



A UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

APRESENTA UMA INOVAÇÃO

AKIRA: FERRAMENTA DE TRATAMENTO DE DADOS DE RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA

BR 51 2021 003098 2

Grupo: Ciências exatas e informática

Subgrupo: Simulações computacionais e análise de dados

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA E TRATAMENTO DOS DADOS

A ressonância paramagnética é uma técnica usada para obter informações químicas e estruturais sobre amostras de materiais. O princípio básico desta técnica é o uso de sinais eletromagnéticos em uma frequência específica para excitar átomos ou moléculas específicos dentro de uma amostra. Como resultado, esses átomos ou moléculas se comportam como um ímã temporário, emitindo sinais elétricos que são detectados. Estes sinais fornecem informações sobre a estrutura interna da amostra, incluindo a disposição química, as interações intermoleculares e as propriedades magnéticas. A ressonância paramagnética é particularmente útil para a investigação de materiais complexos, como metais, polímeros, hidrocarbonetos e materiais de alta energia. Além disso, ela tem aplicações em áreas como ciências da vida, química, tecnologia de materiais e biotecnologia. Esta técnica pode também ser usada para estudar as propriedades físicas de materiais, tais como a condutividade, a permeabilidade e as propriedades ópticas, bem como para investigar a estrutura molecular de materiais orgânicos e poliméricos. Finalmente, a ressonância paramagnética é usada para determinar o tamanho e a forma de moléculas em suspensão no ar ou em líquido. Os dados de ressonância podem, portanto, fornecer informações muito úteis para a investigação científica, bem como para aplicações industriais e comerciais.

Sob essa perspectiva, pesquisadores da Universidade de Brasília (UnB), desenvolveram um programa de computador destinado ao tratamento de dados de ressonância paramagnética eletrônica, seguindo o formato adotado pela



A UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA APRESENTA UMA INOVAÇÃO

Bruker®, o BES3T. O programa, escrito em Visual C#, permite o tratamento de grandes quantidades de dados como centenas de espectros simultaneamente, faz a conversão entre BES3T e ASCII, executando a decomposição de arquivos bidimensionais em unidimensionais, realiza operações matemáticas como subtração de espectros e subtração de linha de base.

VANTAGENS

- **Eficiência:** Permite tratar grandes quantidade de dados simultaneamente.
- **Versatilidade:** Compatível com os principais equipamentos de ressonância disponíveis no mercado;
Permite decomposições unidimensionais e bidimensionais;
Possui ferramentas de edição de dados, como subtração de espectros e linhas de base.

Agenda 2030 da ONU:



Gostou dessa tecnologia?

Para obter mais informações entre em contato com a Agência de Comercialização de Tecnologias (ACT) da Coordenação de Inovação e Transferência de Tecnologia (CITT), por meio dos contatos a seguir:

E-mail: act@cdt.unb.br

Telefone: (61) 3107-4116