

Analise Estatística em Espectros de Infravermelho: Estruturas de Baixa Dimensionalidade

Nicolle Paola Pietroski(IC)*; Vladimir Lavayen(PQ)

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, BR-91501970,
Porto Alegre-RS, Brasil. *nicollepietroski@gmail.com



INTRODUÇÃO

A espectroscopia de infravermelho é um método excelente e não-perturbativo para análises de diversos compostos de origem química ou biológica. Uma das principais dificuldades atuais de análise de estruturas é aquela relacionada às interações e à correlação entre os blocos moleculares em uma escala nanométrica (NBBs).

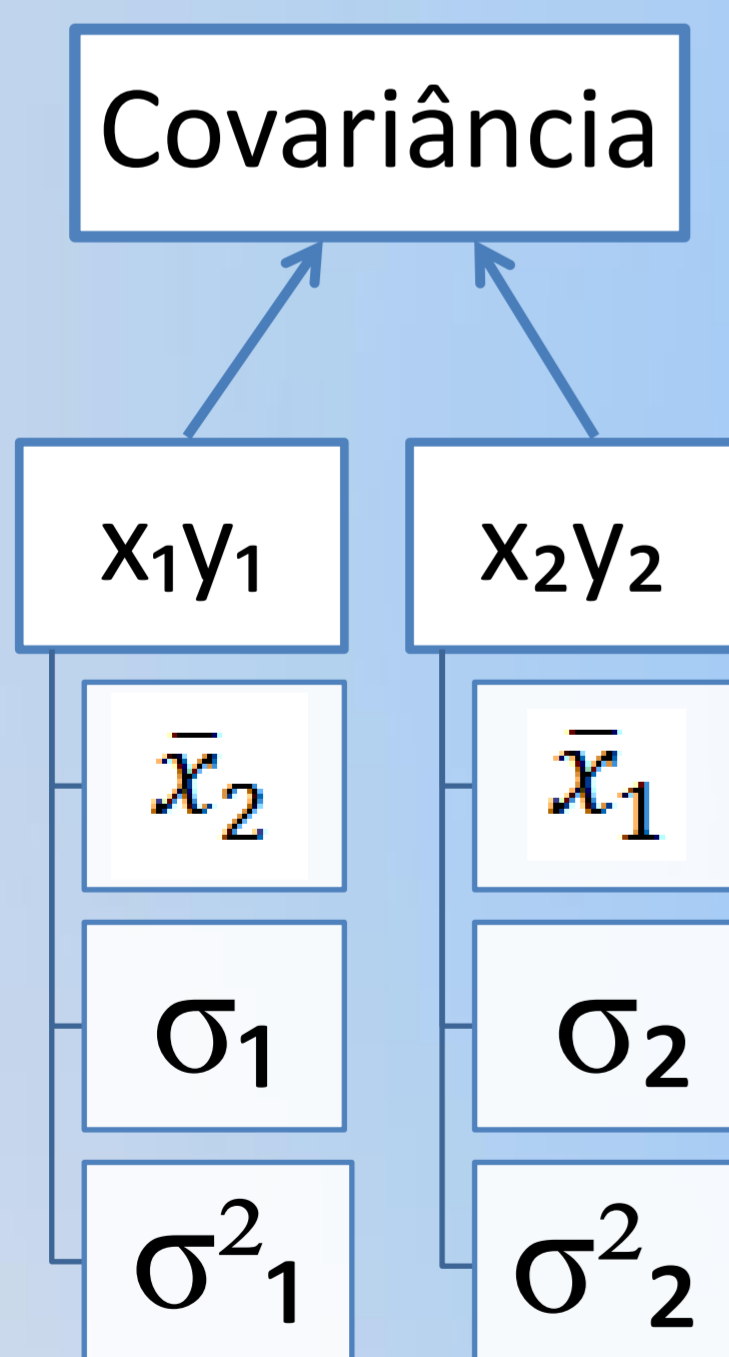
OBJETIVO

Neste trabalho se estuda o uso de técnicas de pré-processamento espectral e a análise dos dados de correlação de amostras de nanopartículas produzidas no Grupo Emergente de Nanoquímica Supramolecular.

