

Guía Completa de Usuario para PySimple Spectrometer

E-mail:

- Acxel Orozco: Department of Chemistry, Universidad del Valle, Cali, Colombia
- Carlos A. Galíndez: Department of Physics, Universidad del Valle, Cali, Colombia
- Abdul Reyes: Department of Physics, Universidad Andres Bello, Chile

Marco Teórico

Energía Potencial Molecular

La energía total almacenada en una molécula debido a las interacciones entre sus átomos se describe mediante un **campo de fuerzas**:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}} + E_{\text{improper}} + E_{\text{non-bonded}} \quad (1)$$

Potencial Armónico para Ángulos

La contribución angular se modela con un potencial armónico:¹

$$E_{\text{angle}} = \frac{1}{2}k_{\theta}(\theta - \theta_0)^2 \quad (2)$$

donde:

- E_{angle} : Energía potencial angular [kcal/mol]
- k_{θ} : Constante de fuerza angular [kcal/mol·rad²]
- θ : Ángulo de enlace instantáneo [grados o radianes]
- θ_0 : Ángulo de enlace de equilibrio [grados o radianes]

Potencial de Lennard-Jones

Para las interacciones de Van der Waals:^{1,2}

$$E_{\text{vdW}} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

Ley de Coulomb

Para interacciones electrostáticas:²

$$E_{\text{Coulomb}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{\epsilon_r r_{ij}} \quad (4)$$

Espectroscopía de Infrarrojo

La espectroscopía de infrarrojo se basa en la absorción de radiación electromagnética en el rango del infrarrojo por las moléculas, lo que induce transiciones entre niveles vibracionales. La condición fundamental para que una vibración sea activa en IR es que produzca un cambio en el momento dipolar de la molécula.

Función de Autocorrelación de Velocidad (VACF)

La VACF es una medida de cómo la velocidad de una partícula se correlaciona consigo misma en diferentes tiempos:³

$$C_{vv}(t) = \langle \vec{v}(t_0) \cdot \vec{v}(t_0 + t) \rangle \quad (5)$$

donde $\vec{v}(t)$ es la velocidad de la partícula en el tiempo t y $\langle \dots \rangle$ denota el promedio sobre todas las partículas y tiempos iniciales t_0 .³

Desplazamiento Cuadrático Medio (MSD)

El MSD (Mean Square Displacement) mide la difusión de partículas en el tiempo:

$$\text{MSD}(t) = \langle |\vec{r}(t_0 + t) - \vec{r}(t_0)|^2 \rangle \quad (6)$$

donde $\vec{r}(t)$ es la posición de la partícula en el tiempo t .^{4,5}

Relación entre VACF y Espectro IR

El espectro de infrarrojo se obtiene mediante la transformada de Fourier de la VACF:⁶⁻⁸

$$I(\omega) = \int_0^\infty C_{vv}(t) \cos(\omega t) dt \quad (7)$$

Esta relación se basa en el teorema de fluctuación-disipación y proporciona información sobre las frecuencias vibracionales características del sistema.

Escalas Temporales en Espectroscopía IR

Las vibraciones moleculares ocurren en la escala de femtosegundos (fs):^{7,8}

$$1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$$

$$100 \text{ fs} = 10^{-13} \text{ s}$$

Introducción a PySimple Spectrometer

PySimple Spectrometer es una aplicación gráfica desarrollada en Python utilizando PySide6 (Qt) para el análisis de espectros de infrarrojo (IR) a partir de trayectorias de dinámica

molecular generadas con LAMMPS. La aplicación calcula espectros IR mediante la transformada de Fourier de la función de autocorrelación de velocidad (VACF).

