

Desenvolvimento de um Programa para Cálculo do Fator de Escala Vibracional

Belém, F. R.; da Silva, D.W.; Sena Jr., D. M.

Rev. Virtual Quim., 2016, 8 (2), S1-S8. Data de publicação na Web: 9 de abril de 2016

<http://rvq.sbg.org.br>

MATERIAL SUPLEMENTAR

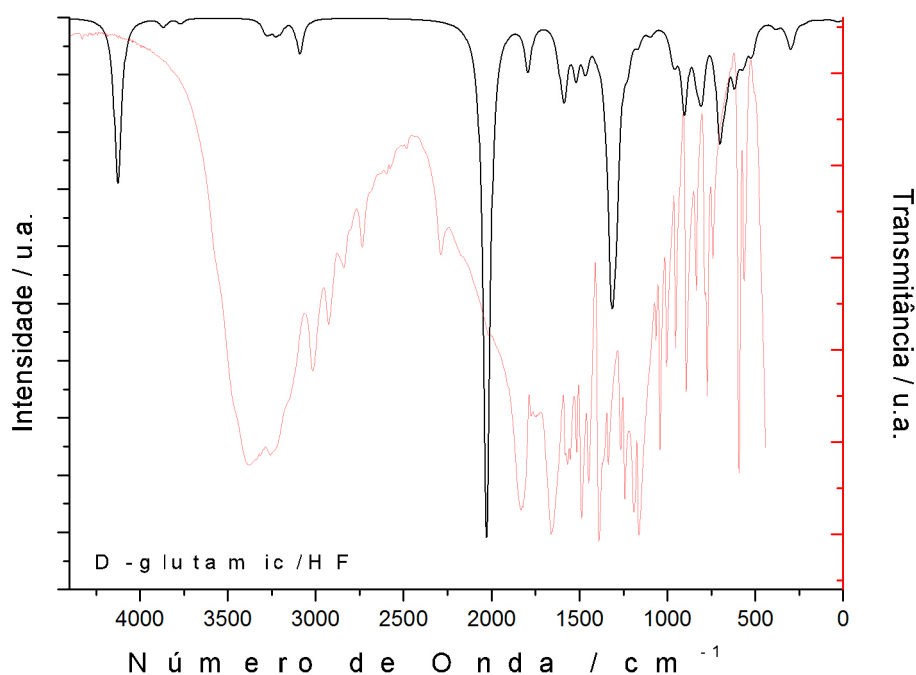


Figura 1. Espectros no infravermelho (de 4400 a 400 cm^{-1}) do ácido D-Glutâmico. Em vermelho o espectro experimental, e em preto o espectro teórico calculado pelo método HF/6-31G(d,p)

