



**XXXII Encontro
de Jovens
Pesquisadores**

e XIV Mostra Acadêmica
de Inovação e Tecnologia

 **UCS**



CRIAÇÃO DE UM REPOSITÓRIO DE ESPECTROS RAMAN DE ESTRUTURAS DE CARBONO

Anderson Pastore Rizzi (PIBIC-CNPq), Cláudio Antônio Perottoni, André Luis Martinotto (Orientador(a))

O carbono é um elemento químico capaz de formar uma grande variedade de estruturas com diferentes propriedades físicas e químicas. Essas propriedades são determinadas pelos diversos arranjos espaciais que os átomos de carbono podem assumir devido às diferentes hibridizações. A espectroscopia Raman é uma técnica que pode ser utilizada para a obtenção de informações acerca destas estruturas, possibilitando, assim, a sua identificação, que é realizada através da comparação dos picos no espectro Raman com padrões de referência conhecidos, normalmente armazenados em bancos de dados. No entanto, a obtenção desses espectros e a identificação de materiais podem ser trabalhosas e custosas, requerendo especialistas qualificados. Assim, a simulação computacional torna-se uma alternativa viável para calcular espectros Raman e para a caracterização de diferentes estruturas de carbono. Em vista disso, este trabalho tem como objetivo calcular os espectros Raman de todas as estruturas disponíveis no banco de dados SACADA (SAMara Carbon Allotrope DATabase - <https://www.sacada.info/>), que contém as estruturas de diferentes formas alotrópicas de carbono. Os espectros estão sendo obtidos através de cálculos de primeiros princípios baseados na Teoria do Funcional da Densidade (*DFT - Density Functional Theory*), realizados utilizando o *software* CRYSTAL17, em um *cluster* de computadores, dado o elevado custo computacional. Os espectros Raman obtidos serão disponibilizados por meio de uma base de dados *online*, acessível através de um *website*. Essa plataforma incluirá ainda um sistema de busca que permitirá a identificação de um composto através de uma comparação entre espectros Raman inseridos no *site* com os já existentes na base de dados.

Palavras-chave: Carbono, Espectro Raman, Cálculos de Primeiros Princípios

Apoio: UCS, CNPq