



SQ-f004

1. Introducción

En este informe se describe el funcionamiento de la plataforma desarrollada para la generación de archivos de entrada típicos de SQUAD (archivo.dat). El programa permite leer datos desde un archivo Excel, distribuidos de manera específica, además permite visualizar los datos en tiempo real, realizar recorten en longitudes de onda y finalmente generar el archivo deseado. Debido a que la versión de SQUAD compilada no incluye corrección en la temperatura ni en la fuerza iónica, esto no está considerado en este programa.

2. El archivo de entrada (Excel).

Este archivo deberá contener tres hojas diferentes

Absorbancia	Condiciones	Diccionario
-------------	-------------	-------------

cuyo nombre debe ser respetado para su correcto funcionamiento.

Hoja 1: **Absorbancia**

Esta hoja deberá colocarse la matriz de absorbancias, donde las columnas son los espectros individuales.

	A	B	C	D	E	F	G
1	Longitud de onda (nm)	pH 3.0	pH 3.6	pH 4.0	pH 4.6	...	pH n
2	230	0.2207	0.2258	0.2287	0.2379
3	231	0.2280	0.2335	0.2367	0.2465
4	232	0.2350	0.2406	0.2445	0.2550
5	233	0.2429	0.2488	0.2537	0.2643
6	234	0.2501	0.2574	0.2614	0.2718
7	235	0.2577	0.2653	0.2689	0.2795
8	236	0.2660	0.2733	0.2775	0.2883
9
10	longitud de onda n

El programa no requiere de un control específico en la cantidad de decimales.

Hoja 2: **Condiciones**



Los nombres de los encabezados en esta hoja deberán ser los mismos que se presentan en el ejemplo preferentemente en las mismas casillas:

A1: Muestra

B1:[LIG1]

C1:[LIG2]

D1:[MTL1]

E1:[MTL2]

F1:pH

	A	B	C	D	E	F
1	Muestra	[LIG1]	[LIG2]	[MTL1]	[MTL2]	pH
2	pH 1.563	8.0873E-05	0	0	0	1.5630
3	pH 2.191	8.0873E-05	0	0	0	2.1910
4	pH 3.017	8.0873E-05	0	0	0	3.0170
5	pH 4.02	8.0873E-05	0	0	0	4.0200
6	pH 5.177	8.0873E-05	0	0	0	5.1770
7	pH 6.183	8.0873E-05	0	0	0	6.1830

SQUAD permite concentraciones límite de **00.00000001 M**, cualquier concentración colocada se traducirá en automático a este formato:

8.0873E-05 -> 0.00008087 redondeando la cifra en el noveno decimal.

El 0 representa que no hay que considerarlo en el programa.

Hoja 3:**Diccionario**

En esta hoja se debe colocar en las casillas:

A1:Título

A2:Fecha

A3:LIG1

A4:LIG2

A5:MTL1

A6:MTL2

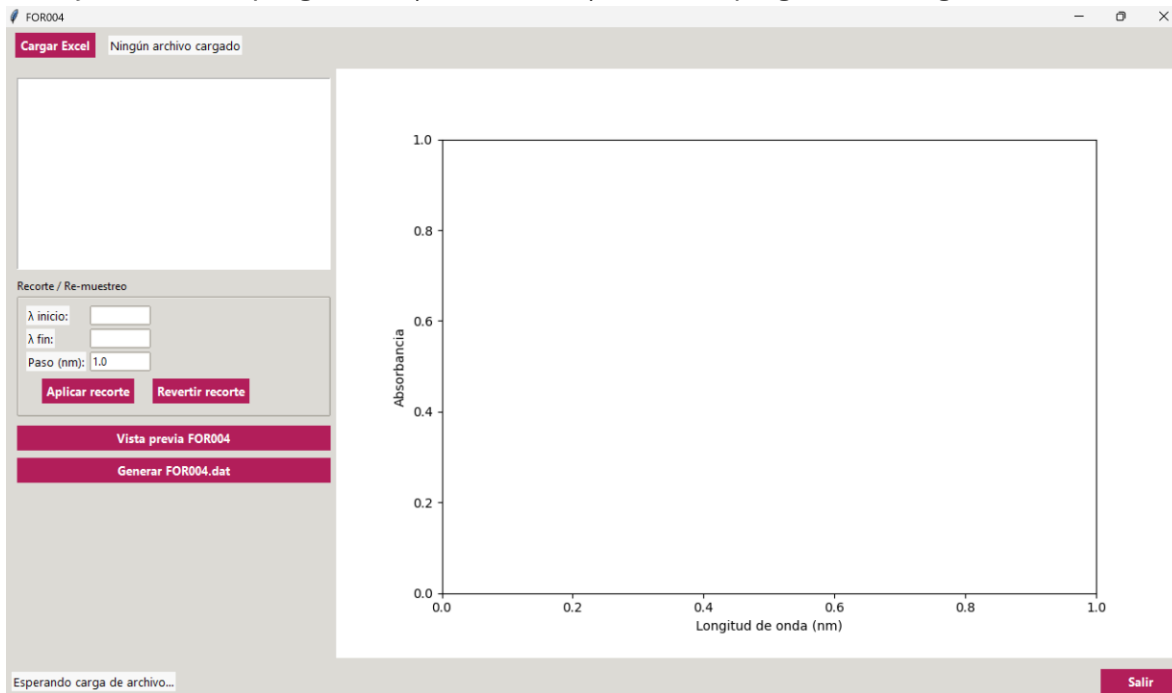
A7:PROT

	A	B
1	Título	ArchivoPrueba
2	Fecha	02/12/2025
3	LIG1	BISA
4	LIG2	0
5	MTL1	0
6	MTL2	0
7	PROT	H

