

SICEC: SISTEMA DE INFORMAÇÃO DE CÁLCULOS DE ESPECTROSCOPIA COMPUTACIONAL

Inventores

Juliano Varella de Carvalho, Lucas André Koch e Fernando Dal Pont Morisso.

Nº do processo

BR 51 2021 000730 1.

Data de criação

01/10/2017.

Data de publicação

01/12/2017.

Data de concessão

20/04/2021.

Depositante titular

ASSOCIAÇÃO PRÓ-ENSINO SUPERIOR EM NOVO HAMBURGO.

Tipo de obra

Programa de computador.

Resumo:

Determinar estruturas moleculares é uma capacidade essencial para a química orgânica, pois, assim, seus cientistas são capazes de sintetizar e estudar substâncias. Dentre os métodos utilizados para a determinação destas estruturas está a técnica de espectroscopia experimental. Essa técnica emprega diferentes tipos de eletromagnetismo – como infravermelho e rádio frequência – para determinar as características de uma molécula. Atualmente, o avanço da tecnologia, juntamente com métodos teóricos, possibilita a química computacional realizar simulações destas técnicas, através de cálculos executados por programas de computadores. As simulações são utilizadas para auxiliar a interpretação de dados experimentais ou para prever propriedades moleculares. Este trabalho teve como objetivo aumentar a performance deste processo de pesquisa do Grupo de Química Computacional e Bioinformática da Universidade Feevale, o qual faz uso destas simulações em seus trabalhos. Por meio da engenharia de requisitos e acompanhamento das simulações de espectroscopia, realizadas pelo grupo, foram levantados problemas e dificuldades enfrentadas durante esse processo, como, por exemplo, grande quantidade de operações manuais para copiar os resultados das simulações – do arquivo de saída gerado pelo programa utilizado – para uma planilha em Excel. Estes problemas consomem muito tempo dos pesquisadores do grupo, e podem ser solucionados através da aplicação dos conhecimentos da ciência da computação. Para alcançar a melhora da performance, foi realizada uma pesquisa aplicada junto com metodologias da pesquisa experimental para o desenvolvimento e validação do Sistema de Informação de Cálculos de Espectroscopia Computacional (SICEC), desenvolvido durante o presente trabalho para auxiliar os pesquisadores do grupo. A validação deste sistema contou com a participação do pesquisador chefe do grupo em questão, revelando ótimos resultados em relação à diminuição de erros, esforço e tempo durante os processos executados pela equipe de pesquisa.