

FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE RONDÔNIA

RELATÓRIO FINAL
Programa Institucional de Bolsas de Iniciação
Científica - PIBIC 2021/2022

ESTUDO DA ESPECTROSCOPIA RAMAN E INFRAVERMELHO APLICADOS A ÓLEOS NATURAIS DA AMAZÔNIA: SÍNTESE DE GRUPOS CARBOXÍLICOS

Discente: Asaf Ribas 

Orientador: Prof. Dr. Quesle da Silva Martins 

1. IDENTIFICAÇÃO

PROJETO: CÁLCULOS AB INITIO EM GRUPOS CARBOXÍLICOS NO PROCESSO DE CARACTERIZAÇÃO DE ÓLEOS NATURAIS AMAZÔNICOS POR ESPECTROSCOPIA RAMAN E INFRAVERMELHO

DISCENTE: 201912107 - ASAF RIBAS

CURSO: LIC. FÍSICA

ORIENTADOR (A): QUESLE DA SILVA MARTINS

DEPARTAMENTO: DEFIJI - DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE JI-PARANÁ

CENTRO/LOCAL: CAMPUS JI-PARANÁ

EDITAL: EDITAL 2021/PIBIC/DPESQ/PROPESQ

COTA: PIBIC-CNPQ 2021/2022 (20/07/2021 a 31/08/2022)

2. RESUMO DO RELATÓRIO

Este relatório parcial apresenta a relevância da pesquisa no tópico introdução geral, abordando os poucos estudos realizados em óleos vegetais na região amazônica por meio da espectroscopia Raman e IR. É compartilhado também os objetivos gerais e específicos da pesquisa, assim como a metodologia e cronograma em tempo real de execução, o presente relatório também aborda as atividades relevantes desenvolvidas pelo bolsista como: participação em eventos e submissão de trabalhos para publicação em revistas eletrônicas.

3. INTRODUÇÃO GERAL (relevância do trabalho)

Na região Amazônica 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. Os óleos de origem vegetal podem apresentar compostos voláteis que têm como característica uma intercalação das ligações simples e duplas (σ - π), chamado conjugação. Uma série de componentes presentes nesses óleos são chamados de ácidos graxos, estruturas carbônicas ligadas a um grupo carboxila. Esta peculiaridade pode ser estudada através do conhecimento dos estados eletrônicos da molécula. O estudo por espectroscopia Raman e no Infravermelho verifica como a emissão dos elétrons depende dos níveis eletrônicos envolvidos no processo, diferenciados pelas regras de seleção espectroscópicas. 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. Justifica-se tal iniciativa buscando a diversificação para o desenvolvimento da ciência na região Norte, especificamente no estado de Rondônia, dando subsídio a formação de recursos humanos, proporcionando o aperfeiçoamento técnico-científico local e ainda para popularização da pesquisa científica através de fundamentos teóricos e práticos da espectroscopia vibracional Raman e no Infravermelho, técnicas experimentais e teóricas de alta relevância na caracterização de materiais, que possibilitará a implementação de conhecimento científico acerca de produtos naturais regionais, por fim, agregando valores a produtos regionais.

4. OBJETIVOS

4.1 Geral: Estudar a espectroscopia Raman e no Infravermelho; fundamentação teórica e experimentação; Desenvolver habilidades no processo de análise experimental e investigação vibracional de grupos moleculares;

4.2 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 especializados, softwares etc; Introduzir conceitos básicos da Física experimental e conceitos de técnicas de caracterização de materiais e aplicações.

5. METODOLOGIA

5.1 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.

5.2 Sobre orientação do orientador o bolsista desenvolveu habilidades com os seguintes softwares:

- Gaussian 9
- Origin 2018
- Gaussview 6

6. CRONOGRAMA DE EXECUÇÃO

Tabela 1: Cronograma de execução em tempo real das atividades propostas pelo plano de trabalho: Estudo da espectroscopia Raman e Infravermelho aplicados a óleos naturais da Amazônia: síntese de grupos carboxílicos, PIBIC 2021-2022.

