

# ELABORAÇÃO DE PROGRAMAS PARA ANÁLISE DE DADOS E REMOÇÃO DE BACKGROUND EM ESPECTROSCOPIA RAMAN

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Isaac Taumaturgo Pinto, Luan Misael Gomes de Moura, Ludwing Ferney Marenco Camacho, Carlos Lenz Cesar

Apresenta-se uma metodologia para o análise de Espectros Raman. Usando métodos computacionais pode-se retirar o background dos espectros Raman. O trabalho mostra a construção do código que automatiza a tarefa de remoção do background. Os espectros usados foram obtidos em parceria entre os Departamentos de Física da UFC e a UNICAMP. Os códigos foram desenhados em Python usando a interface gráfica Cocalc . Na análise de dados em Espectroscopia Raman , durante a confecção de gráficos, faz-se necessário o uso de técnicas para remover dados de espectros externos (background) ao sistema estudado, 'suavizando' o gráfico. Usando métodos computacionais, a análise de dados se torna algo bem mais rápido e simples. Neste trabalho, explicitaremos os métodos para a construção de códigos para Análise Automática de Dados Raman, utilizando resultados de experimentos feitos em parceria entre UFC e UNICAMP. Os programas foram escritos em Python , usando o programa open-source Jupyter e o emulador online CoCalc para criação e edição de programas. Os códigos fizeram uso do Filtro de Savitzky-Golay , por meio do comando `scipy.signal.savgol_filter()` . Além disso, comandos para o cálculo de Estimativa de Densidade Kernel e interpolação linear unidimensional de dados foram extremamente úteis para remoção do background e suavização das curvas. Os gráficos mais 'limpos' facilitaram a análise das amostras, e de antemão servirão de base para futuros trabalhos oriundos da parceria da UFC com outras instituições de ensino.

Palavras-chave: Background. Python. Raman. Savitzky-Golay.