



DESENVOLVIMENTO DE UMA BASE DE DADOS DE ESPECTROS RAMAN DE ESTRUTURAS DE CARBONO

Anderson Pastore Rizzi (PROBIC-FAPERGS), 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 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, normalmente armazenados em bancos de dados. A identificação de novos materiais é limitada, portanto, à existência de bases de dados com espectros Raman simulados. Em vista disso, este trabalho tem como objetivo calcular os espectros Raman de todas as 1635 estruturas de diferentes formas alotrópicas de carbono disponíveis no banco de dados SACADA (*SAmara Carbon Allotrope DAtabase*), acessível em: <https://www.sacada.info>. Os espectros foram obtidos mediante cálculos de primeiros princípios baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*), realizados utilizando o *software* CRYSTAL17, em um *cluster* de computadores. Os espectros Raman estão disponíveis em um *website* desenvolvido com o *framework* Blazor. A plataforma permite não apenas a visualização dos espectros, mas também das estruturas tridimensionais das moléculas e de seus modos de vibração, todos armazenados em um banco de dados não relacional implementado com o MongoDB. O *website* contará, ainda, com um sistema de busca voltado à identificação de novos materiais de carbono, por meio da comparação entre espectros Raman obtidos experimentalmente e aqueles já registrados na base de dados.

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

Apoio: UCS, CNPq, FAPERGS