

# ANALISIS FUNCIONAL COMPUTARIZADO DE ESPECTROS DE INFRARROJO

AUGUSTO RIVERA\*  
JUAN GUILLERMO PALACIO  
JOSUE V. AMEZQUITA

\* Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Ciudad Universitaria, Bogotá, Colombia.

Key words: Computer applications; automatized analysis, infrared spectroscopy.

## RESUMEN

**CALIPSO:** Se discute un programa para microcomputador diseñado para asistir al espectroscopista en la interpretación de espectros de infrarrojo. Es un programa interactivo que utiliza la lógica booleana y árboles de decisión binaria definidos por la presencia o ausencia, intensidad y forma de un pico específico en un espectro de infrarrojo. La información relacionada con los grupos funcionales presentes en la molécula es confiable.

## ABSTRACT

**CALIPSO:** A microcomputer program designed to assist the spectroscopist in the interpretation of infrared spectra is discussed. It is an interactive program which employs Boolean logic and binary decision trees defined by the presence or absence, intensity and shape of a specific peak in a IR spectrum. Information about functional groups present in the molecule is achieved.

## INTRODUCCION

Terminando el Siglo XX estando ya en los albores del Siglo XXI, el computador se ha constituido en una herramienta auxiliar vital para casi toda ciencia. En Química, ciencia ésta en donde es notable la cantidad de información que se maneja, así como el tipo complicado de cálculos que a veces se hacen, se torna indispensable el uso del computador en casi todas sus áreas.

Sobre interpretación de espectros infrarrojos asistida por computador, en los últimos quince años se han descrito muchas investigaciones que usan sistemas que implican consultar en archivos y comparar por analogía con el espectro experimental hasta encontrar el más semejante. Estos sistemas están restringidos por el número de compuestos almacenados, por lo cual, actualmente los esfuerzos están siendo dirigidos hacia la elaboración de programas basados en algoritmos heurísticos que intentan imitar las tácticas empleadas por los humanos para interpretar estos espectros (1) (2) (3).

Algunos trabajos interesantes que muestran la correlación entre el espectro y la estructura del compuesto en investigación, se basan en programas que usan un conjunto de reglas para diferenciar entre varias estructuras posibles teniendo como base sus espectros de masas e infrarrojo, así Woodruff (4) elaboró un programa útil para la identificación de compuestos orgánicos, en especial de productos naturales. Este investigador es uno de los pioneros en lo que se refiere a la interpretación de espectros IR asistida por computador. En estudios posteriores (5) (6) (7) este mismo autor comparó los métodos empleados tradicionalmente de reconocimiento de modelos con los basados en la programación con inteligencia artificial, tratando de establecer cual era la mejor técnica para resolver problemas de elucidación de estructuras reales usando espectroscopía de infrarrojo. Por muchas razones, la inteligencia artificial fue el método escogido, pero sobre todo porque cuando se requiere información pertinente a un gran número de sustancias, si se trabaja con la primera técnica, se necesitaría un mayor número de modelos, y además, sería bastante probable incurrir en el mismo error dos o más veces, cosa que no sucede cuando se trabaja con inteligencia artificial.

Por otra parte, Tanabe et al (8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19) han contribuido de una manera muy significativa en el estudio y búsqueda de soluciones de los problemas inherentes al análisis de espectros de IR asistido por computador, desarrollando nuevos métodos y mejorando los existentes. En general, los métodos por él usados se basan en la comparación sumaria del espectro de IR del compuesto analizado con los existentes en un banco de datos, que tiene como base los compuestos listados por el **INFRARED DATA COMMITTEE OF JAPAN (IRDC)**, por la **American Society for testing and materials (ASTM)** y por el **SPECTRAL DATA BANK SYSTEM (SDBS)**.

En este artículo discutimos el diseño de CALIPSO (Computadores Aplicados a La Interpretación de eSpectros infrarrOjos) programa interactivo ejecutable en microcomputadores Apple o compatibles fundamentado en un algoritmo altamente estructurado escrito en BASIC APPLESOFT.