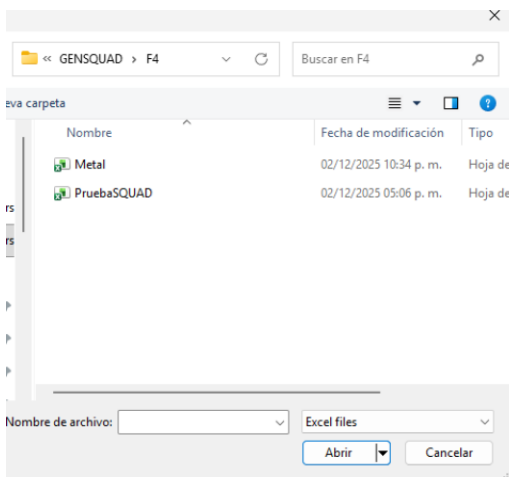


3. La interfaz.

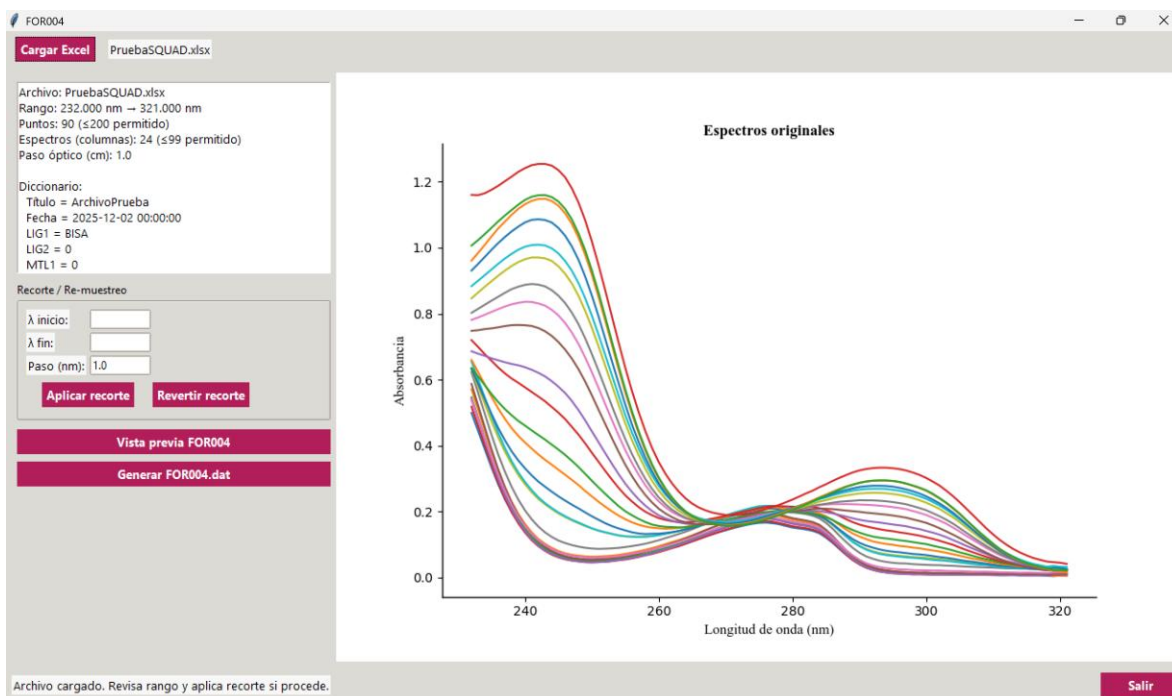
Al ejecutar el programa (SQ-f004.exe) se desplegará la siguiente ventana.



Lo primero que hay que hacer es cargar el archivo Excel armado según el punto (2), dando clic en el botón **Cargar Excel**, la siguiente ventana se desplegará para la selección del archivo.



Tras la carga del archivo, automáticamente se deberán presentar los espectros si es que los datos fueron cargados correctamente y la interfaz deberá cambiar de manera similar a la siguiente captura.