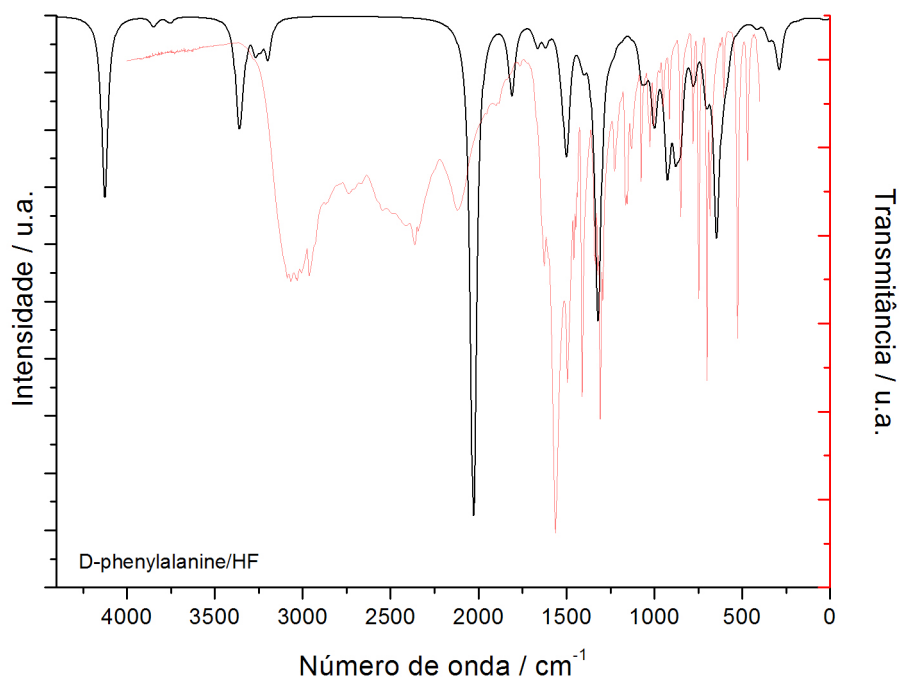


Figura 2. Espectros no infravermelho (de 4400 a 400 cm^{-1}) do ácido D-Fenilalanina. Em vermelho o espectro experimental, e em preto o espectro teórico calculado pelo método HF/6-31G(d,p)

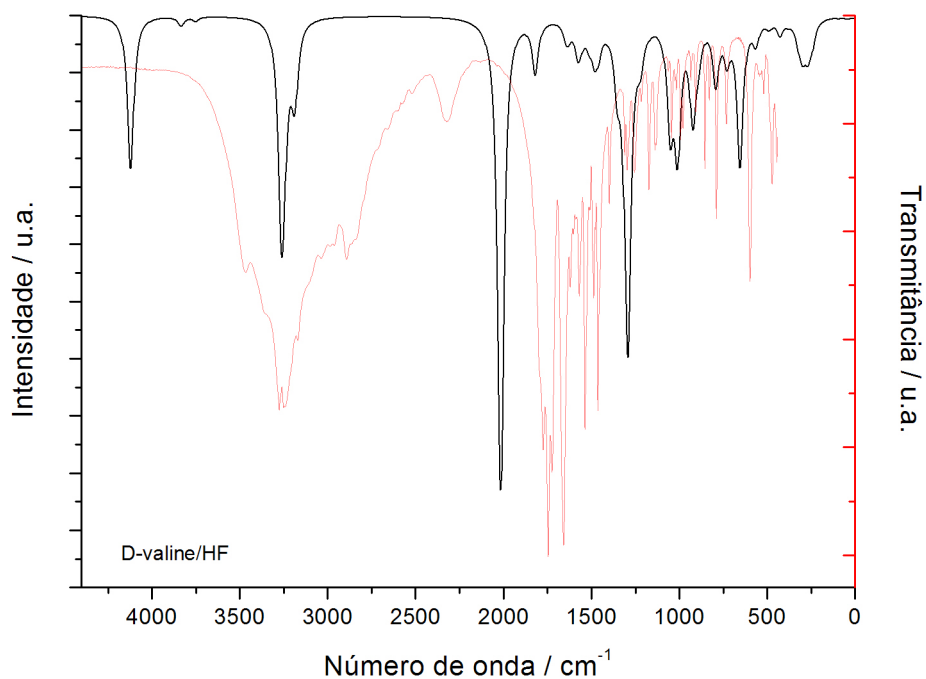


Figura 3. Espectros no infravermelho (de 4400 a 400 cm^{-1}) do ácido D-Valina. Em vermelho o espectro experimental, e em preto o espectro teórico calculado pelo método HF/6-31G(d,p)

