VALIDAÇÃO E APRIMORAMENTO DE UM PROGRAMA PARA TRATAMENTO DE DADOS ESPECTRAIS

FRANCISCO ROMÁRIO LEITE BELÉM, DAVID WESLELY ALVES DA SILVA, 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, que podem ser correlacionados aos dados experimentais através de um fator de escala. A literatura descreve um método bastante utilizado para este fim, mas não se encontram disponíveis programas que o faça de maneira automática. Esta lacuna está sendo preenchida pelo Grupo de Simulações Moleculares e Espectroscopia Molecular através do desenvolvimento de um código próprio.Neste projeto, um programa desenvolvido para calcular os referidos fatores de escala será validado e aprimorado com o tratamento diferenciado para regiões de alta e baixa frequência, e a elaboração de relatórios detalhados.A linguagem de programação escolhida para a construção do programa foi a FORTRAN (FORmula TRANslation system), devido a sua simplicidade e capacidade de efetuar cálculos. Na primeira parte do programa as frequências teóricas e experimentais são correlacionadas de acordo com a diferença entre elas. Em seguida é calculado um fator de escala por um procedimento de mínimos quadrados, e é feito um novo pareamento com as frequências teóricas escalonadas. Essa última etapa se repete até ser encontrado um resultado ótimo, onde o erro é minimizado. Foram feitos testes com espectros teóricos e experimentais das seguintes substâncias: ácido D-glutâmico, D-fenilalanina, L-fenilalanina, Timol, e D-valina. Os fatores de escala encontrados foram 0,9867, 0,9955, 0,9807, 0,9952, 0.9836, e os erros 10,68/cm, 10,83/cm, 11.62/cm, 10,02/cm, 15,45/cm, respectivamente.O programa tem capacidade de fazer rapidamente as correlações das frequências e os resultados encontrados são compatíveis com o esperado para o método utilizado.

PALAVRAS-CHAVE: FATOR DE ESCALA, FORTRAN, ESPECTROSCOPIA MOLECULAR, INFRAVERMELHO

ÀREA TEMÀTICA: QUÍMICA BIOLÓGICA

FORMA DE APRESENTAÇÃO: ORAL