



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:	201912107 - ASAF RIBAS
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)
Edital:	EDITAL PIBIC - CICLO 2023/2024

CORPO DO PLANO DE TRABALHO

Título	Espectroscopia Raman e aplicações em óleos da região amazônica: fundamentos e perspectivas
---------------	--

Introdução e Justificativa

INTRODUÇÃO AO PROBLEMA

Constantemente utilizadas na identificação e caracterização de estruturas de moléculas e compostos, técnicas espectroscópicas são fundamentadas quando da interação entre radiação eletromagnética e matéria. Nesse caso, cada átomo e molécula absorve ou emite energia em uma determinada região do espectro eletromagnético, oferecendo informações sobre a composição química da amostra. Dentre essas técnicas, a espectroscopia Raman, é utilizada no estudo das transições vibracionais de moléculas e átomos, sendo assim uma técnica vibracional.

Dada que a espectroscopia Raman é uma técnica de espalhamento, ao incidir radiação sobre uma amostra, se pode esperar uma transição entre seus estados energéticos e tais transições podem ser definidas pela mudança na frequência da radiação incidente (luz monocromática) quando esta é espalhada por átomos ou moléculas. Assim, os fótons (da radiação) incidentes excitam a molécula em seu estado fundamental (ou já excitado), elevando-as para um estado virtual de energia (intermediário).

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 [1-7].

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 [8,9]. 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.

Este estudo busca compreender aspectos teóricos e práticos e da aplicabilidade da espectroscopia Raman como técnica físico-química de caracterização na investigação de óleos vegetais de origem amazônica.

JUSTIFICATIVA

Formação de recursos humanos, popularização da pesquisa científica através de fundamentos teóricos e práticos da espectroscopia Raman e diversificação dos processos físico-químicos de caracterização de materiais no cenário rondoniense e região Norte.

Objetivos

OBJETIVO(S)

Geral:

Estudar fundamentos da espectroscopia Raman e aplicações;
Desenvolver habilidades de caráter teórico e experimental na utilização da espectroscopia Raman.

Específicos:

Estudar fundamentos básicos, aplicações, tecnologias associadas e correlações com cálculos ab initio;
Estudar as características primárias da espectroscopia Raman em óleos vegetais de origem amazônica;
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

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 (LFA), no Laboratório do Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional (EMFC) e outros espaços físicos da UNIR-JP e também, através de videoconferência.

Durante os encontros, discente desenvolverá atividades propostas em conjunto com o orientador.

As atividades iniciais se baseiam em preparar o discente 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 discente seguirá à constituição de sua responsabilidade no projeto de pesquisa, seguindo as etapas conforme indicada em cronograma estabelecido.

Habilidades Adquiridas

Domínio na fundamentação teórica e discussão de resultados da espectroscopia Raman e quanto ao uso de softwares que envolvam processo de caracterização de materiais.

Referências

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[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] FUNASAKI, M.; et. al., Quim. Nova, 39 (2), 194-209, (2016)
 [9] 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 VIBRACIONAL			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 ETAPAS DE EXPERIMENTAÇÃO POR POR ESPECTROSCOPIA RAMAN					X	X	X	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	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	17/08/2023 11:41:20	17/08/2023	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)
08/05/2023 15:42	CONCORRENDO A COTA	VOLUNTÁRIO (IC)	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)