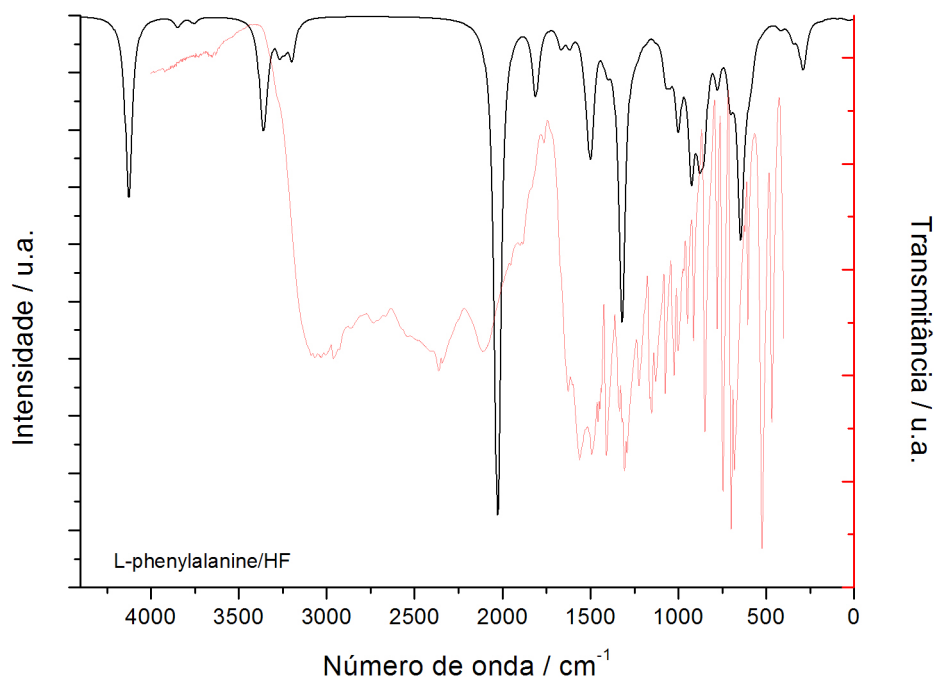


Figura 4. Espectros no infravermelho (de 4400 a 400 cm^{-1}), do ácido L-Fenilalanina. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método HF/6-31G(d,p)

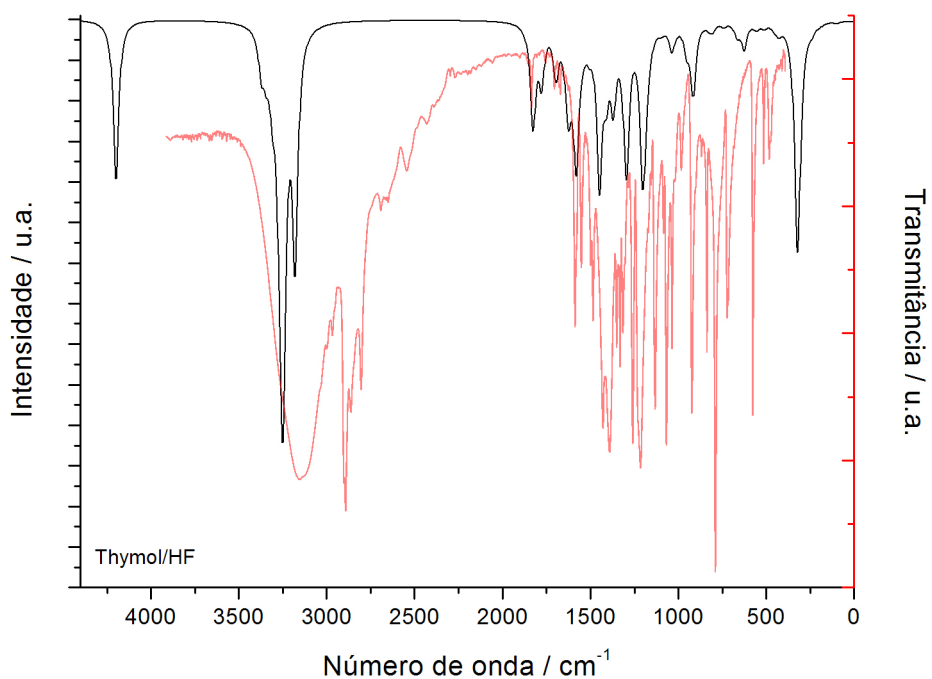


Figura 5. Espectros no infravermelho (de 4400 a 400 cm^{-1}), do Timol. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método HF/6-31G(d,p)