Características Principales

- Interfaz gráfica intuitiva con pestañas organizadas.⁹
- Análisis automático de espectros IR desde archivos de trayectoria LAMMPS.⁶
- Detección y clasificación inteligente de picos espectrales.^{5,7,8,10-12}
- Visualización interactiva de espectros y VACF.¹²
- Generación de datos de prueba para validación.¹⁰
- Análisis estadístico completo de los resultados.¹¹
- Exportación de reportes en múltiples formatos.
- Soporte para múltiples idiomas (español/inglés).
- Análisis por regiones espectrales personalizables.

Requisitos del Sistema

Requisitos Mínimos

- Sistema operativo: Windows 10+ o Linux moderno
- Memoria RAM: 4 GB recomendados
- Espacio en disco: 500 MB para la instalación

Distribuciones Disponibles

- Windows: Instalador ejecutable (.exe)
- Linux: Paquete Debian (.deb)
- Código fuente Python (para usuarios avanzados)

Instalación

Desde Paquete Precompilado

1. Descargar el instalador correspondiente a su sistema operativo
2. Ejecutar el instalador y seguir las instrucciones
3. La aplicación se instalará con todos los componentes necesarios

Interfaz de Usuario

La interfaz de PySimple Spectrometer está organizada en cinco pestañas principales:

1. Análisis Principal

Interfaz para cargar archivos, ejecutar análisis y visualizar resultados.

2. Metodología

Explicación detallada del fundamento teórico y metodológico.

3. Estadísticas

Análisis cuantitativo de los resultados con métricas detalladas.

4. Generador de Datos de Prueba

Herramienta para generar datos sintéticos para pruebas.

5. Autores

Información sobre los desarrolladores y instituciones involucradas.

Flujo de Trabajo Típico

1. **Seleccionar archivo:** Cargar un archivo de trayectoria LAMMPS
2. **Configurar regiones:** Definir regiones espectrales de interés
3. **Ejecutar análisis:** Procesar los datos para obtener el espectro IR
4. **Analizar resultados:** Examinar picos y características espectrales
5. **Exportar reporte:** Guardar los resultados en formato PDF/HTML

Formatos de Archivo Soportados

PySimple Spectrometer soporta los siguientes formatos:

- Archivos de texto con datos VACF de LAMMPS (.dat, .txt, .out)
- Formatos estructurados con columnas de tiempo y VACF
- Archivos de configuración JSON para parámetros de análisis

Análisis de Regiones Espectrales

La aplicación permite definir regiones espectrales personalizadas para el análisis de picos:

Cuadro 1: Regiones espectrales predefinidas en PySimple Spectrometer

Región	Rango (cm^{-1})	Descripción
Bending	1500-1700	Vibraciones de flexión
Stretching	3000-3800	Vibraciones de estiramiento
Low Frequency	500-1500	Vibraciones de baja frecuencia
Fingerprint	500-1500	Región de huella digital
Carbonyl	1500-1800	Grupos carbonilo
C-H Stretching	2800-3200	Estiramientos C-H
O-H/N-H Stretching	3200-3600	Estiramientos O-H/N-H

Parámetros de Análisis Configurables

Los usuarios pueden ajustar varios parámetros de análisis:

- Rango espectral de interés (cm^{-1})
- Resolución espectral
- Tipo de ventana para la transformada de Fourier
- Tiempo máximo de correlación para VACF
- Umbrales para detección de picos
- Regiones personalizadas para búsqueda de picos

Interpretación de Resultados

PySimple Spectrometer proporciona varias herramientas para interpretar resultados:

Visualización Gráfica

- Espectro IR con picos identificados y etiquetados
- Función de autocorrelación de velocidad (VACF)
- Comparación entre VACF original y filtrada

Tabla de Picos

Información detallada sobre cada pico detectado:

- Frecuencia (cm^{-1}) en notación científica
- Intensidad relativa
- Región espectral
- Clasificación del tipo de vibración

Estadísticas

Métricas cuantitativas del análisis:

- Potencia total del espectro
- Frecuencia media
- Ancho de banda
- Intensidad máxima
- Rango dinámico
- Distribución de picos por regiones

Generador de Datos de Prueba

Para fines educativos y de validación, la aplicación incluye un generador de datos de prueba que simula el espectro IR del agua.

