

PORTAL DO DOCENTE > RELATÓRIO FINAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Discente: 201912107 - ASAF RIBAS**Plano:** **Estudo vibracional de espectroscopia Raman e Infravermelho aplicados a óleos naturais da Amazônia****Orientador:** QUESLE DA SILVA MARTINS**Data de Envio:** 15/08/2023 20:11**Tipo de Pesquisa:** Pesquisa Científica**Progresso da Pesquisa:** Em andamento**OBJETIVOS DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL DA AGENDA 2030 DA ONU**

- Promover o crescimento econômico sustentado, inclusivo e sustentável, emprego pleno e produtivo e trabalho decente para todos.
- Reduzir a desigualdade dentro dos países e entre eles.
- Proteger, recuperar e promover o uso sustentável dos ecossistemas terrestres, gerir de forma sustentável as florestas, combater a desertificação, deter e reverter a degradação da terra e deter a perda de biodiversidade.
- Promover sociedades pacíficas e inclusivas para o desenvolvimento sustentável, proporcionar o acesso à justiça para todos e construir instituições eficazes, responsáveis e inclusivas em todos os níveis

RESUMO**Resumo:**

A Amazônia abriga 40 mil+ espécies, poucas experimentadas. Estudos técnicos e conhecimento das propriedades físico-químicas aplicações otimizadas. Peculiaridades exploradas via análise eletrônica molecular. Os componentes incluem hidrocarbonetos terpênicos, álcoois, aldeídos, cetonas, fenóis, ésteres, éteres, peróxidos, furanos, orgânicos, lactonas e compostos. Espectroscopia Raman e Infravermelho prova emissão eletrônica e absorção de radiação eletromagnética, convertida em energia vibracional. Óleos naturais considerados, identificando padrões espectrais como assinaturas moleculares. Espectroscopia Raman, eficiente e sem tratamento prévio, e Infravermelho, difundido, complementam, investigando vibrações moleculares. Resumindo, estudos aprofundados maximizam aplicações da rica flora amazônica.

Palavras-chave:

Espectroscopia Raman, Teoria Funcional Densidade

ABSTRACT**Title:**

Vibrational study of Raman and Infrared spectroscopy applied to natural oils from the Amazon

Abstract:

The Amazon is home to 40,000+ species, few of which have been tried. Technical studies and knowledge of physicochemical properties optimized applications. Peculiarities explored via molecular electronic analysis. Components include terpene hydrocarbons, alcohols, aldehydes, ketones, phenols, esters, ethers, peroxides, furans, organics, lactones, and compounds. Raman and Infrared spectroscopy prove electronic emission and absorption of electromagnetic radiation, converted into vibrational energy. Natural oils considered, identifying spectral patterns as molecular signatures. Raman spectroscopy, efficient and without previous treatment, and Infrared, diffused, complement, investigating molecular vibrations. In short, in-depth studies maximize applications of the rich Amazonian flora.

Keywords:

Raman Spectroscopy, Functional Density Theory

CORPO DO RELATÓRIO**Introdução**

A Amazônia abriga uma imensa variedade de mais de 40 mil espécies de plantas, porém apenas algumas dezenas foram devidamente estudadas e compreendidas. Para otimizar suas aplicações, é essencial realizar estudos técnicos aprofundados e adquirir um conhecimento mínimo sobre suas propriedades físico-químicas. As peculiaridades dessas plantas podem ser exploradas através da análise dos estados eletrônicos das mensagens. Entre os componentes identificados, destacam-se hidrocarbonetos terpênicos, álcoois, aldeídos, cetonas, fenóis, ésteres, éteres, peróxidos, furanos, proteínas, lactonas e compostos com enxofre. As técnicas de espectroscopia Raman e no Infravermelho desvendam a relação entre a emissão de elétrons e os níveis eletrônicos, diferenciados pelas regras de seleção espectroscópicas. Quando a energia é aplicada a uma amostra, ocorre a absorção de radiação eletromagnética, transformada em energia vibracional nas emissões. Essas técnicas são aplicadas no estudo de óleos naturais, permitindo identificar padrões espectrais que funcionam como assinaturas moleculares. A espectroscopia Raman, especialmente, se destaca pela eficiência ao evitar tratamentos procedimentos nas Exceções. Isso possibilita análises imediatas após triagem, preservando as características originais e obtendo sinais espectrais mais puros. A espectroscopia no Infravermelho, amplamente difundida, complementa a abordagem ao investigar as vibrações moleculares. Em resumo, a riqueza da flora amazônica requer estudos aprofundados para maximizar suas aplicações. A análise dos estados eletrônicos moleculares, auxiliada por técnicas de espectroscopia tecnológica, revela padrões característicos e únicos. Essa abordagem contribui para o entendimento das propriedades das plantas, impulsionando a exploração sustentável e a conservação da biodiversidade amazônica.

Metodologia

O projeto é executado em regime de trabalho de 20 (vinte) horas semanais, em encontros semanais/mensais em turno contrário do horário de aula. Durante os encontros, sobre a orientação do orientador, o bolsista desenvolve atividades propostas e em conjunto com o orientador. As atividades iniciais foram caracterizadas por conceituação das 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.

Resultados e Discussões

O processo de seleção e análise da amostra via método ab initio DFT, foi apresentado, assim como seus parâmetros específicos para a investigação em estruturas moleculares de ácidos graxos através do uso deste método (AB INITIO, DFT) via Software Gaussian 09 e Gaussview 06, realizamos a análise teórica dos espectros Raman para as estruturas moleculares: eicosapentaenóico (EPA), docosahexaenóico (DHA), alfa-linolênico ou linolênico (ALA), ácido oleico entre outras moléculas, os dados foram cruzados com resposta da espectroscopia Raman em óleo de avestruz (OA), os resultados foram submetidos para publicação na revista Scientia Amazonia, e revista mexicana de física.

Conclusões

A pesquisa colaborou para evolução do discente no âmbito de formação acadêmica e aprofundamento em teorias específicas da física que em um curso básico o mesmo não teria a oportunidade de conhecer, o trabalho foi realizado conforme o proposto pelo plano de trabalho e os resultados podem ser conferidos via trabalhos submetidos e aceito para publicação nas revistas: Scientia Amazonia e Revista Mexicana de Física.

Trabalhos publicados: Método DFT na investigação do Butano (C₄H₁₀): Sua conformação de energia, modos vibracionais e espectro Raman teórico, 2023 VOLUME 12, NÚMERO 1 (Scientia Amazonia), DFT method in ALA, DHA and EPA molecules in Raman vibrational analysis of ostrich oil from the Amazon, 2022, VOLUME 11, NÚMERO 2 (Scientia Amazonia). Trabalho aceito para publicação: Raman and FTIR spectroscopy experimental and theoretical in magnetic nanoemulsion from Carapa Guianensis Aublet. (Mexicana de Física)

Referências

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

PARECER (EMITIDO EM 17/08/2023 11:39)

Excelente disponibilidade para o aprendizado.

[<< Voltar](#)

[Portal do Docente](#)

SIGAA | Diretoria de Tecnologia da Informação - (69) 2182-2176 | Copyright © 2006-2023 - UNIR - SigBoss2.unir.br.SigBoss2 - v4.10.6