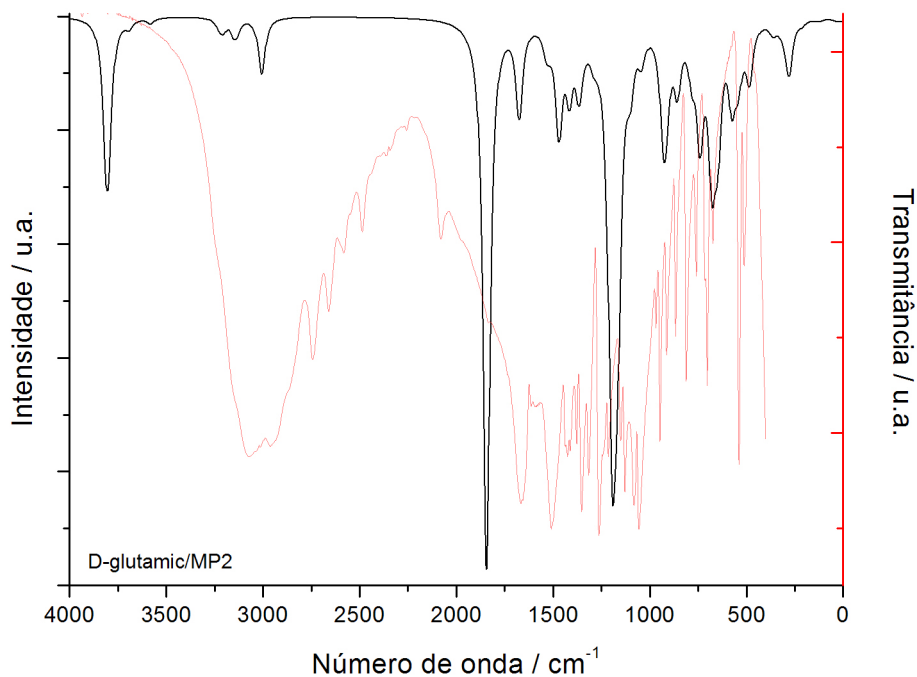


Figura 6. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido D-Glutâmico. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método MP2/6-31G(d,p)

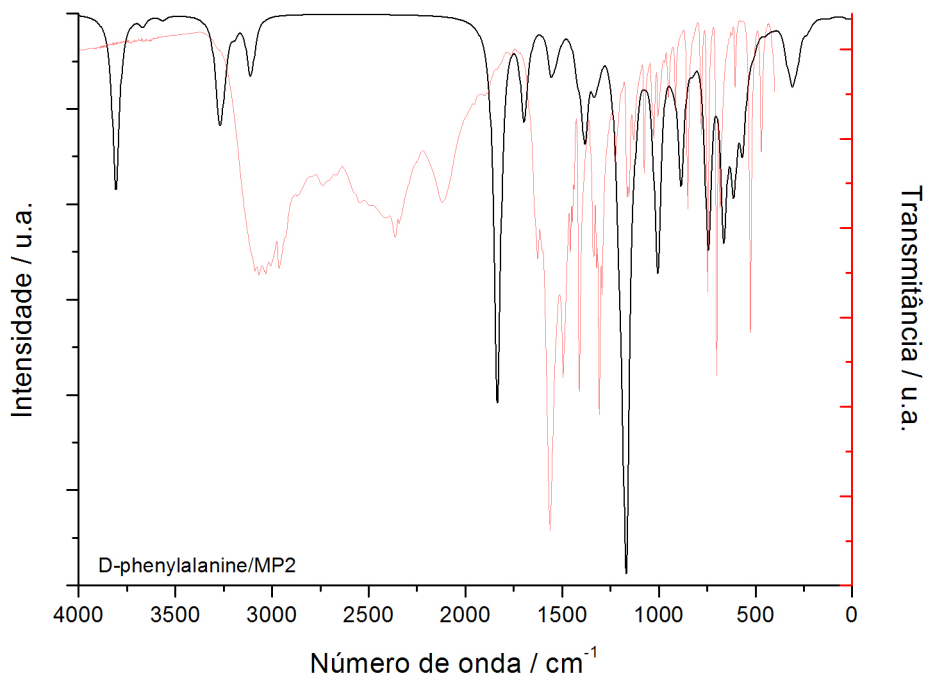


Figura 7. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido D-Fenilalanina. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro calculado pelo método MP2/6-31G(d,p)