## MATERIALES Y METODOS

Los requerimientos de sistema físico (Hardware) para ejecutar el programa son mínimos, y una configuración básica de CPU, monitor, unidad de disco y teclado son suficientes y no se necesita ninguna unidad adicional especial, lo cual coloca a CALIPSO al alcance de cualquier investigador o estudiante que posea un microcomputador APPLE o compatible con 64 Kb en adelante de memoria de acceso aleatorio (RAM) en adelante.

El programa se diseñó utilizando lógica negativa con el criterio de descartar grupos no presentes en el espectro siguiendo los pasos que daría cualquier persona experimentada en interpretación de espectros de IR. Se emplearon también para asegurar más el resultado, otros datos auxiliares tales como: el análisis elemental, la posición, forma e intensidad de las bandas existentes y la definición de que una banda en cuestión sólo puede tener una forma determinada.

El programa interpreta espectros de IR de una variada gama de compuestos orgánicos a excepción de aquellos muy poco corrientes. Los espectros deben haber

sido efectuados en pastilla de KBr al 2% o en película líquida, técnicas éstas las más comunes.

## RESULTADOS Y DISCUSION

Puesto que en la interpretación de espectros de infrarrojo entran además en juego, aparte de los picos en sí, otros parámetros como por ejemplo la calidad misma del espectro que dificultan la labor del analista y hacen que la subjetividad sea un factor de mucho peso a la hora de expresar los resultados, diseñamos y codificamos el programa para microcomputador CALIPSO que proporciona información rápida, veraz y confiable sobre las funciones químicas presentes en un compuesto orgánico dado, tomando como base de análisis su espectro IR, buscando así contribuir a eliminar los posibles factores de duda inherente al trabajo humano.

Este programa se hizo aplicando estructuración modular en cuatro bloques que se encadenan consecutivamente durante la ejecución. Como su fin primordial es la interpretación hasta funciones químicas del espectro IR, la programación se basó en los siguientes aspectos:

A) Espectros generales de compuestos que tienen diferentes funciones orgánicas haciendo la primera clasificación teniendo en cuenta su carácter aromático o alifático y tomando como punto de referencia el catálogo Aldrich (21) para estandarizar las bandas, promediar su intensidad, forma y posición, obviando así la variabilidad que presentan los espectros IR. Esta fuente trae espectros IR de 10.000 sustancias orgánicas de muy diversa índole, lo que permitió generalizar mejor el análisis y por tanto lograr un programa bastante confiable. Los datos de este catálogo se complementaron con los valores teóricos y la forma de las principales bandas características de las funciones orgánicas elegidas para la interpretación por CALIPSO así como los espectros y valores dados por otros autores (22, 23, 24).

B) Las funciones orgánicas a interpretar, cuya elección se realizó teniendo en cuenta principalmente la estabilidad química que presentan usualmente los compuestos que las contienen, así como su común ocurrencia. Una lista detallada de las funciones orgánicas elegidas se puede observar en la Tabla 1.

C) La forma de las bandas. Este factor fue difícil de establecer, ya que es aquí donde más divergencia puede presentarse debido a factores subjetivos del usuario del programa al momento de ejecutarlo. Para solucionarlo y evitar esta clase de errores se limitó el programa al manejo de sólo tres formas de bandas (Figura 1): anchas, agudas y angostas, para de esta manera conducir la elección según el criterio de que una banda no podría poseer simultáneamente dos de estas cualidades.

D) La composición elemental de la sustancia cuyo espectro IR va a ser interpretado y a la cual se le acotaron valores máximos para cada elemento así:  $C_{60} H_{122} O_{16} N_8 S_8 X_8 P_4 Si_4 Me_4$ . El número máximo de cada elemento se estableció luego de una exhaustiva revisión que permitió incluir la mayoría de compuestos orgánicos, excepto polímeros y proteínas entre otros. En cuanto al número de átomos de halógenos presentes, este número se reparte entre: Flúor, Cloro, Bromo y Yodo hasta alcanzar su valor sin importar la cantidad de cada uno. El valor cuatro para metales puede estar entre combinaciones varias de: Sodio, Potasio, Calcio, Magnesio, Arsénico, Hierro, Cobre, Níquel, Mercurio. El programa se ejecuta de manera tal que sólo admite números inferiores o iguales al máximo permitido.

