASP. Ademais, atuamos na determinação experimental de estruturas cristalinas mediante a difração de raios X, com impacto direto no desenvolvimento de novos compostos e nas ciências dos materiais.

O GPEM objetiva dar continuidade aos estudos recentemente desenvolvidos, submetidos e publicados, nos quais nos dedicamos aos cálculos de propriedades lineares e não lineares de novos cristais orgânicos sintetizados em laboratório, preparados por diversas técnicas e determinados estruturalmente por raios X, utilizando variadas técnicas e tratando diversos tipos de cristais. O escopo desses cálculos abrange duas vertentes: a primeira

consiste em compreender as características de novos cristais orgânicos a partir de primeiros princípios, bem como seu comportamento diante da ação de campos elétricos externos, estáticos e dinâmicos, e como eles afetam o cristal com respeito ao seu caráter anisotrópico; a segunda vertente envolve a busca por propriedades de destaque, de interesse aplicativo.

O GPEM mantém o compromisso de participar ativamente de eventos relevantes e grupos de cooperação internacional, fortalecendo a imagem da universidade como instituição e despertando maior interesse da comunidade científica estrangeira. Em 2020, o GPEM consolidou parcerias internacionais com os seguintes grupos de pesquisa:

- Prof. Krishna Murthy Potla, Departamento de Química, Bapatla Engineering College (Autonomous), Acharya Nagarjuna University Post Graduate Research Centre, Bapatla, 522 102, A.P, Índia.

- Prof. Md. Serajul Haque Faizi, Departamento de Química, Langat Singh College, B. R. A. Bihar University, Muzaffarpur, Bihar, 842001, Índia

No ano de 2024, já temos três trabalhos publicados (Costa *et al.*, 2024; Potla *et al.*, 2024; Valverde *et al.*, 2024). No ano de 2023, foram publicados quatro trabalhos (Murthy Potla *et al.*, 2023; Nunes, Cristine Pereira e Oliveira, 2023; Potla *et al.*, 2023; Valverde *et al.*, 2023). No ano de 2022, o grupo publicou seis trabalhos, dos quais cinco são internacionais e um nacional (Aguiar *et al.*, 2022; Barbosa *et al.*, 2022; Custodio *et al.*, 2022; Neves, Junior e Valverde, 2022; Sallum *et al.*, 2022; Valverde *et al.*, 2022).

Acreditamos que a execução deste projeto contribuirá para um desenvolvimento ainda maior do Grupo de Pesquisa, que já atua nessa área há algum tempo e possui tradição na determinação das propriedades não lineares mencionadas.

Estamos confiantes de que o GPEM continuará a crescer e a contribuir significativamente para o avanço do conhecimento científico no campo da Engenharia de Materiais. Continuaremos a buscar parcerias nacionais e internacionais, bem como a divulgar nossos resultados em publicações e conferências de alto nível, sempre mantendo nosso compromisso com a excelência acadêmica e a inovação.

Caso necessitem de mais informações sobre o GPEM ou nossas atividades de pesquisa, por favor, não hesitem em entrar em contato conosco. Estamos à disposição para esclarecer dúvidas e discutir possíveis colaborações.

#### **Relação dos Trabalhos Publicados:**

AGUIAR, A. S. N. *et al.* Bromine Substitution Effect on Structure, Reactivity, and Linear and Third-Order Nonlinear Optical Properties of 2,3-Dimethoxybenzaldehyde. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 126, n. 43, p. 7852–7863, 3 nov. 2022.

BARBOSA, M. R. *et al.* Theoretical Model of Polarization Effects on Third-Order NLO Properties of the Stilbazolium Derivative Crystal. **The journal of physical chemistry. A**, v. 126, n. 48, p. 8901–8909, 8 dez. 2022.

COSTA, L. B. *et al.* Synthesis, characterization, and supramolecular analysis of a novel chalcone derivative: exploring nonlinear optical applications. **Rendiconti Lincei. Scienze Fisiche e Naturali**, 19 mar. 2024.

CUSTODIO, J. M. F. *et al.* Relating the crystal structure and third-order nonlinear susceptibility of a new Neolignan derivative. **Journal of Molecular Structure**, v. 1249, p. 131566, 5 fev. 2022.

FERNANDES, J. *et al.* Mostra científica e práticas experimentais no ensino básico como mediação do processo de ensino aprendizagem. **Revista Científica Facmais**, v. 21, p. 1-16, 2023.

MURTHY POTLA, K. *et al.* A comparative study of structural and spectroscopic properties of three structurally similar mechanically bending organic single crystals – 2-Amino-3-nitro-5-halo (halo = Cl, Br, or I) pyridine. **Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, v. 302, p. 123093, dez. 2023.

NEVES, E.; JUNIOR, E. M. O.; VALVERDE, C. Desenvolvimento de mecanismos de elaboração e construção de um ambiente virtual de aprendizagem: como instrumento de apoio ao ensino presencial nas Faculdades Aphonesiano. **Rev. Aphonc. Trindade**, v. 19, n. 1, p. 132–152, 2022.

POTLA, K. M. *et al.* Multifaceted Study of a Y-Shaped Pyrimidine Compound: Assessing Structural Properties, Docking Interactions, and Third-Order Nonlinear Optics. **ACS Omega**, 6 fev. 2024.

SALLUM, L. O. *et al.* Molecular modeling and nonlinear optical properties of new isostructural halogenated dihydroquinolinones. **New Journal of Chemistry**, v. 46, n. 29, p. 14192–14204, 2022.

VALVERDE, C. *et al.* Investigating Solvent-Induced Changes in Structure and Nonlinear Optical Behavior of Thiazine Derivatives. **Journal of The Brazilian Chemical Society**, v. 34, p. 1-11, 2024.

VALVERDE, C. *et al.* Theoretical investigation on the linear and nonlinear optical properties of DAPSH crystal. **Scientific Reports**, v. 13, p. 8616, 2023.

VALVERDE, C. *et al.* Remarkable Nonlinear Properties of a Novel Quinolidone Derivative: Joint Synthesis and Molecular Modeling. **Molecules**, v. 27, n. 8, p. 2379, 7 abr. 2022.