



## CRIAÇÃO DE UM REPOSITÓRIO DE ESPECTROS RAMAN DE ESTRUTURAS DE CARBONO

### PROJETO VISTA

Autores: Anderson Pastore Rizzi, André Luis Martinotto, Cláudio Antônio Perottoni

### INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

O carbono é um elemento químico capaz de formar diversas estruturas com diferentes propriedades físicas e químicas devido aos variados arranjos espaciais que os átomos desse elemento podem assumir [1].

A espectroscopia Raman é uma técnica que pode ser utilizada para identificar essas estruturas mediante a comparação do espectro Raman (cujos picos correspondem a vibrações específicas dessas estruturas [1]) com padrões de referência. Como este processo de comparação é lento, propõe-se o uso de recursos computacionais para gerar os espectros Raman de referência e proceder à comparação com resultados experimentais, visando a identificação das estruturas responsáveis por estes últimos.

Nesse contexto, este trabalho tem como **objetivos**:

- Calcular os espectros Raman das estruturas de carbono da SACADA (*SAmara Carbon Allotrope Database*) [2].
- Armazenar esses espectros em um banco de dados e disponibilizá-los gratuitamente através de um *website*.
- Desenvolver um mecanismo de comparação entre espectros obtidos por usuários com os espectros armazenados na base de dados criada.

### METODOLOGIA

A Figura 1 apresenta um fluxograma com as etapas realizadas. Inicialmente, efetuou-se o *download* de todas as estruturas da SACADA através de um programa desenvolvido em Python. Em seguida, as estruturas são otimizadas e os espectros Raman obtidos por meio de cálculos de primeiros princípios (*ab initio*). Os cálculos são baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e realizados utilizando o *software* CRYSTAL17 [3]. Os espectros estão sendo armazenados em uma base de dados não relacional criada a partir do MongoDB [4] e serão disponibilizados através de um *website* desenvolvido com o *framework web* Django [5]. Por fim, um sistema de busca está sendo criado para permitir a comparação entre espectros Raman obtidos experimentalmente por usuários e os espectros já existentes na base de dados.

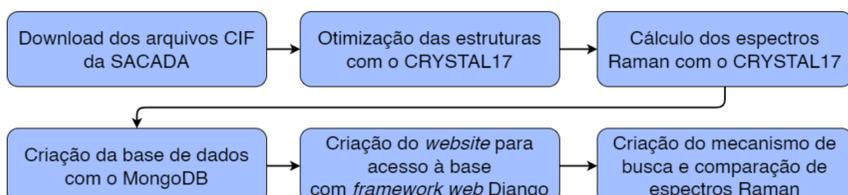


Figura 1 – Fluxograma das etapas do trabalho

### RESULTADOS

Os espectros Raman de algumas estruturas de carbono, incluindo o do diamante (Figura 2), já foram calculados e estão sendo comparados com resultados experimentais. Os espectros das demais estruturas continuam sendo calculados.

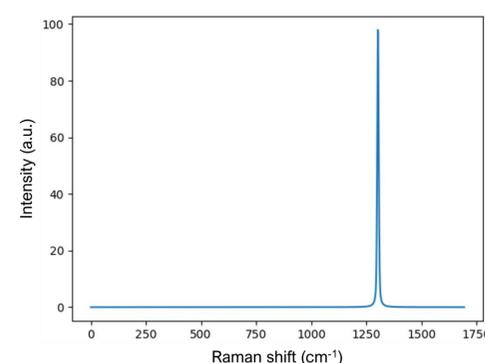


Figura 2 – Espectro Raman do diamante

Em paralelo, está sendo criada a base de dados e a interface de consulta, representada na Figura 3.

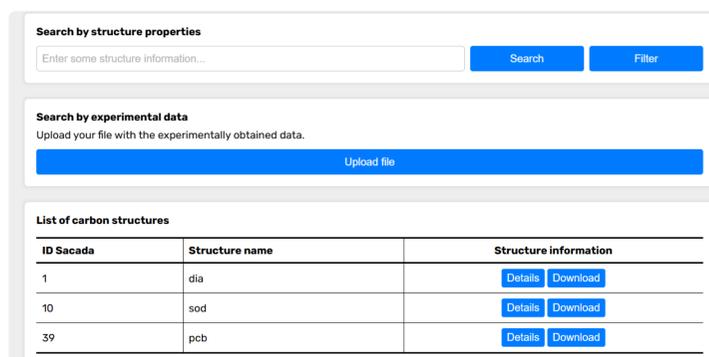


Figura 3 – Interface de consulta da base de dados

### CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os espectros Raman obtidos computacionalmente estão de acordo com aqueles obtidos experimentalmente, reforçando a confiança na qualidade dos espectros simulados para estruturas hipotéticas de carbono, cuja descoberta auxiliada por este sistema constitui a principal motivação para este trabalho. O *website* que fornecerá acesso a estes dados continua em desenvolvimento.

### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] PIERSON, H. O. Handbook of carbon, graphite, diamonds and fullerenes: processing, properties and applications. Park Ridge, New Jersey, USA: Noyes Publications, 1993.
- [2] HOFFMAN R. *et al.* Homo Citans and Carbon Allotropes: For an Ethics of Citation. *Angewandte Chemie International Edition*, v. 55, p. 10962–10976, 2016.
- [3] DOVESI R. *et al.* CRYSTAL17 User's Manual. 20 abr. 2018. Disponível em: <<https://www.crystal.unito.it/include/manuals/crystal17.pdf>>. Acesso em: 18 jun. 2024.
- [4] MongoDB. Disponível em: <<https://www.mongodb.com>>. Acesso em: 18 jun. 2024.
- [5] Django. Disponível em: <<https://www.djangoproject.com>>. Acesso em: 18 jun. 2024.