Exportación de Resultados

Los resultados pueden exportarse en múltiples formatos:

- Datos numéricos en formato CSV
- Imágenes de alta resolución (PNG, SVG)
- Configuraciones de análisis para reproducibilidad

Características Avanzadas

Análisis Combinado

Comparación de múltiples espectros en una sola visualización.

Personalización de Regiones

Herramienta visual para definir regiones espectrales personalizadas.

Ventana Independiente

Visualización de gráficos en ventanas separadas de matplotlib.

Soporte Multidioma

Interfaz disponible en español e inglés.

Resolución de Problemas

Problemas Comunes

- **Archivos corruptos:** Verificar el formato del archivo de entrada
- **Falta de memoria:** Cerrar otras aplicaciones o usar equipos con más RAM
- **Errores de visualización:** Actualizar controladores gráficos

Recursos de Ayuda

- Manual de usuario integrado en la aplicación
- Tooltips y mensajes de ayuda contextual
- Foros de discusión y soporte técnico

Ejemplos de Aplicación

PySimple Spectrometer se puede utilizar para:

- Análisis de espectros IR de simulaciones de dinámica molecular
- Identificación de modos vibracionales en moléculas
- Comparación entre resultados teóricos y experimentales
- Enseñanza de conceptos de espectroscopía computacional
- Investigación en química física y ciencia de materiales

Limitaciones y Consideraciones

- La precisión depende de la calidad de los datos de entrada
- El análisis asume comportamiento armónico para las vibraciones
- La resolución espectral está limitada por el tiempo de simulación
- La detección de picos puede requerir ajuste manual de parámetros

Próximas Actualizaciones

Las futuras versiones de PySimple Spectrometer incluirán:

- Soporte para más formatos de archivo

- Análisis de espectros Raman
- Herramientas de ajuste espectral
- Integración con bases de datos espectrales
- Análisis de moléculas en fase condensada

Referencias

- (1) Jorgensen, W. L.; Maxwell, D. S.; Tirado-Rives, J. Development and testing of the OPLS all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids. *Journal of the American Chemical Society* **1996**, *118*, 11225–11236.
- (2) Plimpton, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics* **1995**, *117*, 1–19.
- (3) McQuarrie, D. A. *Statistical mechanics*; Harper & Row, 1975.
- (4) Frenkel, D.; Smit, B. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*; Academic Press, 2004.
- (5) Rapaport, D. C. *The art of molecular dynamics simulation*; Cambridge University Press, 2010.
- (6) Thompson, A. P.; Aktulga, H. M.; Berger, R.; Bolintineanu, D. S.; Brown, W. M.; Crozier, P. S.; in't Veld, P. J. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *arXiv preprint arXiv:2503.14020* **2025**,
- (7) Griffiths, P. R.; de Haseth, J. A. *Fourier transform infrared spectrometry*; John Wiley & Sons, 2015.

- (8) Press, W. H.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T.; Flannery, B. P. *Numerical recipes: The art of scientific computing*; Cambridge University Press, 2007.
- (9) The Qt Company PySide6: Python bindings for the Qt cross-platform application and UI framework. <https://www.qt.io/pyside6>, 2023.
- (10) Harris, C. R.; Millman, K. J.; van der Walt, S. J.; Gommers, R.; Virtanen, P.; Cournapeau, D.; Oliphant, T. E. Array programming with NumPy. *Nature* **2020**, *585*, 357–362.
- (11) Virtanen, P.; Gommers, R.; Oliphant, T. E.; Haberland, M.; Reddy, T.; Cournapeau, D.; SciPy 1.0 Contributors SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nature Methods* **2020**, *17*, 261–272.
- (12) Hunter, J. D. Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering* **2007**, *9*, 90–95.