Atividades	2021						2022							
	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago
LEVANTAMENTO	X	X	X											

BIBLIOGRÁFICO														
COLETA, SEPARAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE AMOSTRA(S)			X	X	X				X	X				
ESTUDO FÍSICO-QUÍMICO DA(S) AMOSTRA(S)			X	X	X					X	X			
ESPECTROSCOPIA RAMAN/INFRAVERMELHO					X	X	X			X	X			
ANÁLISE DE RESULTADOS					X	X	X	X						
PARTICIPAÇÃO EM EVENTO CIENTÍFICO					X					x	x			
PREPARAÇÃO DE ARTIGOS E RESUMOS PARA DIVULGAÇÃO EM PERIÓDICOS, TRABALHOS E CONGRESSOS CIENTÍFICOS						X	X	X						
SUBMISSÃO DE TRABALHOS									X					

7. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A pesquisa segue em fase de execução conforme a tabela 1 demonstra. O orientador demonstrou como realiza-se o processo de seleção e análise da amostra via método ab initio DFT, a onde foi apresentado os 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), os dados foram cruzados com resposta da espectroscopia Raman em óleo de avestruz (OA), os resultados foram submetidos e aceito para publicação na revista Scientia Amazonia com previsão para publicação no décimo primeiro periódico em seu volume 02. No presente momento estamos analisando o óleo da castanha do Brasil.

8. ATIVIDADES RELEVANTES DESENVOLVIDAS PELO BOLSISTA

- Artigo aceito para publicação, intitulado: DFT method in ALA, DHA and EPA molecules in Raman vibrational analysis of ostrich oil from the Amazon, através da revista eletrônica Scientia Amazonia, conforme anexo A.1: <https://scientia-amazonia.org/index.php/volume-publicado/>, em Anexo A.
- Participação na Escola Matogrossense de Física 2021, com apresentação de trabalho, link da apresentação disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=aiOyhBlj8NM&t=827s> e anexo B. Observação: Por motivos desconhecidos a apresentação não foi transmitida em sua totalidade.
- Participação no evento X Encontro De Física De Rondônia E Xi Mostra De Trabalhos Acadêmicos Do Curso De Física - V Workshop Do Mnpef -P40-Unir, em Anexo C.
- Participou do evento: XIX Encontro de Pesquisa em Ensino de Física 2022, com o link do evento disponível em: <http://www1.fisica.org.br/~epef/xix/index.php> certificado em Anexo D.
- Participou do evento: XXII Escola de Verão Jorge André Swieca de Física Nuclear Experimental. 2022. (Oficina). Link do evento: <http://www1.fisica.org.br/~evjasfne/xxii/index.php/pt/escola-portugues>, certificado ainda não disponível até a data da entrega do relatório, como comprovação em anexo E, cópia do email de aceite ao evento.
- Leitura do Livro: Wiley, Modern Raman Spectroscopy: A Practical Approach, 2ª edição (29 abril 2019).
- Leitura do Livro: Sala Oswaldo. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. Editora Unesp; 2ª edição (28 novembro 2011)
- Leitura do Livro: Alves Bueno, Willie. Manual de Espectroscopia Vibracional. Editora Mcgrawhill; (1989)
- Leitura do Livro: Larkin, Peter. Infrared and Raman Spectroscopy: Principles and Spectral Interpretation. Editora Elsevier; 1ª edição (20 junho 2011).
- Participação de reuniões em grupo para apresentar resultados e discutir novas atividades, como pode ser visto na figura 1 e 2.

Figura 1: Prof. Dr. Quesle; Discente bolsista Asaf Ribas; Discente voluntária Roberta Cristina em reunião do PIBIC.



Figura 2: Discente bolsista Asaf Ribas, apresentando relatório de atividades propostas pelo orientador em reunião PIBIC.



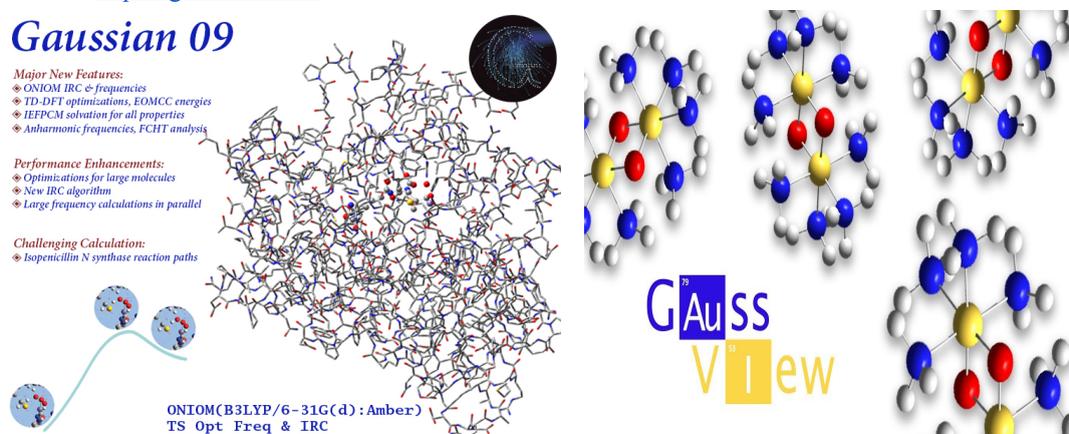
- **Estudo experimental e teórico dos ácidos presentes na amostra do óleo da castanha do Brasil. Amostra essa cedida pela empresa Inovam Brasil, como mostra a figura 3.**