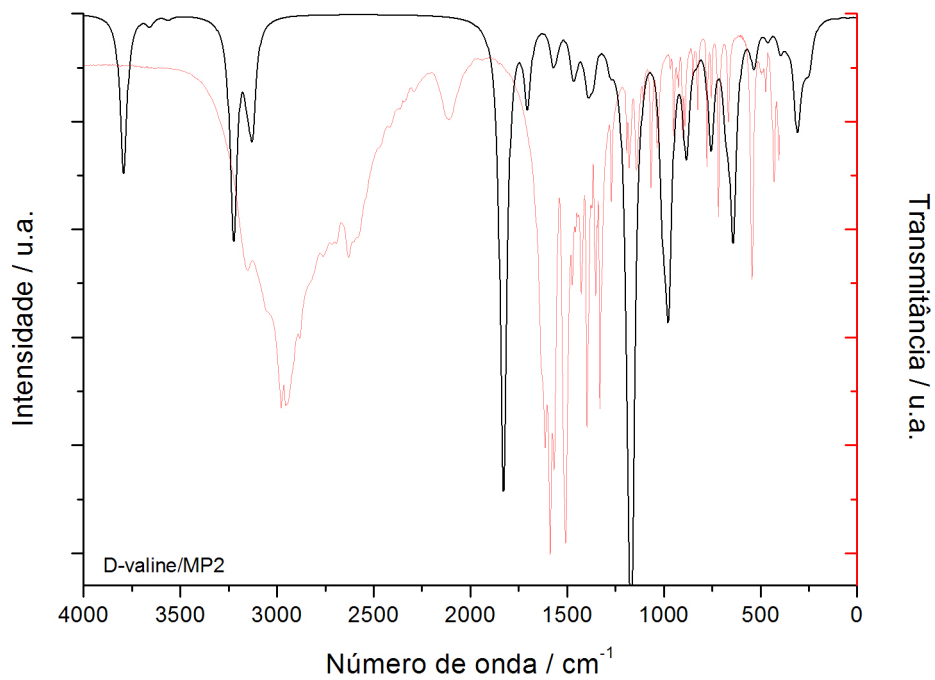


Figura 8. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido D-Valina. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método MP2/6-31G(d,p)

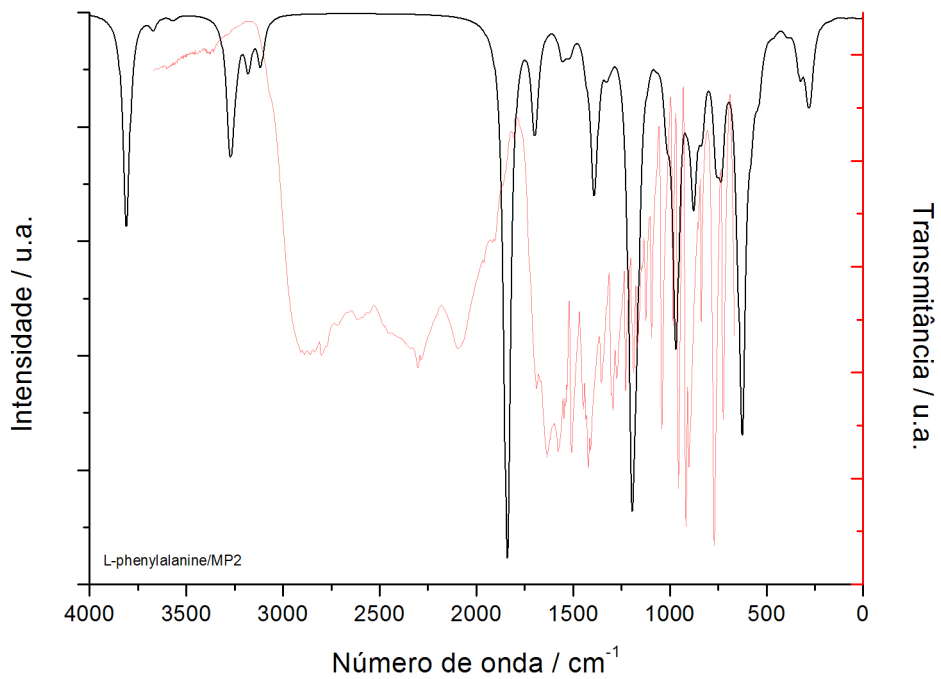


Figura 9. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido L-Fenilalanina. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método MP2/6-31G(d,p)

