



### 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>	Continuidade de algum plano do ano anterior Iniciação Científica
<b>Status do Plano:</b>	EM ANDAMENTO
<b>Cota:</b>	PIBIC CNPq - 2022/2023 (01/09/2022 a 31/08/2023)
<b>Edital:</b>	(INSCRIÇÕES ENCERRADAS) EDITAL PIBIC - CICLO 2022/2023

#### CORPO DO PLANO DE TRABALHO

**Título**  
Uso do método DFT no estudo vibracional de grupos carboxílicos de óleo de castanha-do-Brasil

#### Introdução e Justificativa

Na caracterização por espectroscopia Raman, o estudo se baseia em verificar de imediato os modos vibracionais das moléculas na análise, obtida pela incidência de radiação de luz laser, promovendo uma perturbação no meio, cuja a resposta pode ser vista através das linhas de espectros que representa assinaturas vibracionais de grupos moleculares existentes [1-3]. Nessa abordagem uma conformação qualitativa, se pode indicar a presença de grupos carboxílicos ligados a ácidos graxos.

De forma a certificar a performance da prática 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, onde o estado do sistema pode ser especificado por através da estatística de Fermi-Dirac [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 [5-9].

#### Objetivos

O desenvolver habilidades e domínio na aplicação do método DFT na investigação vibracional de grupos moleculares.

Específicos:

Estudar fundamentos básicos do método DFT;

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 teórica na investigação vibracional de grupos moleculares

#### Metodologia

As atividades se baseiam em preparar o bolsista 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 aprendizagem de teorias da Física e etapas de caracterização de estruturas aplicando o método DFT.

#### 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							
	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
<b>ESTUDOS DIRECIONADOS A ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL</b>		X	X	X	X								
<b>ESTUDOS DIRECIONADOS À FÍSICA APLICADA E CÁLCULOS AB INITIO</b>		X	X	X	X								
<b>ETAPAS DE LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO E ESCRITA CIENTÍFICA</b>		X	X	X	X								
<b>COLETA, SEPARAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE (NOVAS) AMOSTRAS</b>				X	X								
<b>ESTUDO FÍSICO-QUÍMICO DAS AMOSTRAS</b>					X	X	X						
<b>SIMULAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL E ANÁLISE DE</b>						X	X	X	X	X			

Atividade	2022					2023							
	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
<b>RESULTADOS TEÓRICOS</b>													
<b>TRATAMENTO ANALÍTICO DE RESULTADOS TEÓRICOS</b>							X	X	X	X	X		
<b>PREPARAÇÃO DE RELATÓRIOS TÉCNICOS, ARTIGOS E RESUMOS PARA DIVULGAÇÃO EM PERIÓDICOS, TRABALHOS E CONGRESSOS CIENTÍFICOS</b>								X	X	X	X	X	X
<b>SUBMISSÃO DE TRABALHOS, APRESENTAÇÃO DE SEMINÁRIOS E PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS</b>										X	X	X	X

**HISTÓRICO DE BOLSISTAS**

Discente	Data de Indicação	Início	Fim
201912145 - ROBERTA CRISTINA LIMA DOS SANTOS	26/08/2022 08:49:08	26/08/2022	17/08/2023

**PARECER CONSULTORES**

Data/Hora	Parecer	Usuário
05/08/2022 15:45	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	A DEFINIR	(c322)
08/08/2022 11:53	CORRIGIDO PELO ORIENTADOR	A DEFINIR	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)
05/08/2022 15:45	NECESSITA CORREÇÕES	A DEFINIR	(c322)
21/07/2022 17:28	CONCORRENDO A COTA	A DEFINIR	MINA DANAE FRANCO GOMES (88591590244)
28/06/2022 15:53	CONCORRENDO A COTA	A DEFINIR	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)