



## PLANO DE TRABALHO

### DADOS DO PLANO DE TRABALHO

<b>Projeto de Pesquisa:</b>	PVC334-2023 - Cálculos ab initio em grupos carboxílicos no processo de caracterização de óleos naturais amazônicos por Espectroscopia Raman e Infravermelho
<b>Orientador:</b>	QUESLE DA SILVA MARTINS
<b>Centro:</b>	CAMPUS JI-PARANA
<b>Departamento:</b>	DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE FÍSICA - JP
<b>Tipo de Bolsa:</b>	A DEFINIR
<b>Direcionamento(s) da bolsa:</b>	Iniciação Científica
<b>Status do Plano:</b>	FINALIZADO
<b>Cota:</b>	PIBIC-CNPQ 2021/2022 (20/07/2021 a 31/08/2022)
<b>Edital:</b>	(INSCRIÇÕES ENCERRADAS) EDITAL 2021/PIBIC/DPESQ/PROPESQ

### CORPO DO PLANO DE TRABALHO

<b>Título</b>	Estudo da espectroscopia Raman e Infravermelho aplicados a óleos naturais da Amazônia: síntese de grupos carboxílicos
<b>Introdução e Justificativa</b>	<p><b>Introdução</b></p> <p>Na Amazônia há mais de 40 mil espécies de plantas em estudo e apenas algumas dezenas de espécies são conhecidas, assim a eficácia de suas aplicações dependem de estudo técnicos e o conhecimento mínimo de suas potencialidades físico-químicas. Os óleos de origem vegetal podem apresentar compostos voláteis que têm como característica uma intercalação das ligações simples e duplas (<math>\sigma</math>-<math>\pi</math>), chamado conjugação. Uma série de componentes presentes nesses óleos são chamados de ácidos graxos, estruturas carbônicas ligadas a um grupo carboxila. Esta peculiaridade pode ser estudada através do conhecimento dos estados eletrônicos da molécula [1, 2]. Dentre outros constituintes, se pode ter hidrocarbonetos terpênicos, álcoois simples e terpênicos, aldeídos, cetonas, fenóis, ésteres, éteres, óxidos, peróxidos, furanos, ácidos orgânicos, lactonas, cumarinas, até compostos com enxofre.</p> <p>O estudo por espectroscopia Raman e no Infravermelho verifica como a emissão dos elétrons depende dos níveis eletrônicos envolvidos no processo, diferenciados pelas regras de seleção espectroscópicas. Ao estudar óleos naturais por essas técnicas, tem-se a possibilidade de conhecer a característica do padrão espectral que é definido devido a composição do material, formando uma espécie de assinatura ou impressão digital. Nesse caso o estudo por espectroscopia Raman se torna eficiente por ser uma técnica de caracterização que não requer um tratamento específico do material, podendo este ser analisado imediatamente após sua extração, assim conservando suas características originais no ato da medida e consequentemente possibilitando um sinal espectral com maior pureza e a espectroscopia no Infravermelho, sendo uma técnica amplamente difundida nesse contexto, apresenta complementaridade no estudo vibracional de materiais [3-10].</p> <p><b>Justificativa</b></p> <p>Justifica-se tal iniciativa buscando a diversificação para o desenvolvimento da ciência na região Norte, especificamente no estado de Rondônia, dando subsídio a formação de recursos humanos, proporcionando o aperfeiçoamento técnico-científico local e ainda para popularização da pesquisa científica através de fundamentos teóricos e práticos da espectroscopia vibracional Raman e no Infravermelho, técnicas experimentais e teóricas de alta relevância na caracterização de materiais, que possibilitará a implementação de conhecimento científico acerca de produtos naturais regionais, por fim, agregando valores a produtos regionais.</p>
<b>Objetivos</b>	<p><b>Geral:</b></p> <p>Estudar a espectroscopia Raman e no Infravermelho: fundamentação teórica e experimentação;</p> <p>Desenvolver habilidades no processo de análise experimental e investigação vibracional de grupos moleculares.</p> <p><b>Específicos:</b></p> <p>Estudar fundamentos básicos, aplicações, tecnologias associadas e correlações com cálculos ab initio;</p> <p>Contribuir para a formação científica, profissional e pessoal do educando;</p> <p>Incorporar na rotina do aluno de graduação conceitos da pesquisa científica, como a leitura de artigos científicos, revistas especializadas, softwares etc;</p> <p>Introduzir conceitos básicos da Física experimental e conceitos de técnicas de caracterização de materiais e aplicações.</p>
<b>Metodologia</b>	<p>A atividade do projeto será executada num regime de trabalho de 20 (vinte) horas semanais, em encontros diários em turno contrário do horário de aula do voluntário.</p> <p>Durante os encontros, sobre a orientação do orientador, o voluntário desenvolverá atividades propostas e em conjunto com o orientador.</p> <p>As atividades iniciais se baseiam em preparar o voluntário 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 da espectroscopia Raman e cálculos Ab-initio, tanto como verificação de escrita através de relatórios diários de atividades e apresentação de seminários, dando-lhe de suporte para seguir as atividades do cronograma sem impedimentos, minimizando as dificuldades encontradas.</p> <p>Sanadas as lacunas iniciais na preparação específica para cada caso, o voluntário seguirá à constituição de sua responsabilidade no projeto de pesquisa, seguindo as etapas conforme indicada em cronograma estabelecido.</p>
<b>Habilidades Adquiridas</b>	Domínio na aplicação e discussão de resultados da espectroscopia Raman e no Infravermelho e uso de softwares no processo de caracterização e análise de dados na Física experimental e aplicada.
<b>Referências</b>	<p>[1] FUNASAKI, M.; et. al., Quim. Nova, 39 (2), 194-209, (2016)</p> <p>[2] RADÚNZ, L. L., Tese de Doutorado, UFV - Minas Gerais (2004)</p> <p>[3] O. Sala, Fundamentos da espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2ª ed. São Paulo: Livraria da Física (2004)</p> <p>[4] P. Larkin (Peter J.), Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Elsevier Inc. (2011)</p> <p>[5] V.C. Raman, K.S. Krishnan, Nature, 501, (1928)</p> <p>[6] J.L.B. Faria, Tese de Doutorado, UFC - Ceará (2003)</p> <p>[7] Q.S. Martins, Tese de doutorado, UFMT - Cuiabá (2020)</p> <p>[8] Q.S. Martins, L.M.S. Santos, J.L.B. Faria. Raman spectra and ab-initio calculations in Bertholletia excelsa oil, Vib. Spectrosc. v. 106, p. 102986, (2020).</p>