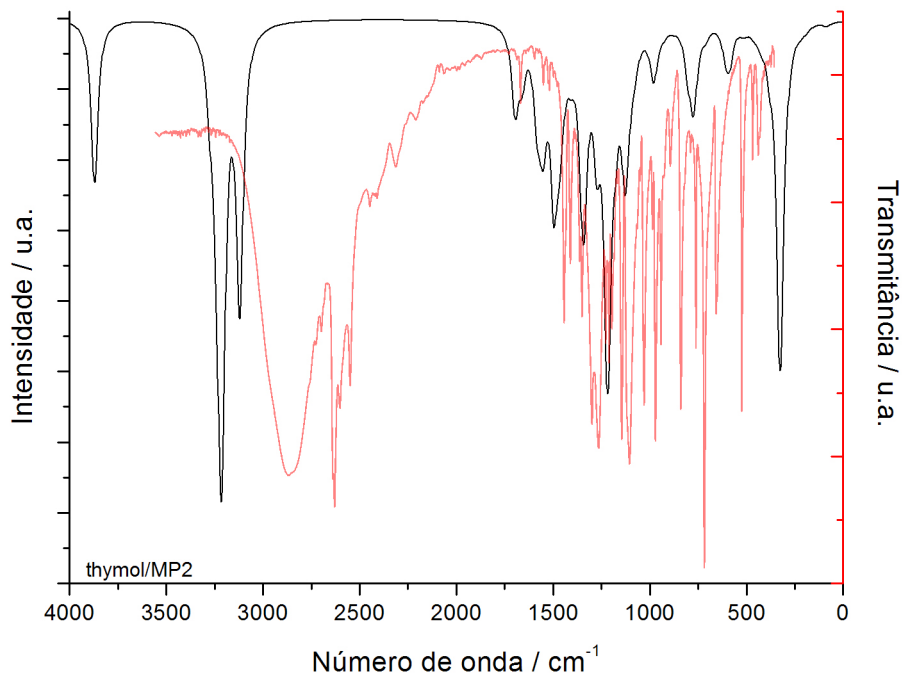


Figura 10. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do Timol. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro calculado pelo método MP2/6-31G(d,p).

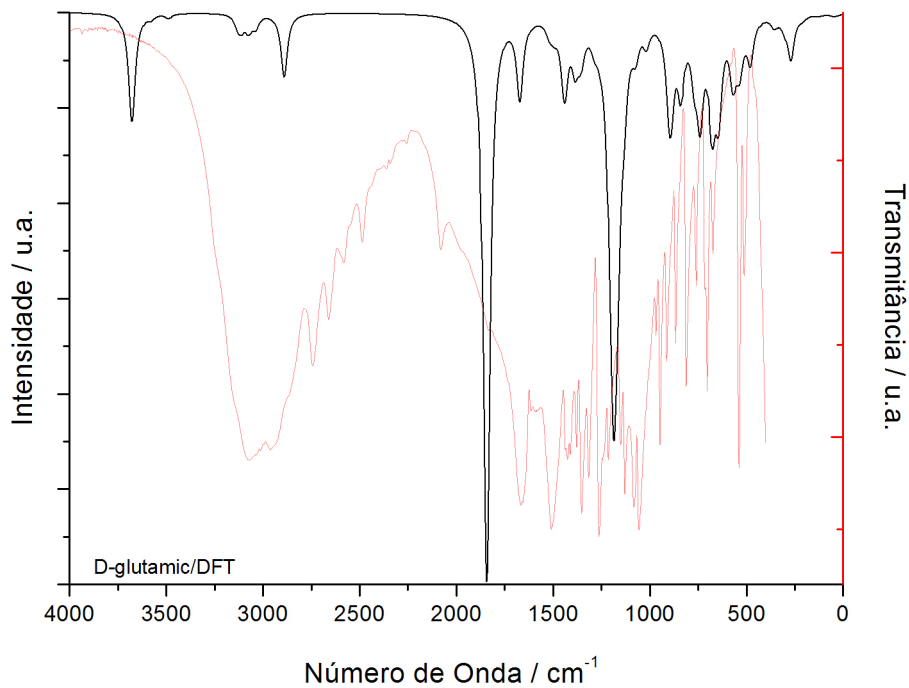


Figura 11. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido D-Glutâmico. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método DFT/6-31G(d,p)

