DESENVOLVIMENTO DE PROGRAMAS DE PROCESSAMENTO DE DADOS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

MACÊDO, Rogério Ribeiro[1] (IC), FEDOCE LOPES, Juliana (PQ)[1]
[1]*Universidade Federal de Itajubá.*

Palavras-chave: UV-VIS, python, química computacional

Introdução

A química computacional tem se destacado no estudo de propriedades eletrônicas e espectroscópicas de moléculas. O cálculo de estados excitados é uma destas ferramentas computacionais permite analisar transições eletrônicas e construir gráficos UV-Vis para entender estruturas e reações. Programas como Orca e Gaussian realizam tais cálculos, mas a extração manual dos dados pode ser trabalhosa, especialmente com grandes volumes de resultados. Automatizar esse processo facilita a coleta, análise e interpretação dos dados, reduzindo erros e aumentando a eficiência. Portanto, o desenvolvimento de aplicação que pudesse extrair os dados de estados excitados de cálculos, tanto do Gaussian quanto do Orca é um grande auxílio. No entanto, além do desenvolvimento da aplicação é preciso que a mesma passe por um processo de validação, ou seja, que a aplicação seja colocada em produção e com isso avaliar se existem erros conceituais ou procedimentais. A validação por usuários permite adicionar melhorias à aplicação.

Metodologia

Durante o processo de validação algumas mudanças foram realizadas no programa original de modo a agregar novas funcionalidades e até mesmo modificar o processo de execução. Uma primeira modificação foi a tradução de mensagens, comentários e ajustes nos nomes de variáveis para a língua inglesa. Com isso, existe a possibilidade de que a aplicação possa ser usada em outros contextos linguísticos. Outra modificação adicionada foi a de permitir que a própria aplicação exiba os gráficos, sem a necessidade de uso de aplicações auxiliares (apesar de ainda ser possível, basta que o usuário faça uso dos arquivos gerados). Acredita-se que isso facilita o processo de análise dos dados como um todo. A linguagem de programação continua sendo Python, já que ela demonstra um certo grau de robustez e facilidade no uso.

Resultados e discussão

A aplicação laqc_spectrum foi desenvolvida de modo a facilitar a geração dos gráficos UV-VIS das estruturas estudadas. Com as modificações realizadas, o uso da aplicação se dá em três fases. Na primeira fase, é realizada a extração dos estados excitados do arquivo de cálculo para um arquivo chamado “input.dat”, como pode ser visto na Figura 1.

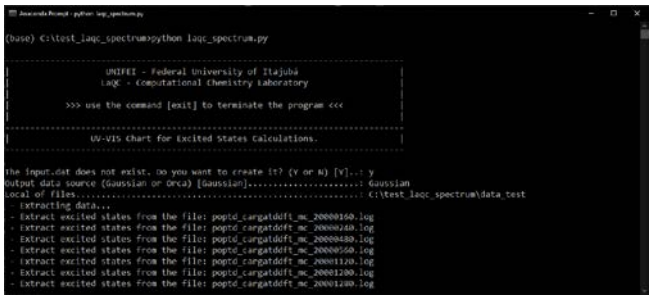

Figura 1 Execução do laqc_spectrum.py (extração estados excitados)

No exemplo mostrado, a pasta informada pelo usuário contém alguns arquivos que estão associados aos cálculos de algumas estruturas. Isso já demonstra uma vantagem do programa, como se verá adiante, que é a possibilidade de visualizar vários resultados diferentes em conjunto. Na segunda fase, o programa realiza a deconvolução dos dados inicialmente extraídos e o cálculo necessário para a geração dos dados para a construção do gráfico UV/Vis. Isso pode ser feito em momento posterior ou já em sequência à extração dos dados. Na Figura 2 vê-se o programa sendo executado nesta fase.

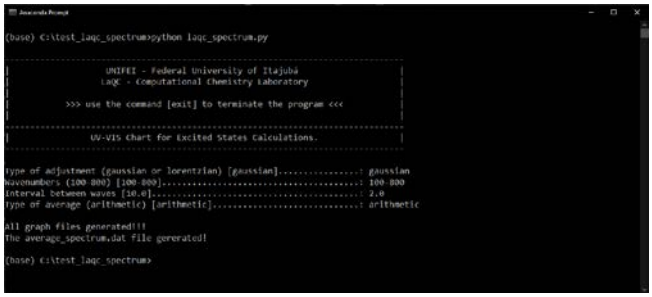

Figura 2 Execução do laqc_spectrum.py (gerando dados UV-Vis)

O resultado dessa fase são arquivos com formato .xvg em uma pasta específica ("*graphs*"). Apesar de um dos objetivos do programa ser o de permitir a visualização dos gráficos sem uso de programas auxiliares, os usuários podem fazer uso desses arquivos em seus programas preferenciais de visualização de gráficos. A terceira fase de uso do programa é a visualização dos gráficos individuais ou em lote. Na Figura 3, pode-se verificar as opções que o programa oferece para visualizar o gráfico.