**TABLA 1**

**Funciones que CALIPSO puede interpretar**

<b>Carbonilo</b>	<b>No carbonílicos</b>	
Aldehído	Alcoholes	Eteres
Acido	Primario	Eter metoxi
Esteres	Secundario	Metilen dioxi
Anhídridos	Terciario	Epoxy central
Amidas	Fenoles	Epoxy terminal
Cetonas		
<b>Con C, H, N y O</b>	<b>Con C, H, O y S</b>	<b>Con C, H, N, O y S</b>
Nitroso	Sulfóxido	Sulfonamidas
Nitro	Sulfonas	
Nitrato	Sulfonil cloruro	
Nitramina	Acido sulfónico	<b>Con C, H, N y S</b>
Nitrito	Sulfonato	Tioureidos
Nitrosamina	Sulfato	
Oximas		
N-Oxido		
Azoxi		
<b>Con C, H y N</b>	<b>Con C, H y S</b>	<b>Con C y H -</b>
Grupo N-H	-SH	Isopropil
Imina	C-S	= CH <sub>2</sub> terminal
Amina	S-S	= CH-
Nitrilo	S-CH <sub>2</sub>	Dienos
Sal diazonio	S-CH <sub>3</sub>	Polienos
Aminas		
Primarias		-C ≡ C - H
Secundarias		CH <sub>2</sub> en línea
Terciarias		H-Metilén metínico
H-Metilen carbonil		
H-Acetilo		
H-Metoxi carbonil II		
H-Acetato		
H-Metilen sal		

E) Las posiciones de memoria reservadas (32.000-32.255) se escogieron luego de la búsqueda de un rango que estuviera desocupado y que se pudiera usar sin afectar las posiciones usadas por el lenguaje y por el sistema operacional. Algunas de estas posiciones se emplearon para guardar los datos suministrados por el usuario (análisis elemental, posición e intensidad de las bandas) y otras, para almacenar los resultados del análisis interno llevado a cabo por CALIPSO. Esto aunque no lo parece era absolutamente necesario, pues resulta imprescindible mantener la información de módulo a módulo. En la Tabla 2 se muestran las posiciones de memoria utilizadas.

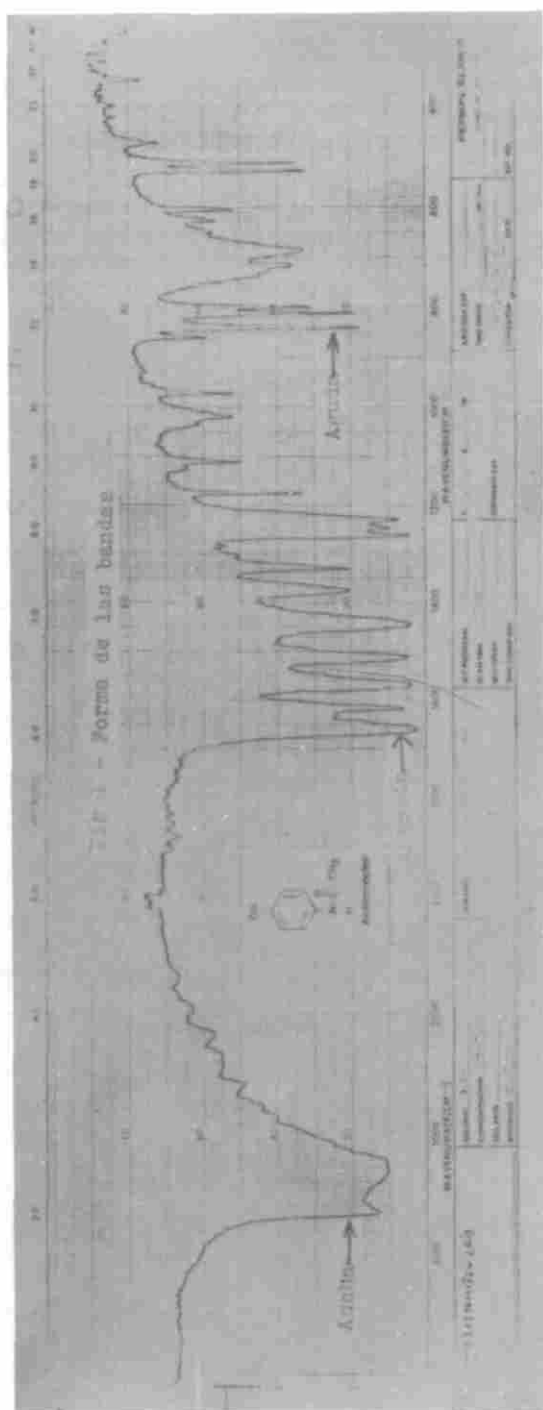
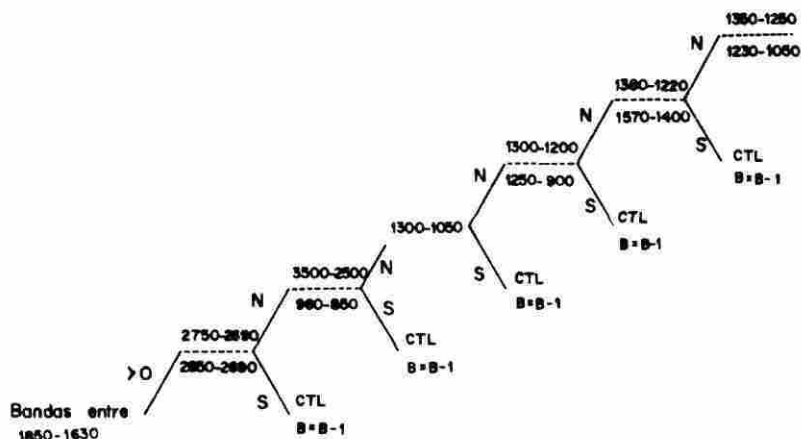


