

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

IC75

Processamento de dados na espectroscopia Raman

MILITAO, Lucas; ELLENA, Javier Alcides

lucas.milito@usp.br

A Espectroscopia Raman, que envolve o fenômeno de espalhamento inelástico da luz, é utilizado para identificar modos vibrationais de uma molécula. Para a análise de espectros é utilizado o deslocamento Raman, que é a diferença de energia entre a luz da fonte monocromática incidente e a da luz espalhada. Essa diferença pode ser interpretada como a energia dos modos vibrationais da molécula ou de grupos funcionais. Variando o comprimento de onda da fonte monocromática incidente é possível evitar fenômenos indesejados, tais como fluorescência, que podem interferir na qualidade dos dados coletados. Neste trabalho são abordados passos seguintes a coleta de dados pelo espectrômetro, os passos de processamento, interpretação e comparação de dados. Esses passos serão realizados por um software em desenvolvimento nesse projeto. O foco desse projeto é na identificação dos grupos funcionais de uma molécula, tal como um insumo farmacêutico ativo (IFA), a partir do tratamento de dados provenientes da espectroscopia Raman. Uma pergunta contundente seria o porque não utilizar espectroscopia de absorção ou outros tipos de espectroscopia. O motivo principal para escolha da espectroscopia Raman é que ela pode ser utilizada sem preparação da amostra sendo também não destrutiva o que permite que seja utilizada diretamente na linha de produção para controle de qualidade dos fármacos. Resultados preliminares incluem uma interface e uma framework de desenvolvimento selecionada. Foi implementado o método de Savitzky-Golay (1) para diminuição de ruído. Também é planejada a implementação de algoritmos customizados para remoção de ruído. (2) O uso de cristalografia Raman (3) também é uma proposta que será abordada na continuação do projeto já aprovada pelo CNPq.

Palavras-chave: Espectroscopia. Raman. Física do estado sólido.

Agência de fomento: CNPq (148753/2021-3)

Referências:

- 1 BARTON, S.; WARD, T.; HENNELLY, B. Algorithm for optimal denoising of Raman spectra. *Analytical Methods*, v. 10, n. 30, p. 3759-3769, 2018.
- 2 GALLAGHER, N. **Savitzky-Golay smoothing and differentiation filter**. 2020. Disponível em: <https://eigenvector.com/wp-content/uploads/2020/01/SavitzkyGolay.pdf>. Acesso em: 10 ago. 2022.
- 3 TUSCHEL, D. **Raman crystallography**. 2022. Disponível em: <https://www.spectroscopyonline.com/view/raman-crystallography>. Acesso em: 9 ago. 2022.