

ABSTRACT

COMPUTATIONAL PROGRAM FOR INFRA-RED SPECTRA LIBRARY

A computational program, wrote in Quick-Basic version-4.5, was developed, for acquisition, storage and graphical observation of infra-red spectra (IR) existent in literature and/or obtained experimentally. The files are constituted of the data pairs: wavenumber and value of transmittance, expressed in percentage. The program is useful for users who can utilize it to construct a library of more restrict interest.

INTRODUÇÃO

Frequentemente, um usuário de bibliotecas de espectros Infra-Vermelhos (I.V.) se encontra na condição de adquirir uma ampla coleção de espectros, muito embora, ele poderá vir a utilizar somente uma pequena parte deste extenso banco de dados. Além disso, o usuário não poderá, de uma forma geral, acrescentar a esta biblioteca, os espectros obtidos experimentalmente no desenvolvimento de sua pesquisa. Basicamente, o usuário de bibliotecas de espectros, deseja manter em seus arquivos, um certo número de compostos com os quais seu trabalho de rotina ou de pesquisa se relaciona. Considerando estes aspectos, desenvolveu-se um programa que pode ser utilizado na construção de uma biblioteca de espectros I.V. com as características acima descritas. Inicialmente foi construída uma pequena biblioteca contendo cerca de 100 espectros que foram adquiridos com o uso de uma mesa digitalizadora.⁽¹⁾

PROGRAMA PARA A BIBLIOTECA DE ESPECTROS INFRA-VERMELHOS

No desenvolvimento do programa foi utilizado a linguagem de uso geral Quick-Basic versão 4.5. O programa desenvolvido para a construção e manutenção de biblioteca de espectros de I.V. controla dados como; o número total de pontos amostrados (pares de número de onda e transmitância), o número de escalas de número de onda presentes no espectro e o nome do composto. Os espectros são designados sequencialmente, na ordem em que foram digitalizados, através de nomes DOS, da seguinte forma: "SPExxx.SPT", de modo que, xxx é um número entre 000 e 999 sendo então igual a 1000 o número máximo de espectros que podem estar presentes no mesmo diretório.

O arquivo denominado "SPECTR.CTR" contém os dados necessários ao controle da manipulação da biblioteca, mantendo atualizado o número de espectros presentes e os parâmetros "default" utilizados na digitalização de espectros. O arquivo "SPECFILE.NAM" contém os nomes dos compostos referentes aos espectros contidos na biblioteca. Este arquivo é utilizado pelo programa em todos os itens que requerem acesso ao banco de dados. O programa permite a aquisição (digitalização seguida de arquivamento) ou a remoção de espectros do banco de dados.

O acesso do usuário às diferentes rotinas do programa é feita através de menus. Os espectros podem ser observados na forma gráfica na tela do monitor. Também, dois espectros podem ser mostrados simultaneamente para serem comparados. Um cursor gráfico para cada espectro pode ser posicionado ao longo do eixo dos números de onda sendo que o valor de transmitância e o número de onda são simultaneamente mostrados ao usuário permitindo uma comparação da posição e intensidade de ocorrência dos picos de absorção. Além disso, dois espectros podem ser sobrepostos para possibilitar uma melhor visualização da comparação, como ilustra a figura 1. Caso o usuário escolha incorretamente um espectro, para tal comparação, pode-se apagá-lo da tela e buscar novamente o desejado.

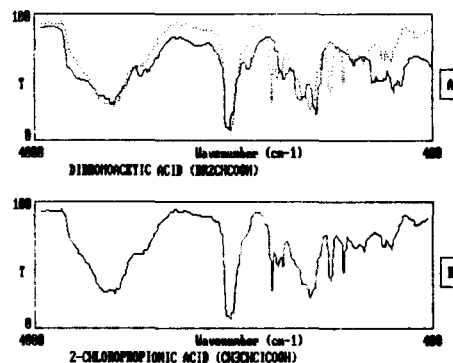


Figura 1 - Comparação de dois ácidos carboxílicos, utilizando a opção de sobreposição do espectro "B" sobre o "A".

CONCLUSÕES

Este programa de construção e manutenção de biblioteca de espectros de I.V., permite a elaboração de arquivos de menor custo e que podem ser de grande utilidade para o usuário uma vez que este pode especificar os espectros que deseja armazenar e transferi-los a partir de bibliotecas tipo SADTLER, comumente encontradas nas instituições de pesquisa no Brasil. Também, o programa permite armazenar digitalmente dados de instrumentos analógicos, que fornecem registros de espectros em papel ou espectros obtidos diretamente na forma digitalizada, podendo operar em qualquer microcomputador compatível com o IBM-PC-XT com 640 Kbytes de memória RAM, sendo que é recomendada a presença de um Winchester (20 Mb, por exemplo).

AGRADECIMENTOS

À FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, pelo apoio financeiro, projeto nº 88/4201-7.

REFERÊNCIA

1. Souza, P.S. and Pasquini, C., Lab.Micro., (1990), *q*, 77-80.