



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:	201912145 - ROBERTA CRISTINA LIMA DOS SANTOS
Tipo de Bolsa:	PIBIC UNIR (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	Caracterização por espectroscopia Raman e método DFT: fundamentos e aplicações
---------------	--

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, 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].

Do ponto de vista quântico, a fundamentação de baseia em 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]. Este trabalho busca conectar os fundamentos teóricos e práticos do estudo da espectroscopia Raman quando aliada a cálculos ab-initio no processo de caracterização de materiais.

JUSTIFICATIVA

Aprimoramento no estudo da espectroscopia Raman e cálculos ab-initio. Dar subsídio a formação de recursos humanos ligados a etapas experimentais de caracterização de materiais. 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.

Objetivos

OBJETIVO(S)

Geral:
Conhecer aspectos teóricos e práticos no estudo e aplicação da espectroscopia Raman e uso de cálculos ab-initio.

Específicos:
Estudar fundamentos clássicos e quânticos da espectroscopia Raman;
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;

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 DEFJJI, 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

Conhecimento teórico e prático no processo de caracterização de materiais por espectroscopia Raman e cálculos ab-initio e domínio no uso de softwares no processo de aprendizagem de teorias da Física e etapas de caracterização de estruturas aplicando o método DFT.

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] 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	2023						2024							
	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
ESTUDOS DIRECIONADOS A ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E CÁLCULOS AB-INITIO			X	X	X	X	X	X						
ETAPAS DE LEVANTAMENTO BIBLIOGRÁFICO E ESCRITA CIENTÍFICA COLETA, SEPARAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE (NOVAS) AMOSTRAS					X	X	X	X	X					
ETAPAS DE EXPERIMENTAÇÃO POR POR ESPECTROSCOPIA RAMAN 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
201912145 - ROBERTA CRISTINA LIMA DOS SANTOS	17/08/2023 11:34:39	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	A DEFINIR	MINA DANAE FRANCO GOMES (88591590244)
08/05/2023 15:52	CONCORRENDO A COTA	A DEFINIR	QUESLE DA SILVA MARTINS (02471015328)