En un frame de lado izquierdo se presentará en texto lo siguiente:

Archivo: **Nombre_del_archivo.xlsx**

Rango: **Longitud_de_onda inicial nm → Longitud_de_onda final nm**

Puntos: **Puntos de absorbancia por espectro (≤200 permitido)**

Espectros (columnas): **Cantidad de espectros cargados (≤99 permitido)**

Paso óptico (cm): **1.0**

Diccionario:

Título = **Nombre del título para el archivo for004.dat**

Fecha = **Fecha colocada en el archivo Excel**

LIG1 = **Ligante 1 definido en el diccionario**

LIG2 = **Ligante 2 definido en el diccionario**

MTL1 = **Metal 1 definido en el diccionario**

MTL2 = **Metal 2 definido en el diccionario**



Recorte / Re-muestreo

λ inicio:

λ fin:

Paso (nm):

Aplicar recorte **Revertir recorte**

Esta sección puede ser usada en caso de requerir cortar los datos a decisión del usuario ya sea por exceso de datos o elección.

Se colocan el rango y se aplica el recorte con el botón **Aplicar recorte** inmediatamente la gráfica debe cambiar.

Archivo: PruebaSQUAD.xlsx
Rango: 232.000 nm → 321.000 nm
Puntos: 90 (≤ 200 permitido)
Espectros (columnas): 24 (≤ 99 permitido)
Paso óptico (cm): 1.0

Diccionario:
Título = ArchivoPrueba
Fecha = 2025-12-02 00:00:00
LIG1 = BISA
LIG2 = 0
MTL1 = 0

Recorte / Re-muestreo

λ inicio:

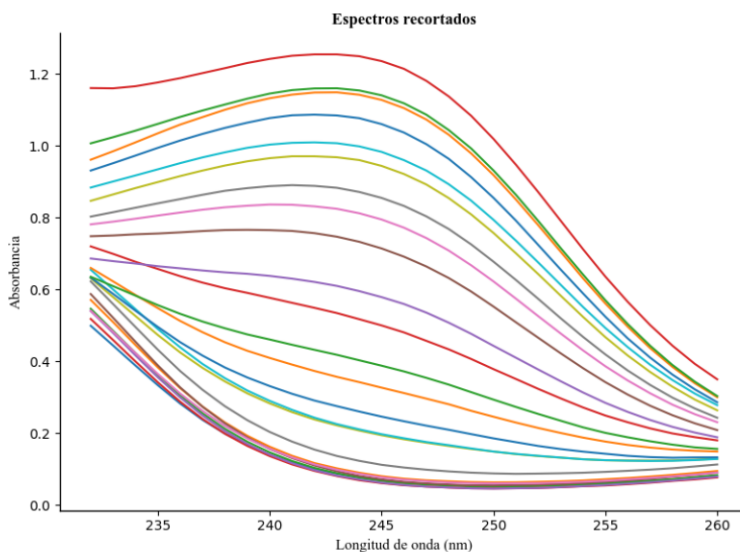
λ fin:

Paso (nm):

Aplicar recorte **Revertir recorte**

Vista previa FOR004

Generar FOR004.dat



En caso de requerir regresar al original recurrir al botón **Revertir recorte**

Para verificar que el archivo se ha generado correctamente es posible obtener una vista previa del archivo con el botón **Vista previa FOR004**.



```
Vista previa FOR004.dat

ArchivoPrueba
2025-12-02 00:00:00
DICTIONARY:
LIG1=BISA;PROT=H:
END:
SPECIES:
PROB(1)H(1);10.45;VB;VE:
END:
OTHER:
BISA;VE:
END:
DATA:
232.0      321.0      1.0
LOGB
PRINT
CARD
NNLS
PLOT 1
CRT
400
1.0
SPECTRA:
00.0000000000.0000000000.0000808700.00000000 1.5630 1.0
0.4990 0.4439 0.3881 0.3334 0.2823 0.2370 0.1987 0.1668
0.1401 0.1187 0.1006 0.0874 0.0769 0.0684 0.0621 0.0581
0.0555 0.0536 0.0536 0.0538 0.0544 0.0561 0.0581 0.0606
0.0640 0.0676 0.0711 0.0757 0.0809 0.0864 0.0921 0.0973
0.1031 0.1100 0.1172 0.1241 0.1309 0.1374 0.1431 0.1489
0.1541 0.1590 0.1628 0.1658 0.1665 0.1647 0.1616 0.1563
0.1515 0.1486 0.1457 0.1415 0.1345 0.1211 0.1052 0.0868
0.0693 0.0534 0.0413 0.0315 0.0251 0.0201 0.0173 0.0147
0.0134 0.0126 0.0117 0.0113 0.0108 0.0103 0.0100 0.0095
0.0094 0.0092 0.0085 0.0084 0.0081 0.0083 0.0076 0.0069
0.0074 0.0071 0.0065 0.0067 0.0065 0.0067 0.0058 0.0042
0.0063 0.0049
```

Finalmente para generar el archivo cuyo nombre será siempre FOR004.dat, solamente debe usar el botón Generar **FOR004.dat**

El archivo generado se encontrará casi listo para correr, solo hará falta incorporar las especies en la sección SPECIES que por defecto incorporan el siguiente esquema:

SPECIES:

PROB(1)H(1);10.45;VB;VE:

END:

Solo debe ser cambiado en base a la definición del diccionario y las especies que el usuario proponga.