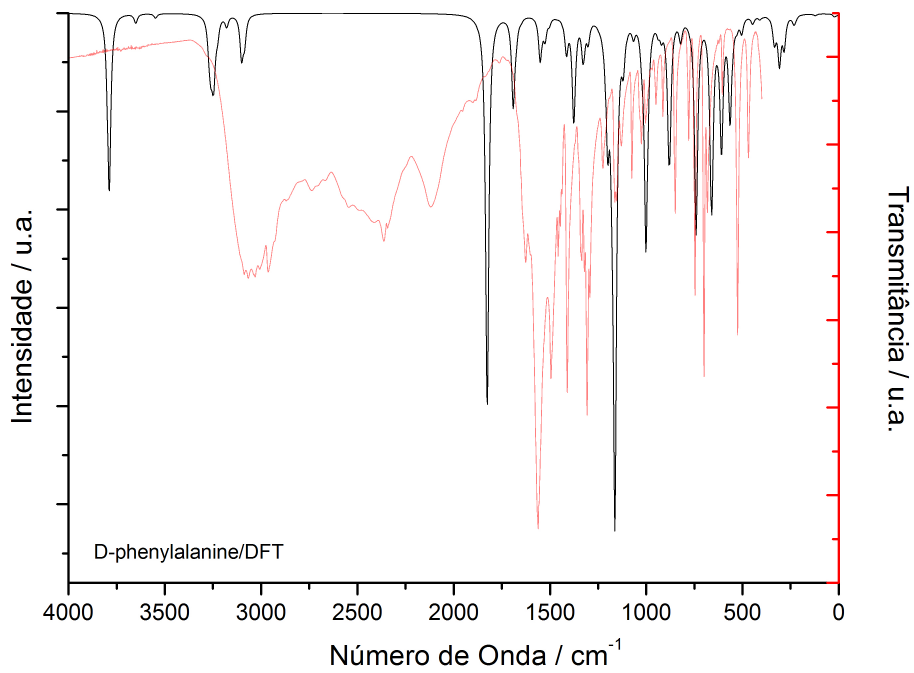


Figura 12. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}) do ácido D-Fenilalanina. Em vermelho o espectro experimental, e em preto o espectro teórico calculado pelo método DFT/6-31G(d,p)

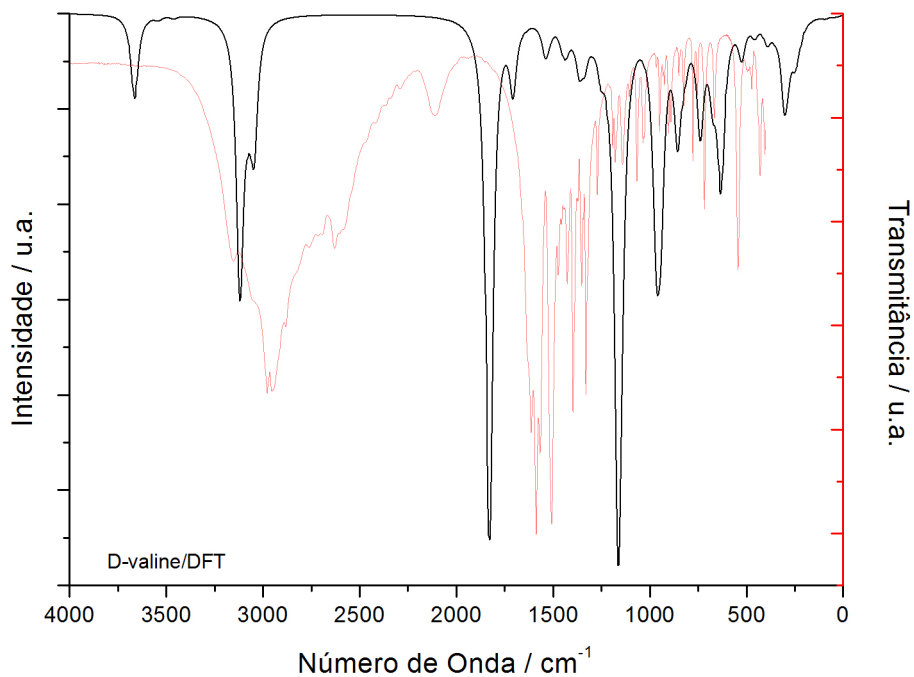


Figura 13. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido D-Valina. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método DFT/6-31G(d,p)

