

DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA TRATAMENTO DE DADOS ESPECTRAIS

FRANCISCO ROMÁRIO LEITE BELÉM, DINIZ MACIEL DE SENA JUNIOR,

As técnicas espectroscópicas são utilizadas para analisar as estruturas moleculares, onde a interação entre o sistema e algum tipo de radiação eletromagnética é avaliada. Para facilitar a interpretação dos espectros vibracionais moleculares podem ser utilizados cálculos teóricos. A fim de se obter uma melhor correlação entre os espectros calculados e aqueles obtidos experimentalmente, fatores de escala devem ser encontrados através da minimização do erro entre as respectivas frequências. Seu cálculo tem sido realizado utilizando-se planilhas eletrônicas, um método demorado e que requer bastante intervenção do usuário, estando susceptível a erros de operação. O objetivo deste projeto é criar um programa para calcular correlações entre dados experimentais e teóricos de espectros vibracionais. A utilização de um programa específico para cálculo do fator de escala dos espectros vibracionais é vantajosa em relação ao método mecânico/manual.

PALAVRAS-CHAVE: FATOR DE ESCALA, ESPETRO VIBRACIONAL, FORTRAN

ÁREA TEMÁTICA: QUÍMICA BIOLÓGICA (PESQUISA)

FORMA DE APRESENTAÇÃO: ORAL