METODOLOGIA

A metodologia utilizada neste estudo compreende o uso dos softwares Microsoft Office Excel 2007 e MATLAB R2012b devido à simplicidade de manuseio e às suas funções, como ferramentas de suporte no desenvolvimento de uma análise de correlação entre conjuntos de dados específicos.

RESULTADOS



Através da espectroscopia no infravermelho (TIR) e do uso dos softwares foi identificada a covariância entre os conjuntos de dados.

Covariância é a medida do grau de interdependência (ou inter-relação) entre duas variáveis. Caso as variáveis sejam independentes, elas têm covariância igual a zero.

Se a covariância for um resultado positivo, as variáveis apresentam um comportamento semelhante. E, analogamente, se for um resultado negativo, as variáveis apresentam um comportamento oposto, ou seja, os maiores valores da variável x_1y_1 correspondem aos menores valores de x_2y_2 .

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem pela ajuda financeira a FAPERGS, CNPQ e IQ/UFRGS.

Neste trabalho utilizamos o método de Análise de Componentes Principais (PCA) para explicar a covariância entre dois conjuntos de dados realizar a medição deste grau de covariância. Essa ferramenta também foi utilizada para a simplificação do conjunto de dados, o reconhecimento de padrões e o melhoramento destes dados.

Na Figura 1 é observado o espectro das nanopartículas, no intervalo 4000-3000 cm^{-1} , de uma amostra contendo água. Assim perto de 3400 cm^{-1} se observa uma banda alargada relacionada ao modo transversal O-H.

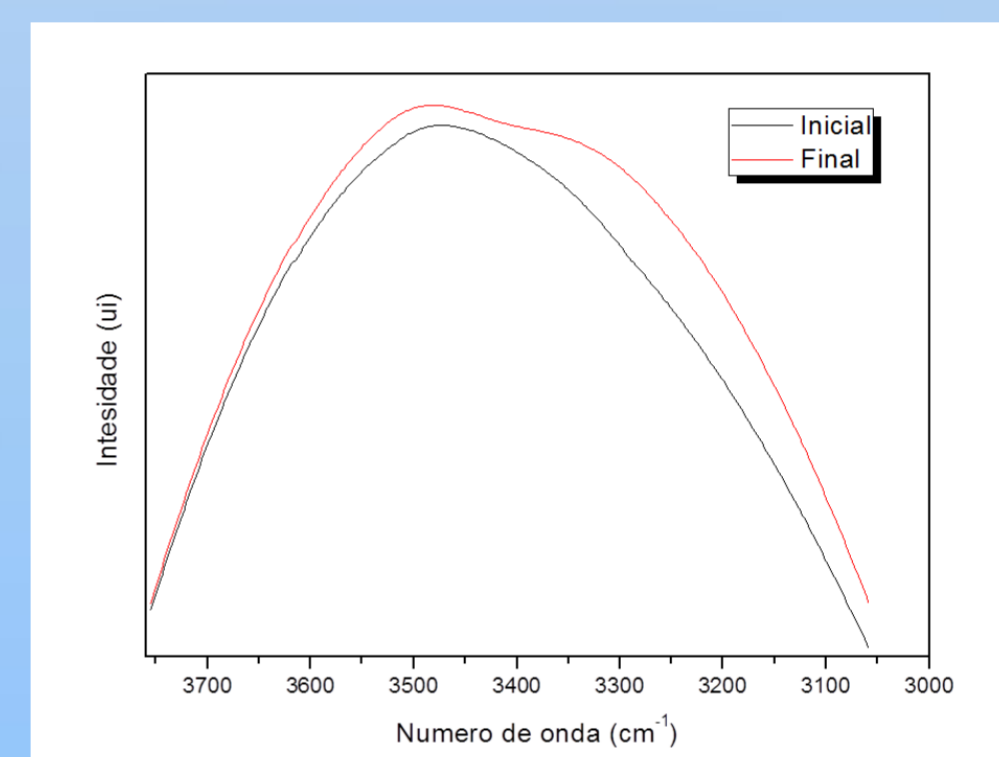


Figura 1. Espectro de infravermelho no intervalo 4000-3000 cm^{-1} .