[9] Q.S. Martins, C.A. Aguirre, J.L.B. Faria, Approach by Raman and infrared spectroscopy in three vegetable oils from the Brazilian Amazon, Rev. Mex. Phys. n. 65, p. 328-332 (2019).

[10] FAZZIO, A.; VIANNA, J. D. M.; CANUTO, S. Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional. Livraria da Física, SP, (2004)

**CRONOGRAMA DE ATIVIDADES**

Atividade	2021						2022							
	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO			X	X	X									
COLETA, SEPARAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE AMOSTRA(S)				X	X	X								
ESTUDO FÍSICO-QUÍMICO DA(S) AMOSTRA(S)					X	X	X							
ESPECTROSCOPIA RAMAN/INFRAVERMELHO					X	X	X							
ANÁLISE DE RESULTADOS							X	X	X	X	X			
PARTICIPAÇÃO EM EVENTO CIENTÍFICO												X	X	X
PREPARAÇÃO DE ARTIGOS E RESUMOS PARA DIVULGAÇÃO EM PERIÓDICOS, TRABALHOS E CONGRESSOS CIENTÍFICOS											X	X	X	X
SUBMISSÃO DE TRABALHOS											X	X	X	X

**HISTÓRICO DE BOLSISTAS**

Discente	Data de Indicação	Início	Fim
201912107 - ASAF RIBAS	26/07/2021 09:51:51	26/07/2021	29/08/2022

**PARECER CONSULTORES**

Data/Hora	Parecer	Usuário
24/06/2021 09:18	O projeto objetiva utilizar a espectroscopia Raman e no Infravermelho para estudar óleos naturais a fim de se conhecer a característica do padrão espectral que é definido devido a composição do material. Trata-se de um projeto bem dimensionado para um trabalho de iniciação científica, envolvendo a conceitualização teórica e a formação para a pesquisa. As etapas do cronograma físico estão bem distribuídas de forma que o projeto poderá proporcionar condições boas ao amadurecimento científico do aluno, buscando como resultado final a divulgação dos resultados através de publicações,	(c146)

**HISTÓRICO DO PLANO DE TRABALHO**

Data/Hora	Situação	Tipo de Bolsa	Usuário
09/09/2022 10:06	FINALIZADO	A DEFINIR	GESTOR DE PESQUISA
24/06/2021 09:18	APROVADO	A DEFINIR	(c146)
19/05/2021 12:03	CONCORRENDO A COTA	A DEFINIR	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)