



PLANO DE TRABALHO

DADOS DO PLANO DE TRABALHO

Projeto de Pesquisa:	PVC334-2023 - Cálculos ab initio em grupos carboxílicos no processo de caracterização de óleos naturais amazônicos por Espectroscopia Raman e Infravermelho
Orientador:	QUESLE DA SILVA MARTINS
Centro:	CAMPUS JI-PARANA
Departamento:	DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE FÍSICA - JP
Tipo de Bolsa:	A DEFINIR
Direcionamento(s) da bolsa:	Continuidade de algum plano do ano anterior Iniciação Científica
Status do Plano:	EM ANDAMENTO
Cota:	PIBIC CNPq - 2022/2023 (01/09/2022 a 31/08/2023)
Edital:	(INSCRIÇÕES ENCERRADAS) EDITAL PIBIC - CICLO 2022/2023

CORPO DO PLANO DE TRABALHO

Título	Estudo vibracional de espectroscopia Raman e Infravermelho aplicados a óleos naturais da Amazônia
---------------	---

Introdução e Justificativa

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. 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.

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. Nesse sentido, é possível dizer que a energia incidida sobre uma amostra absorve certa quantidade de radiação eletromagnética, que é convertida em energia de vibração das moléculas do material. 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 [3-9].

Objetivos

Estudar a espectroscopia vibracional Raman e no Infravermelho;

Desenvolver habilidades no processo de análise experimental e investigação vibracional de grupos moleculares.

Específicos:

Estudar fundamentos básicos, aplicações, tecnologias associadas e correlações com cálculos ab initio;

Contribuir para a formação científica, profissional e pessoal do educando;

Incorporar na rotina do aluno de graduação conceitos da pesquisa científica, como a leitura de artigos científicos, revistas especializadas, softwares etc;

Metodologia

Durante os encontros, sobre a orientação do orientador, o voluntário desenvolverá atividades propostas e em conjunto com o orientador.

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.

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.

Habilidades Adquiridas

Domínio na aplicação e discussão de resultados da espectroscopia vibracional Raman e no Infravermelho e uso de softwares no processo de caracterização e análise de dados na Física experimental e aplicada.

Referências

- [1] FUNASAKI, M.; et. al., Quim. Nova, 39 (2), 194-209, (2016)
- [2] RADÚNZ, L. L., Tese de Doutorado, UFRV - Minas Gerais (2004)
- [3] O. Sala, Fundamentos da espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2ª ed. São Paulo: Livraria da Física (2004)
- [4] P. Larkin (Peter J.), Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Elsevier Inc. (2011)
- [5] V.C. Raman, K.S. Krishnan, Nature, 501, (1928)
- [6] J.L.B. Faria, Tese de Doutorado, UFC - Ceará (2003)
- [7] Q.S. Martins, Tese de doutorado, UFMT - Cuiabá (2020)
- [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).
- [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).

CRONOGRAMA DE ATIVIDADES

Atividade	2022				2023							
	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
ESTUDOS DIRECIONADOS A ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL	X	X	X	X								
ESTUDOS DIRECIONADOS À FÍSICA APLICADA E CÁLCULOS AB INITIO	X	X	X	X								
ETAPAS DE LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO E ESCRITA CIENTÍFICA	X	X	X	X								
COLETA, SEPARAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE (NOVAS) AMOSTRAS			X	X								
ESTUDO FÍSICO-QUÍMICO DAS AMOSTRAS				X	X	X						

Atividade	2022				2023							
	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
ETAPAS DE EXPERIMENTAÇÃO POR POR ESPECTROSCOPIA RAMAN/INFRAVERMELHO/UV-VIS				X	X	X	X					
SIMULAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL					X	X	X	X				
TRATAMENTO ANALÍTICO DE RESULTADOS EXPERIMENTAIS E TEÓRICOS						X	X	X	X	X		
PREPARAÇÃO DE RELATÓRIOS TÉCNICOS, ARTIGOS E RESUMOS PARA DIVULGAÇÃO EM PERIÓDICOS, TRABALHOS E CONGRESSOS CIENTÍFICOS							X	X	X	X	X	X
SUBMISSÃO DE TRABALHOS, APRESENTAÇÃO DE SEMINÁRIOS E PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS									X	X	X	X

HISTÓRICO DE BOLSISTAS

Discente	Data de Indicação	Início	Fim
201912107 - ASAF RIBAS	02/09/2022 20:37:47	02/09/2022	17/08/2023

PARECER CONSULTORES

Data/Hora	Parecer	Usuário
05/08/2022 15:42	Para um projeto de Iniciação Científica, o plano apresentado, pode ser enquadrado para a sua execução. Desta forma, sou de parecer favorável. obs: A frase: "As atividades do projeto serão executadas num regime de trabalho de 20 (vinte) horas semanais, em encontros diários em turno contrário do horário de aula do bolsista (voluntário). Os encontros ocorrerão no Laboratório de Física Aplicada do DEFIJI, no Laboratório do Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional e, quando necessário, por videoconferência. Durante os encontros, sobre a orientação do orientador, o voluntário desenvolverá atividades propostas e em conjunto com o orientador.", talvez não se enquadre nas metodologias.	(c322)
09/08/2022 14:36	Recomendado.	(c322)

HISTÓRICO DO PLANO DE TRABALHO

Data/Hora	Situação	Tipo de Bolsa	Usuário
09/08/2022 14:36	APROVADO	A DEFINIR	(c322)
08/08/2022 11:53	CORRIGIDO PELO ORIENTADOR	A DEFINIR	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)
05/08/2022 15:42	NECESSITA CORREÇÕES	A DEFINIR	(c322)
21/07/2022 17:28	CONCORRENDO A COTA	A DEFINIR	MINA DANAE FRANCO GOMES (88591590244)
28/06/2022 15:52	CONCORRENDO A COTA	A DEFINIR	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)