TABLA 2

## Posiciones de memoria utilizadas por CALIPSO

32000	VIENE MOLECULAR I	12157	POS. ENCS	32153	LACTONA INSATURADA	32056	METILBENSON III
32001		32157	ACETILENO TERMINAL II	32154	LACTONA INSATURADA	32057	METILINDOL TOTAL
32002	AMIDAS I	32158	ACETILENO TERMINAL II	32155	ESTER AROM. ALIFAT	32058	EPICLORIDRINAL
32003	CETONAS II	32159	ACETILENO TERMINAL II	32156	LACTONA SAROMATICA	32059	AMINA
32004	ALCOHOL ASOCIADO	32160	CHENI ARA	32157	ANHIDRIDO	32060	AMINA ALIFATICA
32005	ETERES I	32161	CHENI ARA	32158	ANHIDRIDO MEMBRAS	32061	AMINA BILABIAL
32006	ETERES II	32162	4-METILCARBONIL	32159	ANHIDRIDO MEMBRAS	32062	AMINA BILABIAL
32007	NITROSOS I	32163	4-METILCARBONIL	32160	ANHIDRIDO MALEICO	32063	AMINA TERCIARIA
32008	NITROSOS II	32164	4-METILCARBONIL	32161	ANH. 6-MEM. INSAT	32064	AMINA TERCIARIA
32009	NITROSOS III	32165	4-METILCARBONIL	32162	ANH. 6-MEM. INSAT	32065	NITROSOS THANS
32010	NITROSOS IV	32166	4-METILCARBONIL	32163	ANH. 6-MEM. INSAT	32066	NITROSOS CIS
32011	NITROSOS V	32167	4-METILCARBONIL	32164	ANH. 6-MEM. INSAT	32067	NITROSOS CIS
32012	NITROSOS VI	32168	4-METILCARBONIL	32165	ANH. 6-MEM. INSAT	32068	NITROSOS CIS
32013	NITROSOS VII	32169	4-METILCARBONIL	32166	ANH. 6-MEM. INSAT	32069	NITROSOS CIS
32014	NITROSOS VIII	32170	4-METILCARBONIL	32167	ANH. 6-MEM. INSAT	32070	NITROSOS CIS
32015	NITROSOS IX	32171	4-METILCARBONIL	32168	ANH. 6-MEM. INSAT	32071	NITROSOS CIS
32016	NITROSOS X	32172	4-METILCARBONIL	32169	ANH. 6-MEM. INSAT	32072	NITROSOS CIS
32017	NITROSOS XI	32173	4-METILCARBONIL	32170	ANH. 6-MEM. INSAT	32073	NITROSOS CIS
32018	NITROSOS XII	32174	4-METILCARBONIL	32171	ANH. 6-MEM. INSAT	32074	NITROSOS CIS
32019	NITROSOS XIII	32175	4-METILCARBONIL	32172	ANH. 6-MEM. INSAT	32075	NITROSOS CIS
32020	NITROSOS XIV	32176	4-METILCARBONIL	32173	ANH. 6-MEM. INSAT	32076	NITROSOS CIS
32021	NITROSOS XV	32177	4-METILCARBONIL	32174	ANH. 6-MEM. INSAT	32077	NITROSOS CIS
32022	NITROSOS XVI	32178	4-METILCARBONIL	32175	ANH. 6-MEM. INSAT	32078	NITROSOS CIS
32023	NITROSOS XVII	32179	4-METILCARBONIL	32176	ANH. 6-MEM. INSAT	32079	NITROSOS CIS
32024	NITROSOS XVIII	32180	4-METILCARBONIL	32177	ANH. 6-MEM. INSAT	32080	NITROSOS CIS
32025	NITROSOS XIX	32181	4-METILCARBONIL	32178	ANH. 6-MEM. INSAT	32081	NITROSOS CIS
32026	NITROSOS XX	32182	4-METILCARBONIL	32179	ANH. 6-MEM. INSAT	32082	NITROSOS CIS
32027	NITROSOS XXI	32183	4-METILCARBONIL	32180	ANH. 6-MEM. INSAT	32083	NITROSOS CIS
32028	NITROSOS XXII	32184	4-METILCARBONIL	32181	ANH. 6-MEM. INSAT	32084	NITROSOS CIS
32029	NITROSOS XXIII	32185	4-METILCARBONIL	32182	ANH. 6-MEM. INSAT	32085	NITROSOS CIS
32030	NITROSOS XXIV	32186	4-METILCARBONIL	32183	ANH. 6-MEM. INSAT	32086	NITROSOS CIS
32031	NITROSOS XXV	32187	4-METILCARBONIL	32184	ANH. 6-MEM. INSAT	32087	NITROSOS CIS
32032	NITROSOS XXVI	32188	4-METILCARBONIL	32185	ANH. 6-MEM. INSAT	32088	NITROSOS CIS
32033	NITROSOS XXVII	32189	4-METILCARBONIL	32186	ANH. 6-MEM. INSAT	32089	NITROSOS CIS
32034	NITROSOS XXVIII	32190	4-METILCARBONIL	32187	ANH. 6-MEM. INSAT	32090	NITROSOS CIS
32035	NITROSOS XXIX	32191	4-METILCARBONIL	32188	ANH. 6-MEM. INSAT	32091	NITROSOS CIS
32036	NITROSOS XXX	32192	4-METILCARBONIL	32189	ANH. 6-MEM. INSAT	32092	NITROSOS CIS
32037	NITROSOS XXXI	32193	4-METILCARBONIL	32190	ANH. 6-MEM. INSAT	32093	NITROSOS CIS
