

## Ajustando sua medida para a entrada de dados do programa CDProWin7

Para ajustar sua medida ao formato de entrada de dados do pacote CDProWin7, você precisará do programa CRDataWin7 (que está dentro do pacote CDProWin7). Este programa criará o arquivo de dados de entrada (Input.SMP) para os programas: SelconWin7, CDSSTRWin7 e CONTIN LLWin7.

Existem duas formas para fazer o arquivo de entrada. Escolhendo a opção tipo 0 um novo arquivo de entrada é criado, substituindo a entrada anterior pela nova. Já, a opção tipo 1 permite que dados sejam acrescentados ao arquivo de entrada existente. A figura a seguir ilustra o exemplo.

```
This PROGRAM creates the INPUT file for CDPro Programs
Some of the values are accepted interactively
The CD data is read from a file with TWO VALUES per line
First value is the WAVELENGTH, second CD DATA
The wavelength is in the same order as range: say 260-180

Do you want to create a new INPUT file?

If You Want to CREATE a NEW INPUT file, TYPE 0
If you want to APPEND the existing INPUT file TYPE 1
```

No caso do exemplo aqui é escolhida a opção tipo 0, onde uma nova entrada de dados será criada. Deverá ser informado um título para seus dados, o qual pode ter, no máximo, até 40 caracteres. Veja o exemplo a seguir:

```
This PROGRAM creates the INPUT file for CDPPro Programs
Some of the values are accepted interactively
The CD data is read from a file with TWO VALUES per line
First value is the WAVELENGTH, second CD DATA
The wavelength is in the same order as range: say 260-180
```

```
Do you want to create a new INPUT file?
```

```
  If You Want to CREATE a NEW INPUT file, TYPE 0
```

```
  If you want to APPEND the existing INPUT file  TYPE 1
```

```
0
```

```
Any existing File: INPUT will be OVERWRITTEN
```

```
Enter TITLE for your data - 40 characters
```

```
my_teste
```

```
TITLE:  my_teste
```

Na medida realizada o eixo n(do comprimento de onda) terá A forma como dados de CD estão no arquivo deve ser indicada, por exemplo: 250,251,252..., ou seja se estão de 1 em 1nm, 2 em 2nm ou 5 em 5nm. Em nosso exemplo, o intervalo é de 1 em 1.

```
The number of lines to be skipped in CD file
Enter the number of CD values per nm
IF the DATA is .. 240nm, 241nm, 242nm etc. enter 1
IF the DATA is .. 240nm, 240.5nm, 241nm etc. enter 2
IF the DATA is .. 240nm, 240.2nm, 240.4nm etc. enter 5
```

```
1
```

```
Number of lines per nm in CD datafile  1
Resolution of CD data: 1.00 nm
```

Os valores de inicio e fim do comprimento da onda têm que ser informados, sempre do maior para o menor.

```
INPUT INITIAL wavelength:
```

```
250
```

```
INPUT FINAL wavelength:
```

```
190
```

```
Wavelength Range:  250.0 190.0 nm
```

Deve ser indicado se os dados estão em unidades de elipticidade molar, caso estejam escolha o tipo 1, para que o programa converta-os para valores em delta(e), senão escolha o tipo 0.

```
Is the CD data in Molar Ellipticity Units?  
IF IT IS TYPE 1; IF NOT TYPE 0  
If YOU TYPE 1 DATA WILL BE CONVERTED TO DELTA<e>  
1
```

```
CD DATA IS IN MOLAR ELLIPTICITY UNITS.  
IT WILL BE CONVERTED TO DELTA<e> UNITS.
```

Aqui deve ser digitado o nome do arquivo que possui os dados do CD (inclusive a extensão do arquivo). Este arquivo deve ser em formato ASCII, podendo ser editado em qualquer editor de texto como, por exemplo, o bloco de notas do Windows.

Para finalizar aperte *Enter* e confirme a operação. Caso queira cancelar a operação aperte as teclas *Ctrl* e *C*.

```
ASCII-file name <CD data>-MAX of 12 letters  
arquivo.dat  
CD data is contained in File:arquivo.dat  
  
Step Resolution in JASCO file was 1.00 nm  
If it is not betn .05 and 1.0, collect data in this range  
Every 0 line(s) will be skipped in arquivo.dat  
  
Hit ENTER to CONTINUE  
Ctrl-C to ABORT
```

O CRDataWin7 colocará seus dados na forma matricial, num arquivo chamado input que conterá a base escolhida.