



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:	20201011955 - DUÍLLIO LUIS LOPES DE OLIVEIRA
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
Fundamentos da espectroscopia Raman e análise conformação via método DFT

Introdução e Justificativa

INTRODUÇÃO AO PROBLEMA

A espectroscopia Raman trata-se uma técnica fotônica utilizada na caracterização de materiais. O princípio clássico da técnica está ligada ao comportamento inelástico da radiação quando em contato com uma amostra.

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 vários grupos funcionais das amostras em estudo.

Aliado nos processos de caracterização de materiais, as rotinas computacionais são incluídas de maneira satisfatória e de forma imprescindível são amplamente utilizadas nos mais diversos campos de estudos. Com isso, a incorporação de métodos como o DFT (Density Functional Theory), pode auxiliar etapas de caracterização por espectroscopia Raman dos mais diversos materiais. 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 [4-8].

Na etapa computacional, 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 [9].

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.

A análise conformacional, é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional para moléculas em estudo, sob parâmetros pré-estabelecidos. O mesmo amplia a confiança das características nas etapas experimentais da espectroscopia Raman.

JUSTIFICATIVA

Ampliar a rotina de estudos da espectroscopia Raman e o uso de cálculos ab-initio como o método DFT no âmbito da UNIR e no estado de Rondônia. Dar subsídio à formação de recursos humanos e a popularização da pesquisa científica através de técnicas experimentais e teóricas de alta relevância na caracterização de materiais. 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

OBJETIVO(S)

Geral:

Estudar fundamentos da espectroscopia Raman e aplicações.

Específicos:

Estudar fundamentos básicos da análise conformacional via método DFT.;

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

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 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 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 discente seguirá à constituição de sua responsabilidade no projeto de pesquisa, seguindo as etapas conforme indicada em cronograma estabelecido.

Habilidades Adquiridas

Domínio de conteúdo teórico em espectroscopia Raman no uso de softwares no processo de caracterização de estruturas em física dos materiais e utilização do método DFT na investigação vibracional de diversos grupos moleculares.

Referências**8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [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] MUNDIN, K. C.; ELLIS, D. E., Brazilian Journal of Physics, 29 (1), 199 (1999)
 [5] J.L.B. Faria, Tese de Doutorado, UFC - Ceará (2003)
 [6] Q.S. Martins, Tese de doutorado, UFMT – Cuiabá (2020)
 [7] 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).
 [8] FAZZIO, A.; VIANNA, J. D. M.; CANUTO, S. Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional. Livraria da Física, SP, (2004)
 [9] OLIVEIRA, H. P. M.; et al., Quim. Nova, 29 (2), 277 (2006)

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					
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

HISTÓRICO DE BOLSISTAS

Discente	Data de Indicação	Início	Fim
20201011955 - DUÍLLIO LUIS LOPES DE OLIVEIRA	13/08/2023 14:06:23	13/08/2023	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 15:47	CONCORRENDO A COTA	VOLUNTÁRIO (IC)	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)