Figura 3: Logo marca Inovam Brasil e produto finalizado óleo da castanha do Brasil, a empresa cedeu amostra do óleo para estudos de espectroscopia vibracional Raman e Infravermelho.



- **Utilização dos Softwares: Gaussian 09 e Gaussview 06, para estudo do método ab initio DFT - Teoria Funcional Densidade, com esses softwares é feita a análise vibracional teórica da amostra via os espectros Raman e IR, podendo detectar os modos vibracionais das mesmas assim como extrair sua assinatura digital. Figura 4.**

Figura 4: Programas computacionais: Gaussian 09 e Gaussview 06 - utilizados para estudo de métodos Ab Initios. Fonte: <https://gaussian.com/>

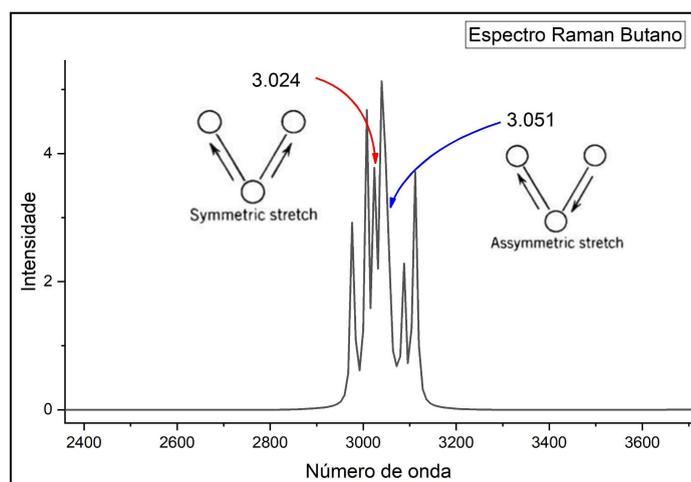


- **Utilização do Software: Origin 2018 Graphing & Analysis, o mesmo possibilita organizar os espectros obtidos via Gaussian 09, podendo anexar informações complementares de suma importância, como por exemplo o número do comprimento de onda de um certo pico, como mostra a figura 5 e 6.**

Figura 5: Programas computacionais: Gaussian 09 e Gaussview 06 - utilizados para estudo de métodos Ab Initios. Fonte: <https://www.originlab.com/2018>