32038	NITROSOS XXXII	32194	4-METILCARBONIL	32191	ANH. 6-MEM. INSAT	32094	NITROSOS CIS
32039	NITROSOS XXXIII	32195	4-METILCARBONIL	32192	ANH. 6-MEM. INSAT	32095	NITROSOS CIS
32040	NITROSOS XXXIV	32196	4-METILCARBONIL	32193	ANH. 6-MEM. INSAT	32096	NITROSOS CIS
32041	NITROSOS XXXV	32197	4-METILCARBONIL	32194	ANH. 6-MEM. INSAT	32097	NITROSOS CIS
32042	NITROSOS XXXVI	32198	4-METILCARBONIL	32195	ANH. 6-MEM. INSAT	32098	NITROSOS CIS
32043	NITROSOS XXXVII	32199	4-METILCARBONIL	32196	ANH. 6-MEM. INSAT	32099	NITROSOS CIS
32044	NITROSOS XXXVIII	32200	4-METILCARBONIL	32197	ANH. 6-MEM. INSAT	32100	NITROSOS CIS
32045	NITROSOS XXXIX	32201	4-METILCARBONIL	32198	ANH. 6-MEM. INSAT		
32046	NITROSOS XL	32202	4-METILCARBONIL	32199	ANH. 6-MEM. INSAT		
32047	NITROSOS XLI	32203	4-METILCARBONIL	32200	ANH. 6-MEM. INSAT		
32048	NITROSOS XLII			32201	ANH. 6-MEM. INSAT		
32049	NITROSOS XLIII			32202	ANH. 6-MEM. INSAT		
32050	NITROSOS XLIV			32203	ANH. 6-MEM. INSAT		
32051	NITROSOS XLV						
32052	NITROSOS XLVI						
32053	NITROSOS XLVII						
32054	NITROSOS XLVIII						
32055	NITROSOS XLIX						
32056	NITROSOS L						
32057	NITROSOS LI						
32058	NITROSOS LII						
32059	NITROSOS LIII						
32060	NITROSOS LIV						
32061	NITROSOS LV						
32062	NITROSOS LVI						
32063	NITROSOS LVII						
32064	NITROSOS LVIII						
32065	NITROSOS LIX						
32066	NITROSOS LX						
32067	NITROSOS LXI						
32068	NITROSOS LXII						
32069	NITROSOS LXIII						
32070	NITROSOS LXIV						
32071	NITROSOS LXV						
32072	NITROSOS LXVI						
32073	NITROSOS LXVII						
32074	NITROSOS LXVIII						
32075	NITROSOS LXIX						
32076	NITROSOS LXX						
32077	NITROSOS LXXI						
32078	NITROSOS LXXII						
32079	NITROSOS LXXIII						
32080	NITROSOS LXXIV						
32081	NITROSOS LXXV						
32082	NITROSOS LXXVI						
32083	NITROSOS LXXVII						
32084	NITROSOS LXXVIII						
32085	NITROSOS LXXIX						
32086	NITROSOS LXXX						
32087	NITROSOS LXXXI						
32088	NITROSOS LXXXII						
32089	NITROSOS LXXXIII						
32090	NITROSOS LXXXIV						
32091	NITROSOS LXXXV						
32092	NITROSOS LXXXVI						
32093	NITROSOS LXXXVII						
32094	NITROSOS LXXXVIII						
32095	NITROSOS LXXXIX						
32096	NITROSOS LXXXX						
32097	NITROSOS LXXXXI						
32098	NITROSOS LXXXXII						
32099	NITROSOS LXXXXIII						
32100	NITROSOS LXXXXIV						
32101	NITROSOS LXXXXV						
32102	NITROSOS LXXXXVI						
32103	NITROSOS LXXXXVII						
32104	NITROSOS LXXXXVIII						
32105	NITROSOS LXXXXIX						
32106	NITROSOS LXXXXX						
32107	NITROSOS LXXXXXI						
32108	NITROSOS LXXXXXII						
32109	NITROSOS LXXXXXIII						
32110	NITROSOS LXXXXXIV						
32111	NITROSOS LXXXXXV						
32112	NITROSOS LXXXXXVI						
32113	NITROSOS LXXXXXVII						
32114	NITROSOS LXXXXXVIII						
32115	NITROSOS LXXXXXIX						
32116	NITROSOS LXXXXXX						
32117	NITROSOS LXXXXXXI						
32118	NITROSOS LXXXXXXII						
32119	NITROSOS LXXXXXXIII						
32120	NITROSOS LXXXXXXIV						
32121	NITROSOS LXXXXXXV						
32122	NITROSOS LXXXXXXVI						
32123	NITROSOS LXXXXXXVII						
32124	NITROSOS LXXXXXXVIII						
32125	NITROSOS LXXXXXXIX						
32126	NITROSOS LXXXXXXX						
32127	NITROSOS LXXXXXXXI						
32128	NITROSOS LXXXXXXXII						
32129	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32130	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32131	NITROSOS LXXXXXXXV						
