

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC
**UFRGS**
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

Evento	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2017
Local	Campus do Vale
Título	Análise Estatística em Espectros de Infravermelho: Estruturas de Baixa Dimensionalidade
Autor	NICOLLE PAOLA PIETROSKI
Orientador	VLADIMIR GONZALO LAVAYEN JIMENEZ

Análise Estatística em Espectros de Infravermelho: Estruturas de Baixa Dimensionalidade

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

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil

*nicollepietroski@gmail.com

A espectroscopia de infravermelho é um método excelente, e não-perturbativo, para análises de diversos compostos de origem química. Uma das principais dificuldades atuais de análise de estruturas é aquela relacionada às interações entre os blocos moleculares a escala nanométrica (*NBBs*). Este trabalho tem como objetivo, após a aquisição dos dados espectrais de amostras de nanopartículas produzidas, no Grupo Emergente de Nanoquímica Supramolecular, o uso de técnicas de pré-processamento espectral, junto à análise de dados de correlação. Nesse estudo, visa-se usar o método de Análise de Componentes Principais (PCA) para a simplificação de um conjunto de dados e o reconhecimento de padrões. Assim, através do PCA, faz-se um estudo para identificar quais parâmetros das interações estão mais correlacionados, ou seja, quais possuem maior impacto nas propriedades de interesse. Por exemplo, em $\sim 3400 \text{ cm}^{-1}$, foi detectado, em nanoesferas de 20 nm de diâmetro, a banda de deformação axial νOH relacionada à presença de interações fracas. Finalmente, será apresentado neste trabalho possíveis respostas para questões como quais são os grupos funcionais e quais/que tipos de interações fracas neles podem estar presentes ou ser produzidos por perturbações nas condições de medição.

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