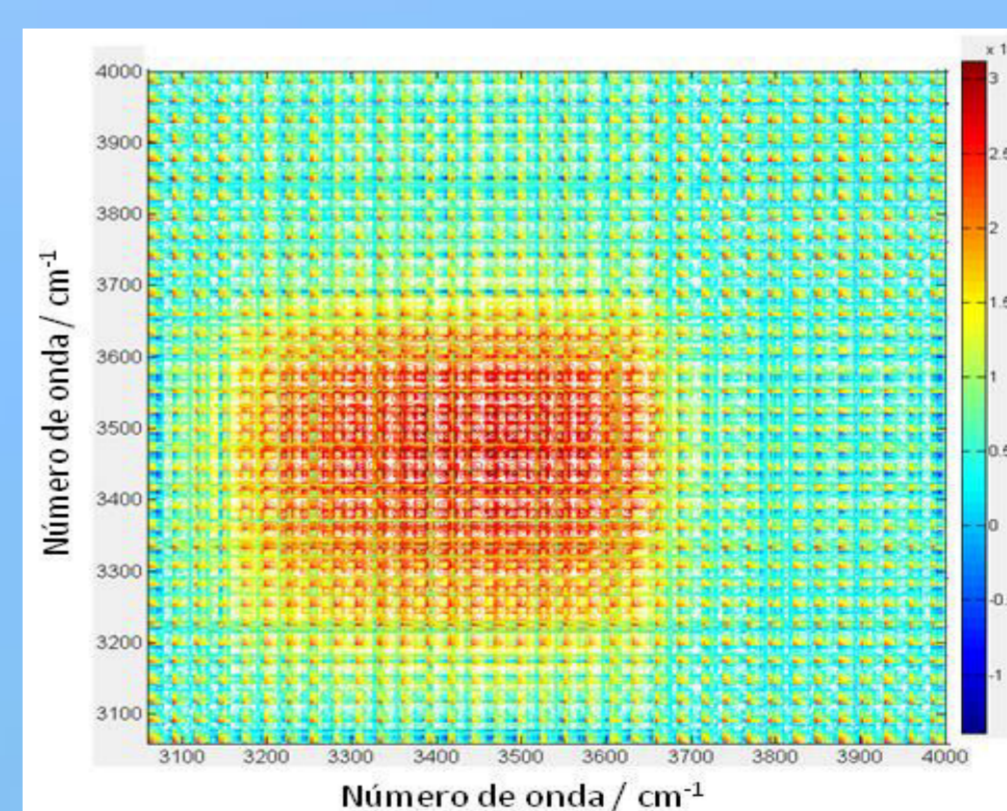


Figura 2. Espectro de infravermelho no intervalo 4000-3000 cm^{-1} .

Resultados preliminares mostram que, conforme a Figura 2 apresenta, através da metodologia PCA, o modo de vibração simétrico (νOH) \sim 3380 cm^{-1} provém principalmente das interações ponte de hidrogênio entre as moléculas de água e não das nanopartículas. Assim esta metodologia pode nos permitir identificar quais interações podem ser mais afetadas em função das perturbações do sistema.

CONCLUSÕES PARCIAIS

Usando programas computacionais foi desenvolvido uma análise para obtenção de parâmetros de correlação em diversos conjuntos de dados. Os resultados preliminares mostram que é preciso refinar o tratamento de dados, o qual está em andamento.

REFERÊNCIAS

- [1] SILVERSTEIN, Robert M. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. 7. ed. Rio de Janeiro : LTC, 2007.
- [2] DYER, John R. **Aplicações da espectroscopia de absorção aos compostos orgânicos**. São Paulo : Edgard Blücher, 1969.