32132	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32133	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32134	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32135	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32136	NITROSOS LXXXXXXX						
32137	NITROSOS LXXXXXXXI						
32138	NITROSOS LXXXXXXXII						
32139	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32140	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32141	NITROSOS LXXXXXXXV						
32142	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32143	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32144	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32145	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32146	NITROSOS LXXXXXXX						
32147	NITROSOS LXXXXXXXI						
32148	NITROSOS LXXXXXXXII						
32149	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32150	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32151	NITROSOS LXXXXXXXV						
32152	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32153	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32154	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32155	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32156	NITROSOS LXXXXXXX						
32157	NITROSOS LXXXXXXXI						
32158	NITROSOS LXXXXXXXII						
32159	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32160	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32161	NITROSOS LXXXXXXXV						
32162	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32163	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32164	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32165	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32166	NITROSOS LXXXXXXX						
32167	NITROSOS LXXXXXXXI						
32168	NITROSOS LXXXXXXXII						
32169	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32170	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32171	NITROSOS LXXXXXXXV						
32172	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32173	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32174	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32175	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32176	NITROSOS LXXXXXXX						
32177	NITROSOS LXXXXXXXI						
32178	NITROSOS LXXXXXXXII						
32179	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32180	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32181	NITROSOS LXXXXXXXV						
32182	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32183	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32184	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32185	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32186	NITROSOS LXXXXXXX						
32187	NITROSOS LXXXXXXXI						
32188	NITROSOS LXXXXXXXII						
32189	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32190	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32191	NITROSOS LXXXXXXXV						
32192	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32193	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32194	NITROSOS LXXXXXXXVIII						
32195	NITROSOS LXXXXXXXIX						
32196	NITROSOS LXXXXXXX						
32197	NITROSOS LXXXXXXXI						
32198	NITROSOS LXXXXXXXII						
32199	NITROSOS LXXXXXXXIII						
32200	NITROSOS LXXXXXXXIV						
32201	NITROSOS LXXXXXXXV						
32202	NITROSOS LXXXXXXXVI						
32203	NITROSOS LXXXXXXXVII						
32204	NITROSOS LXXXXXXXVIII						

