



PROBIC-FAPERGS

## DESENVOLVIMENTO DE UMA BASE DE DADOS DE ESPECTROS RAMAN DE ESTRUTURAS DE CARBONO PROJETO VISTA

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

### INTRODUÇÃO E OBJETIVO

O carbono é um elemento químico capaz de formar diversas estruturas com diferentes propriedades físicas e químicas devido aos numerosos arranjos espaciais que os átomos desse elemento podem assumir [1]. A espectroscopia Raman é uma técnica muito adequada para a obtenção de informações acerca destas estruturas, possibilitando a sua identificação, que é realizada através da comparação dos espectros Raman com padrões de referência conhecidos [1], normalmente armazenados em bancos de dados. A identificação de novos materiais é limitada, portanto, à existência de bases de dados com espectros Raman simulados.

Nesse contexto, este trabalho teve como objetivos:

1. Calcular os espectros Raman das 1635 estruturas de carbono da SACADA (*Samara Carbon Allotrope Database*) [2];
2. Armazenar esses espectros em um banco de dados e disponibilizá-los gratuitamente através de um *website*;
3. Desenvolver um mecanismo de comparação entre espectros obtidos pelos usuários experimentalmente com os espectros armazenados na base de dados criada.

### MATERIAL E MÉTODOS

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 foram otimizadas e os espectros Raman obtidos por meio de cálculos de primeiros princípios (*ab initio*) baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), realizados utilizando o *software* CRYSTAL17 [3]. Os espectros foram armazenados em uma base de dados não relacional implementada com o MongoDB [4] e foram disponibilizados através de um *website* desenvolvido com o *framework web* Blazor [5]. Por fim, um sistema de busca está sendo criado para permitir a comparação entre espectros Raman obtidos experimentalmente pelos usuários e os espectros já existentes na base de dados.

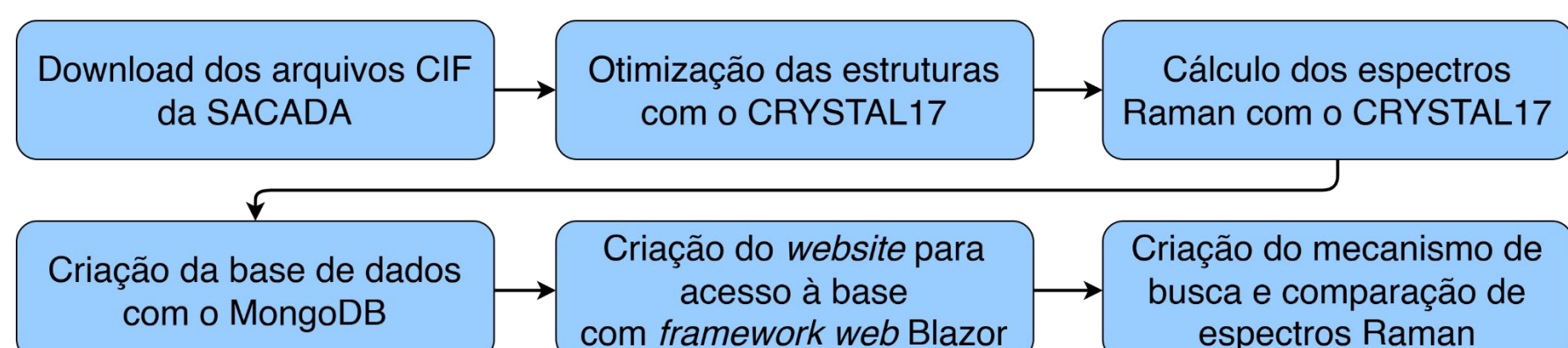


Figura 1 - Fluxograma das etapas do trabalho

### RESULTADOS

Os espectros Raman gerados computacionalmente foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura, apresentando boa concordância nas posições e intensidades dos picos vibracionais. Essa concordância é exemplificada na Figura 2, no caso do diamante, onde os resultados obtidos com a DFT são comparados com dados experimentais obtidos do The RRUFF™ Project.