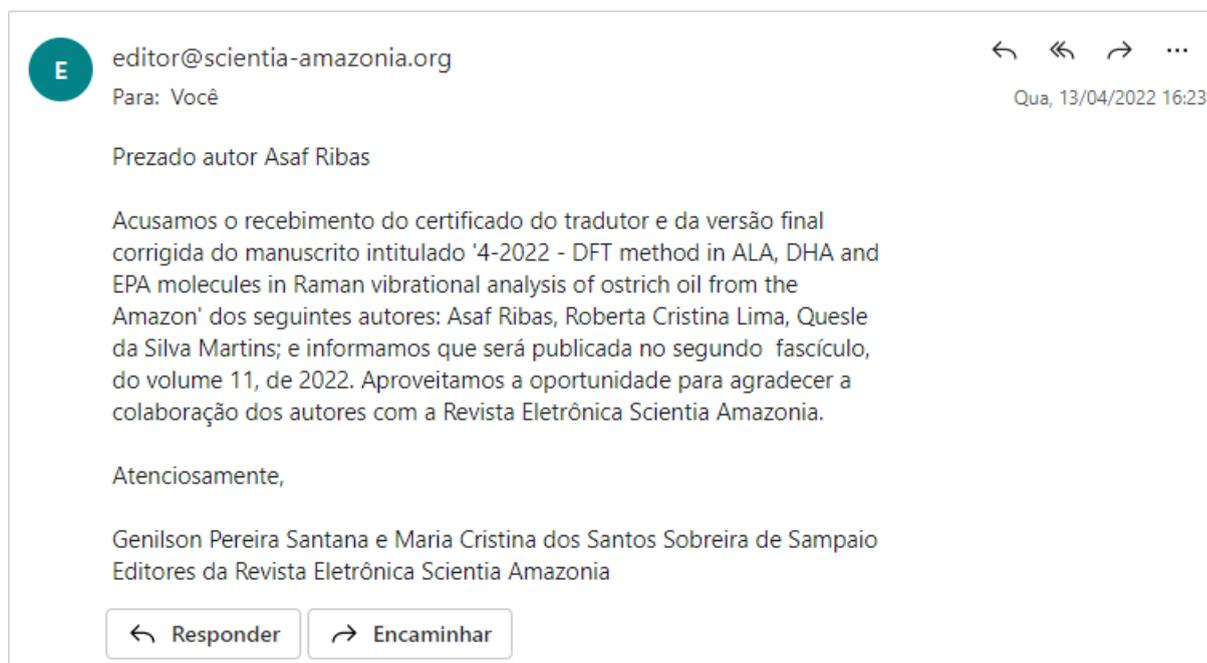


Figura 6: Software Origin 2018 - utilizado para anexar número do comprimento de onda no espectro Raman.
Fonte: Autor.



ANEXOS

ANEXO A - Resposta de aceite do artigo submetido para publicação intitulado: DFT method in ALA, DHA and EPA molecules in Raman vibrational analysis of ostrich oil from the Amazon.



ANEXO B - Certificado de apresentação de trabalho no evento Escola Matogrossense de Física 2021.



ANEXO C - Certificado de participação no evento, X Encontro De Física De Rondônia E Xi Mostra De Trabalhos Acadêmicos Do Curso De Física - V Workshop Do Mnpef -P40-Unir.

14/07/2022 12:53

SEI/UNIR - 1030353 - Certificado



MINISTERIO DA EDUCAÇÃO
FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE RONDÔNIA
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE FÍSICA - PORTO VELHO

CERTIFICADO



Certificamos que **Asaf Ribas**, participou do evento **X ENCONTRO DE FÍSICA DE RONDÔNIA E XI MOSTRA DE TRABALHOS ACADÊMICOS DO CURSO DE FÍSICA - V WORKSHOP DO MNPEF -P40-UNIR** realizado entre os dias 13 a 15 de novembro de 2021, na cidade de Porto Velho - RO, Junto a Universidade Federal de Rondônia, na função de Membro de Equipe, contabilizando carga horária total de **30 horas**.

Porto Velho, 11 de dezembro de 2021.



Documento assinado eletronicamente por **JUDES GONCALVES DOS SANTOS, Presidente da Comissão**, em 14/07/2022, às 13:53, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.unir.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1030353** e o código CRC **B4231286**.

Referência: Processo nº 23118.008298/2021-17

SEI nº 1030353

ANEXO D - Certificado de participação no evento, XIX Encontro de Pesquisa em Ensino de Física, realizado de 15 a 19 de agosto de 2022 em OnLine, Brasil.



**XIX Encontro de Pesquisa
em Ensino de Física**
15 a 19 de agosto de 2022 - Online

CERTIFICADO

O Comitê Organizador certifica que ASAF RIBAS participou do XIX Encontro de Pesquisa em Ensino de Física, realizado de 15 a 19 de agosto de 2022 em OnLine, Brasil.

OnLine, 19 de agosto de 2022



235-398

Marina Valentim Bana
Marina Valentim
Coordenadora Geral



SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

ANEXO D - Certificado de participação no evento, XXII Escola de Verão Jorge André Swieca de Física Nuclear Experimental. 2022. (Oficina).

XXII Escola de Verão Jorge André Swieca de Física Nuclear Experimental

25 de julho a 05 de agosto de 2022

CERTIFICADO

O Comitê Organizador certifica que ASAF RIBAS participou da XXII Escola de Verão Jorge André Swieca de Física Nuclear Experimental, realizada de 25 de julho a 05 de agosto de 2022 em São Paulo, SP, Brasil.

São Paulo, 05 de agosto de 2022



237-17

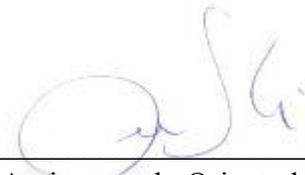

Beatriz Mattos
Secretária Executiva da
Sociedade Brasileira de Física



9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] FUNASAKI, M.; et. al., Quim. Nova, 39 (2), 194-209, (2016)
- [2] RADÜNZ, 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)

Ji-Paraná, 25 de agosto de 2022.



Assinatura do Orientador



Assinatura do Aluno