CALIPSO en su análisis e interpretación de los datos obtenidos emplea lógica booleana combinada con desarrollo de árboles de decisión, que le permiten elegir o descartar las funciones presentes en el compuesto, según la posición y la intensidad. Un ejemplo de la estructura de árbol dada a CALIPSO se muestra a continuación. Para el caso del grupo carbonilo tenemos:



En este caso, si el número de bandas en la región del espectro comprendida entre 1850-1630  $\text{cm}^{-1}$  es mayor de 0, CALIPSO trata de asignar la banda a un grupo carbonilo por medio de estas preguntas. Así tenemos que cada respuesta positiva dada es verificada por medio de la intensidad que ella presente, siéndole asignado un porcentaje de probabilidad de existencia. Además, CALIPSO descuenta las respuestas positivas del número de bandas suministrado para evitar de esta forma la duplicidad de respuestas y la aparición de resultados ilógicos. En la Figura, anterior CTL significa ir a la subrutina donde se verifica intensidad y se asigna el porcentaje y  $B = B-1$  significa restar uno al número de bandas presentes en el rango. Los resultados obtenidos son posteriormente analizados y utilizados en el módulo cuatro, para la estructuración de un código binario que almacena la información pertinente a las bandas que presenta el espectro que se sometió a interpretación.

Como se enunció anteriormente, CALIPSO fue elaborado con estructura modular. En general, los módulos que lo conforman se manejan por medio de menús. Esto facilita la labor de interpretación y hace más sencillo el trabajo para el usuario (ver Figura 2).

Como se puede apreciar en la Figura 2 los menús fueron diseñados de forma tal que se conserva en todos ellos una prioridad de las acciones a ejecutar, pues se consideró que lo primordial era seguir la secuencia lógica de análisis y por esto la opción uno de todos los menús es la encargada de realizar la labor principal que desarrolla el módulo. La opción de abandonar la ejecución del programa se colocó en

la posición cuatro de todos los menús ya que se pensó que era útil dar una opción de salida a cada fase de ejecución en el momento de estar interpretando un espectro con el programa. Como los cuatro módulos están concatenados entre sí, la opción dos permite regresar al módulo inmediatamente anterior, se colocó para que usuario pueda revisar o corregir las respuestas dadas en un módulo determinado luego de haberlo abandonado si así lo desea, excepto si se está ejecutando el módulo cuatro, en cuyo caso retorna al módulo uno para reiniciar el análisis. Caso especial de esta opción dos es cuando el usuario la elige al estar trabajando en él, ya que en lugar de regresar adelanta hasta el módulo cuatro específicamente al sector de impresión. La siguiente opción, la tres, permite al usuario el acceso a las instrucciones del módulo en cuestión, excepto en el módulo cuatro, donde ofrece la posibilidad de imprimir el resultado de un espectro ya interpretado por el programa.