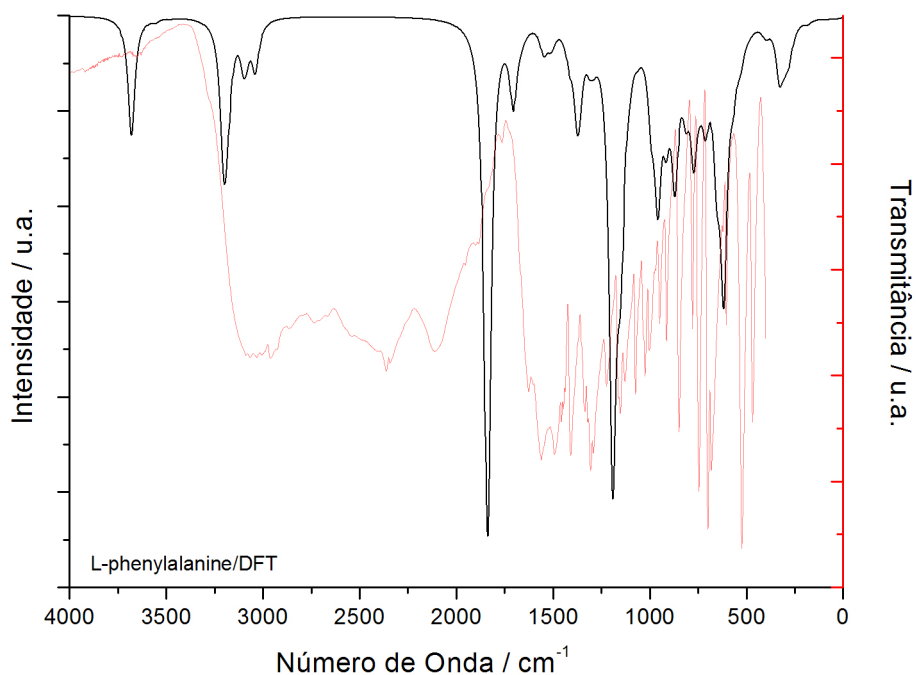


Figura 14. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do ácido L-Fenilalanina. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método DFT/6-31G(d,p)

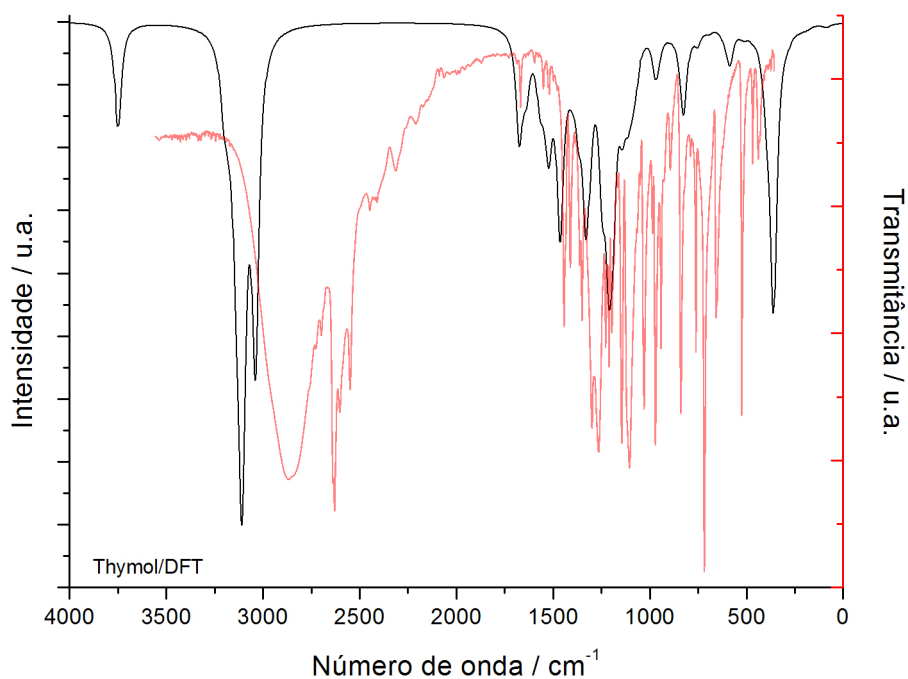


Figura 15. Espectros no infravermelho (de 4000 a 400 cm^{-1}), do Timol. Em vermelho o espectro experimental e em preto o espectro teórico calculado pelo método DFT/6-31G(d,p)