### RESULTADOS

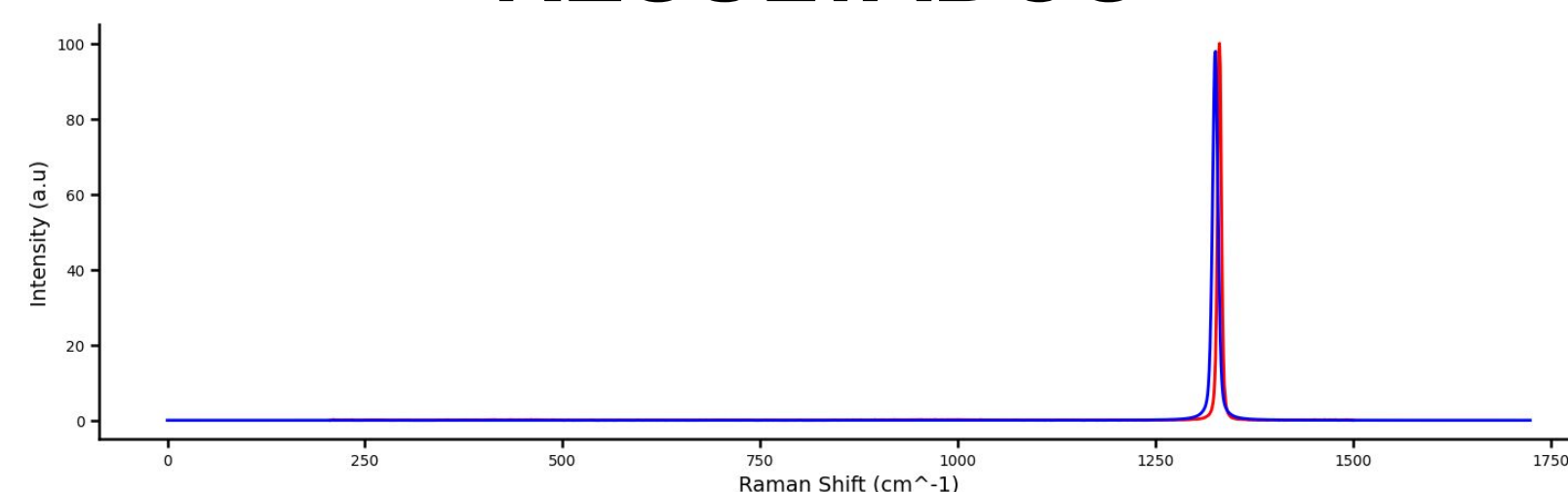


Figura 2 - Espectro simulado (azul) e experimental (vermelho) comparados

Conjuntamente, desenvolveu-se um ambiente computacional para o armazenamento, visualização e análise de espectros Raman de estruturas alotrópicas de carbono. Esse ambiente é composto por: um banco de dados não relacional; um *script* em Python, de uso restrito aos autores, responsável pelo inserção dos dados no sistema; e uma plataforma *web* de acesso público e gratuito. A plataforma permite visualizar os espectros, as estruturas tridimensionais e seus modos vibracionais. A Figura 3 ilustra a lista de estruturas disponíveis em forma de tabela (3a) e em grade (3b).

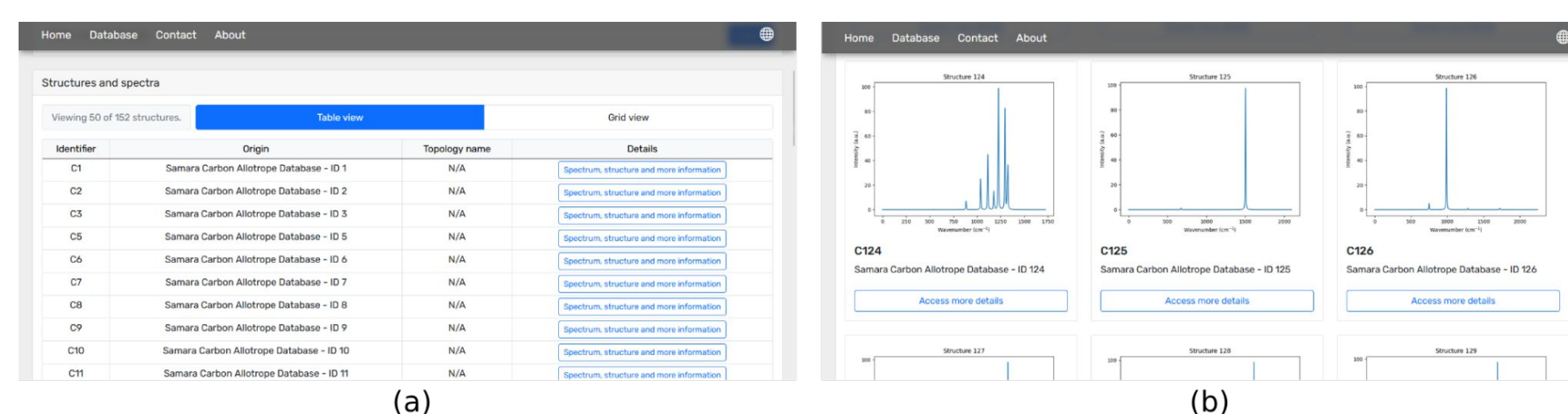


Figura 3 - Visualização em tabela (a) e em grade (b) dos dados no *website*

### CONSIDERAÇÕES FINAIS

A plataforma desenvolvida reúne espectros Raman simulados em um ambiente *web* acessível e gratuito, contribuindo para a identificação de estruturas alotrópicas de carbono, especialmente quando dados experimentais são escassos. A validação dos espectros com dados da literatura confirma a confiabilidade dos métodos empregados. A ferramenta segue em desenvolvimento, com a incorporação de recursos que permitem a comparação entre espectros Raman fornecidos pelos usuários e os simulados presentes na base de dados.

### 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: 23 jun. 2025.
- [4] MongoDB. Disponível em: <https://www.mongodb.com/>. Acesso em: 23 jun. 2025.
- [5] Blazor. Disponível em: <https://dotnet.microsoft.com/pt-br/apps/aspnet/web-apps/blazor>. Acesso em: 23 jun. 2025.