.....

**IR INTERPRETER  
MODULO TRES**

.....

1. CONTINUAR EL ANALISIS
2. REGRESAR AL MODULO ANTERIOR
3. INSTRUCCIONES DEL MODULO
4. ABANDONAR EL MODULO

.....

**ESC PARA CORREGIR**

FIGURA 2. Menú del módulo tres de CALIPSO

CALIPSO ocupa un área total de 116,5 Kb distribuida así:

Módulo	Longitud (Kb)	Número Subrutinas
Presentación	38,75	4
Módulo Uno	12,75	13
Módulo Dos	27,50	25
Módulo Tres	15,75	37
Módulo Cuatro	11,00	11
Despedida	10,75	0



y está almacenado en discos flexibles de 5,25 pulgadas, formateados a 144 Kb, llamado "PROGRAMA CALIPSO", cuyo listado o copias en disco se encuentran a disposición de los interesados. Opcionalmente y si la configuración operacional lo permite, se puede, si el usuario lo desea en otro disco llamado "DATOS CALIPSO" guardar los resultados de los espectros interpretados por CALIPSO.

Actualmente estamos complementando a CALIPSO con un programa que recupera del código binario la información para simular el espectro.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al CINDEC y a la Universidad Nacional de Colombia por el apoyo económico recibido, así como a los profesores Mario Urdaneta, Sixta T. Martínez, Flor Marina Poveda y Omar Fuentes del Departamento de Química por facilitarnos el uso de un microcomputador personal y a farmacomputo por la ayuda ofrecida.

## BIBLIOGRAFIA

1. O'Duda, R.; Gaschnig, J.; Byte. 238, (1981).
2. McDonald, R.; Anal. Chem. 56, 5, (1984).
3. McDonald, R.; Anal. Chem. 44, (1972).
4. Woodruff, H.; Chem. Abst. 87, (1977).
5. Woodruff, H.; Chem. Abst. 87, (1977).
6. Woodruff, H.; Smith, G.; Anal. Chem. 52, (1980).
7. Woodruff, H.; Smith, G.; Anal. Chem. Acta 133, 545, (1981).
8. Tamura, T.; Tanabe, K.; Chem. Abst. 90, (1979).
9. Tamura, T.; Tanabe, K.; Chem. Abst. 91, (1979).
10. Tamura, T.; Tanabe, K.; Chem. Abst. 93, (1980).
11. Tamura, T.; Tanabe, K.; Chem. Abst. 95, (1981).
12. Tamura, T.; Tanabe, K.; Hiraishi, J.; Chem. Abst. 96, (1982).
13. Tanabe, K.; Tamura, T.; Hiraishi, J.; Chem. Abst. 97, (1982).
14. Tanabe, K.; Tamura, T.; Hiraishi, J.; Chem. Abst. 97, (1982).
15. Tanabe, K.; Tamura, T.; Hiraishi, J.; Chem. Abst. 98, (1983).

16. Tanabe, K.; Chem. Abst. **100**, (1984).
17. Tanabe, K.; Hiraishi, J.; Saeki, S.; Tasumi, M.; Suzuki, I.; Chem. Abst. **101**, (1984)
18. Saeki, S.; Tanabe, K.; Tamuta, T.; Tasumi, M.; Suzuki, I.; Appl. Spectrosc. **36**, 148, (1982).
19. Saeki, S.; Tanabe, K.; Appl. Spectrosc. **38**, 693, (1984).
20. Nakanishi, K.; "**Infrared absorption spectroscopy**". 5th Edition. Nankodo Company Limited, Tokio, 1969.
21. Pouchert, C.; "**The Aldrich Library of Infrared Spectra**". 2a. Edición. Aldrich Chemical Co. Edl. 1975.
22. Silverstein, R.; "**Identificación espectroscópica de compuestos orgánicos**". Editorial Diana. México. 1980.
23. Calderón, E.; "**Manual para la Identificación de Espectros Infrarrojos**". Universidad Nacional de Colombia. 1984.