



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
Discente:	20221013115 - MATHEUS TERUMITSU MARQUES OZAWA
Tipo de Bolsa:	VOLUNTÁRIO (IC)
Direcionamento(s) da bolsa:	Iniciação Científica
Status do Plano:	EM ANDAMENTO
Cota:	PIBIC CNPq - 2023/2024 (24/07/2023 a 31/08/2024)
Editais:	EDITAL PIBIC - CICLO 2023/2024

CORPO DO PLANO DE TRABALHO

Título	Espectroscopia Raman e no Infravermelho: fundamentos e perspectivas
---------------	---

Introdução e Justificativa

INTRODUÇÃO

As técnicas experimentais de caracterização espectroscopia Raman e no Infravermelho são complementares quanto à investigação dos chamados modos vibracionais das moléculas. Com natureza físicas distintas, mas que podem ser explicadas através das teorias básicas do eletromagnetismo e mecânica quântica, ambas as técnicas são essenciais para processos de caracterização de materiais das mais diversas naturezas. 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 [1-8]. 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 técnico 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 (sigma-pi), chamado conjugação. Uma série de componentes presentes nesses óleos são chamados de ácidos graxos, estruturas carbônicas ligadas a um grupo carboxila, cuja peculiaridade é explorada neste estudo através do conhecimento dos estados eletrônicos da molécula [9,10]. A proposta foca no conhecimento teórico-experimental a das espectroscopias Raman e no Infravermelho, estudando diretamente a natureza química de óleos da região Amazônica.

JUSTIFICATIVA

Formação de recursos humanos, proporcionando o aperfeiçoamento técnico-científico local.
Popularização da pesquisa científica através de fundamentos teóricos e práticos da espectroscopia vibracional Raman e no Infravermelho.

Objetivos

Geral:

Estudar fundamentos e aplicações da espectroscopia Raman e no Infravermelho: fundamentação.

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;

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

Metodologia

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.

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, no Infravermelho 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

Conhecimentos e poder de discussão em espectroscopia Raman e no Infravermelho e no uso de softwares no processo de caracterização e análise de dados na Física experimental e aplicada.

Referências

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

CRONOGRAMA DE ATIVIDADES														
Atividade	2023						2024							
	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
ESTUDOS DIRECIONADOS A ESPECTROSCOPIA RAMAN E NO INFRAVERMELHO			X	X	X	X	X							
ESTUDOS DIRECIONADOS À FÍSICA APLICADA E CÁLCULOS AB INITIO				X	X	X	X	X						
ETAPAS DE LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO E ESCRITA CIENTÍFICA					X	X	X	X	X					
COLETA, SEPARAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE (NOVAS) AMOSTRAS							X	X	X					
ETAPAS DE EXPERIMENTAÇÃO POR POR ESPECTROSCOPIA RAMAN							X	X	X					
SIMULAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL							X	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

HISTÓRICO DE BOLSISTAS

Discente	Data de Indicação	Início	Fim
20221013115 - MATHEUS TERUMITSU MARQUES OZAWA	21/08/2023 09:35:57	21/08/2023	31/08/2024

HISTÓRICO DO PLANO DE TRABALHO

Data/Hora	Situação	Tipo de Bolsa	Usuário
30/05/2023 10:29	CONCORRENDO A COTA	VOLUNTÁRIO (IC)	MINA DANAE FRANCO GOMES (88591590244)
15/05/2023 20:02	CONCORRENDO A COTA	VOLUNTÁRIO (IC)	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)