



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:	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
Análise conformacional de ácidos graxos via método DFT

Introdução e Justificativa

INTRODUÇÃO AO PROBLEMA

Na caracterização por espectroscopia Raman ou no Infravermelho, o estudo se baseia em verificar de imediato os modos vibracionais das moléculas na análise. Assim podemos obter respostas gráficas de forma qualitativa [1-3]. Com esse procedimento se pode indicar a presença de grupos carboxílicos ligados a ácidos graxos.

Na compreensão da interação proposta na etapa experimental, um conjunto de técnicas teóricas são empregadas em etapas atemporal do estudo, que visam compreender o comportamento dos elétrons na matéria condensada (sistemas moleculares). Nessa etapa, se faz necessário resolver um problema de muitos corpos, o qual exige conceitos estatísticos para determinar as propriedades intrínsecas dos materiais no limite termodinâmico e aproximações, sendo que a mais simples é a aproximação na qual os elétrons (do sistema) não interagem entre si [4].

Nesse contexto é executado o cálculo ab initio, que fornece a solução da equação de Schroedinger (sob certas considerações), valores de constantes fundamentais e o número atômico, vários resultados sobre o estado molecular, determinação de estados eletrônicos, otimização geométrica, estrutura de transição, distribuição eletrônica, superfícies de energia potencial e cálculos de frequência vibracional entre outros. O método é apropriado em análises de sistemas moleculares com muitos elétrons, o que seria impraticável de forma analítica devido ao grande número de elementos interagentes. Sob esse contexto, o método DFT (Density Functional Theory), é empregado na análise conformacional de grupos moléculas de interesse [5-9]. A análise conformacional, é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos.

JUSTIFICATIVA

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 técnicas experimentais e teóricas de alta relevância na caracterização de materiais, especialmente no trato de óleos naturais, abundantes na região, possibilitando a implementação de conhecimento científico e agregando valores a produtos regionais. Ainda não menos relevante, a combinação de técnicas computacionais e experimentais proporciona uma interação interdisciplinar entre cursos das ciências exatas, assim, podendo ser estudada de forma paralela em áreas correlatas visando diversas aplicações. A análise conformacional de grupos moleculares poderá possibilitar interpretações corretas do estado de menor energia de determinadas estruturas, auxiliando na interpretação de resultados experimentais e teóricos no campo da espectroscopia vibracional.

Objetivos

Geral:

O desenvolver habilidades e domínio na aplicação do método DFT na investigação vibracional de grupos moleculares e conhecer teorias relacionadas, seu desenvolvimento, importância e aplicações na Física e ciências em geral.

Específicos:

Estudar fundamentos básicos do método DFT, aplicações, tecnologias associadas e cálculos ab initio e sobre a natureza da espectroscopia (espectroscopia Raman e no Infravermelho);

Obter análises conformacionais dos grupos moleculares compreendidos no âmbito da pesquisa;

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;

Introduzir conceitos básicos da Física experimental e conceitos de técnicas de caracterização de materiais e aplicações.

Metodologia

As atividades se baseiam em preparar o bolsista/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 de cálculos ab initio e espectroscopia Raman e Infravermelho. Verificação de escrita através de relatórios diários de atividades e apresentação de seminários, dando-lhe suporte para seguir as atividades do cronograma sem impedimentos, minimizando as dificuldades encontradas.

Sanadas as lacunas iniciais na preparação específica para cada caso, o bolsista seguirá à constituição de sua responsabilidade no projeto de pesquisa, seguindo as etapas conforme indicada em cronograma estabelecido.

Habilidades Adquiridas

Domínio no uso de softwares no processo de caracterização de estruturas em física dos materiais, aplicação do método DFT na investigação vibracional de grupos moleculares, aplicar e discutir resultados da Física experimental do campo da espectroscopia Raman e no Infravermelho.

Referências

- [1] SALA, O. Fundamentos da espectroscopia Raman e no infravermelho. 2ª ed. São Paulo: Livraria da Física (2004)
- [2] LARKIN, P.(Peter J.). Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Elsevier Inc. (2011)
- [3] RAMAN, V.C. and KRISHNAN, K.S. Nature, 501, (1928)
- [4] OLIVEIRA, H. P. M.; et al., Quim. Nova, 29 (2), 277 (2006)
- [5] MUNDIN, K. C.; ELLIS, D. E., Brazilian Journal of Physics, 29 (1), 199 (1999)
- [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] 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	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								
SIMULAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL RESULTADOS TEÓRICOS					X	X	X	X				
TRATAMENTO ANALÍTICO DE RESULTADOS						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
20201011955 - DUÍLLIO LUIS LOPES DE OLIVEIRA	01/09/2022 07:41:40	01/09/2022	13/08/2023

PARECER CONSULTORES

Data/Hora	Parecer	Usuário
05/08/2022 15:47	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 DEFJJI, no Laboratório do Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional e, quando necessário, por videoconferência.", talvez não se enquadre nas metodologias.	(c322)
09/08/2022 14:37	Recomendado.	(c322)

HISTÓRICO DO PLANO DE TRABALHO

Data/Hora	Situação	Tipo de Bolsa	Usuário
09/08/2022 14:37	APROVADO	VOLUNTÁRIO (IC)	(c322)
08/08/2022 11:52	CORRIGIDO PELO ORIENTADOR	VOLUNTÁRIO (IC)	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)
05/08/2022 15:47	NECESSITA CORREÇÕES	VOLUNTÁRIO (IC)	(c322)
21/07/2022 17:28	CONCORRENDO A COTA	VOLUNTÁRIO (IC)	MINA DANAE FRANCO GOMES (88591590244)
28/06/2022 15:55	CONCORRENDO A COTA	VOLUNTÁRIO (IC)	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)