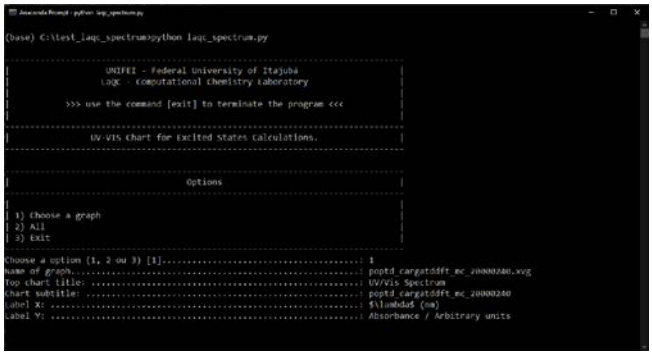

Figura 3 Menu para visualização dos gráficos UV-VIS.

O usuário deve informar o nome do arquivo a ser visualizado, que deve estar presente no diretório "*graphs*". O programa então exibe janela de visualização de gráfico. Essa janela contém alguns elementos que podem ser utilizados para ajustar parâmetros dos gráficos, como título, legenda e limites de valores dos eixos. A Figura 4 apresenta exemplo de gráfico sendo exibido na janela de visualização.

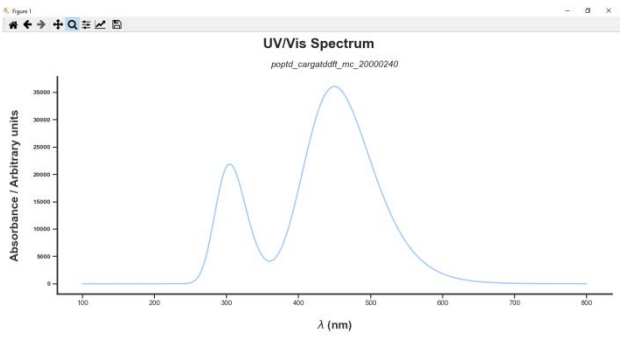

Figura 4 Exemplo de exibição de gráfico UV-VIS

Como citado acima, uma característica do gráfico é a visualização de vários resultados simultaneamente. Além disso, durante a deconvoluçãoo programa realiza, automaticamente, uma média de todos os resultados apresentados e gera um arquivo de dados específico ("average_spectrum.xvg"). A figura 5 mostra o gráfico com vários resultados.

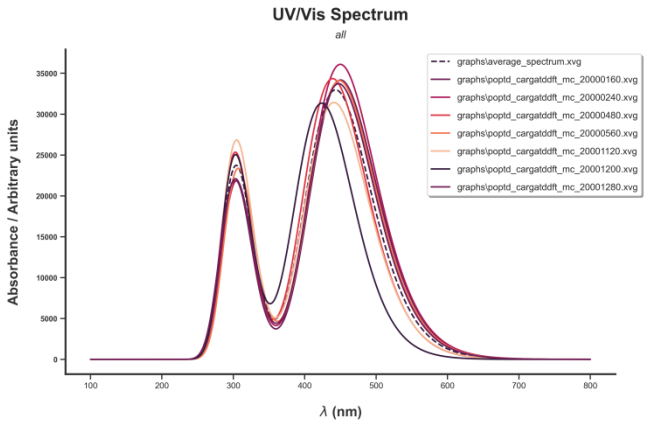

Figura 5 Exibindo todos os gráficos

A linha pontilhada é a média simples dos espectros. Na Figura 6 esse resultado pode ser melhor verificado.

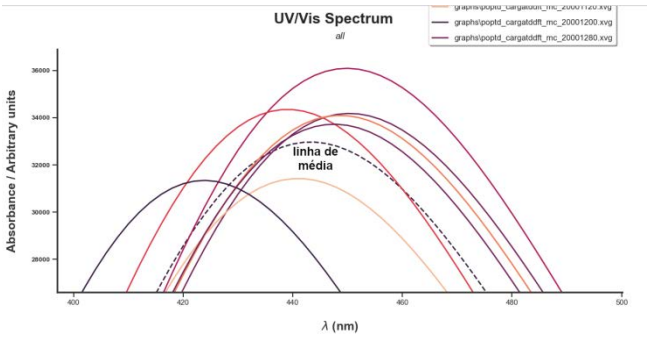

Figura 6 Representação da média dos espectro UV-Vis

Conclusões

O desenvolvimento de uma aplicação requer sempre um momento em que se valide e ajuste aquilo que foi codificado. Além disso, esse é um momento importante para verificar os resultados gerados, qual a usabilidade da aplicação, mesmo que esta venha a ser utilizada por usuários com grande experiência no uso desse tipo de aplicação. A aplicação resultante permite não apenas visualizar o gráfico UV-Vis de uma estrutura em específico, mas de várias estruturas. E, independentemente da escolha do usuário, a aplicação gera um espectro médio de todas as estruturas selecionadas.

Agradecimentos

Em especial, agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) pela bolsa de estudo que me foi concedida para a realização deste trabalho.

Referências

FRISCH, M. J.; TRUCKS, G. W.; SCHLEGEL, H. B.; SCUSERIA, G. E. et al. Gaussian 16 Rev. C.01. Wallingford, CT: 2016.

NEESE, F. ORCA: An ab initio, DFT and semiempirical SCF-MO package. Max Planck Institute for Coal Research, 2022.

VAN ROSSUM, G. a. D., Fred L. Python 3 Reference Manual. Scotts Valley, CA: CreateSpace, 2009. 1441412697.

WILLIAMS, T.; KELLEY, C. Gnuplot: An Interactive Plotting Program. Gnuplot Team, 2020.