



Ministério da
**Ciência, Tecnologia
e Inovação**



sid.inpe.br/mtc-m21b/2014/05.27.14.01-PUD

PROGRAMA PARA UNIR OS DADOS DO ESPECTRO RAMAN

Miguel Angelo do Amaral Junior

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP5W34M/3GCKFFS>>

INPE
São José dos Campos
2014

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Gabinete do Diretor (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970

São José dos Campos - SP - Brasil

Tel.:(012) 3208-6923/6921

Fax: (012) 3208-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO E PRESERVAÇÃO DA PRODUÇÃO INTELLECTUAL DO INPE (RE/DIR-204):**Presidente:**

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Membros:

Dr. Antonio Fernando Bertachini de Almeida Prado - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espacial (ETE)

Dr^a Inez Staciarini Batista - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT)

Dr. Germano de Souza Kienbaum - Centro de Tecnologias Especiais (CTE)

Dr. Manoel Alonso Gan - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Plínio Carlos Alvalá - Centro de Ciência do Sistema Terrestre (CST)

BIBLIOTECA DIGITAL:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT)

REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Yolanda Ribeiro da Silva Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID)

EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Maria Tereza Smith de Brito - Serviço de Informação e Documentação (SID)

André Luis Dias Fernandes - Serviço de Informação e Documentação (SID)



Ministério da
**Ciência, Tecnologia
e Inovação**



sid.inpe.br/mtc-m21b/2014/05.27.14.01-PUD

PROGRAMA PARA UNIR OS DADOS DO ESPECTRO RAMAN

Miguel Angelo do Amaral Junior

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP5W34M/3GCKFFS>>

INPE
São José dos Campos
2014



Esta obra foi licenciada sob uma Licença Creative Commons Atribuição-NãoComercial 3.0 Não Adaptada.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 3.0 Unported License.

-*- coding: utf-8 -*-

''',-----

Titulo: Programa para unir os dados do Espectro Raman.

Descrição do Programa: Os usuários do Laboratório Associado de Sensores e Materiais (LAS) obtém o Espectro Raman das amostras através do equipamento MicroRaman Sistema 2000 da Renishaw. Infelizmente, é um equipamento antigo. A obtenção do espectro Raman neste equipamento só é obtido em intervalos de 800cm^{-1} . Isto se tornou um problema para os usuários que necessitam adquirir o espectro estendido. Atualmente o espectro Raman é feito da seguinte forma; o usuário faz o Raman do espectro por partes. Deve-se no final unir o espectro Raman manualmente e realizar o cálculo da diferença das Intensidades. Este programa tem como objetivo agrupar os espectrometro Raman obtidos por partes em um unico espectro, criando assim, um arquivo novo contendo todo o espectro estendido da amostra.

Instalar: Python2.7

Resumo:

1-) Crie duas pasta, uma com o nome de "entrada" e a outro de "saida".

2-) Coloque os dados extraídos do espectro Raman na pasta "entrada".

3-) Nomear o arquivo na seguinte forma:

Nome da amostra, seguido de "_", numero do espectro obtido por partes.

Exemplo: nome_1.asc, nome_2.asc, nome_3.asc ...

4-) Click no programa chamado "Programa.py" para executar o arquivo.

5-) Resultado: dentro da pasta "saida", um documento em formato texto será criado contendo todo espectro

Raman agrupado de forma correta.

Exemplo: nome.txt

-----',',

```

import os

diretorio_principal=os.getcwd()

os.chdir('./entrada')

lista=os.listdir('.')

txts=[]

for i in range(0,len(lista)):

    if (lista[i].find('.ASC') == -1):#find quando n?tem ele retorna -1

        continue

    else:

        txts.append(lista[i])

RAMAN=[]

INTENSIDADE=[]

for arquivo in range(0,len(txts)):

    arq_saida=open(txts[arquivo].split('.')[0]+' .txt', 'w')

    arq_entrada=open(txts[arquivo], 'r')

    arq_dados=arq_entrada.readlines()

    arq_entrada.close()

    for linha in range(0,len(arq_dados)):

        dados= arq_dados[linha].split(' ')

        while True:

```

```

        try:
            dados.remove('')
        except ValueError:
            break

    try:
        INTENSIDADE.append(dados[1])
        RAMAN.append(dados[0])
    except IndexError:
        break

for i in range(0, len(RAMAN)):

    escrever = "%s%s" % (RAMAN[i], INTENSIDADE[i])
    arq_saida.write(escrever)

RAMAN=[]
INTENSIDADE=[]

arq_saida.close()

lista=os.listdir('.')
txts=[]

for i in range(0, len(lista)):
    if (lista[i].find('.txt') == -1):#find quando n?tem ele retorna -1
        continue
    else:

```

```
txts.append(lista[i])
```

```
os.chdir(diretorio_principal)
```

```
saida='./saida/'+txts[0].split("_")[0]+'.txt'
```

```
arq_saida=open(saida,'w')
```

```
os.chdir(diretorio_principal)
```

```
os.chdir('./entrada')
```

```
RAMAN =[]
```

```
INTENSIDADE =[]
```

```
for arquivo in range(0, len(txts)):
```

```
    arq_entrada=open(txts[arquivo], 'r')
```

```
    arq_dados=arq_entrada.readlines()
```

```
    arq_entrada.close()
```

```
    txts_n = txts[arquivo].split("_")
```

```
    k= int(txts_n[1][0:1])
```

```
    n=0
```

```
    if k > 1:
```

```
        while True:
```

```
            dadoss = arq_dados[n].split(',')
```



```

intensidade= dados[1]

raman= dados[0]

if float(RAMAN[len(RAMAN)-1]) < float(raman):

    constante = float(INTENSIDADE[len(INTENSIDADE)-1]) -
float(intensidade)

    break

else:

    n=n+1

for linha in range(0, len(arq_dados)):

    dados= arq_dados[linha].split(',')

    raman= dados[0]

    intensidade= dados[1]

    if RAMAN == []:

        RAMAN.append(float(raman))

        INTENSIDADE.append(float(intensidade))

```

```
if float(RAMAN[len(RAMAN)-1]) < float(raman):
```

```
    if k > 1:
```

```
        RAMAN.append(float(raman))
```

```
        INTENSIDADE.append(float(intensidade)+constante)
```

```
    else:
```

```
        RAMAN.append(float(raman))
```

```
        INTENSIDADE.append(float(intensidade))
```

```
for i in range(0, len(RAMAN)):
```

```
    escrever = "%.5f    %.5f\n" % (RAMAN[i], INTENSIDADE[i])
```

```
    arq_saida.write(escrever)
```

```
arq_saida.close()
```

```
for j in range(0, len(txts)):
```

```
    os.system("del "+txts[j])
```



Manual do Programa

Aluno: Miguel Angelo do Amaral Junior.

Orientador: Maurício Ribeiro Baldan.

“Programa para unir os dados do Espectro Raman.”

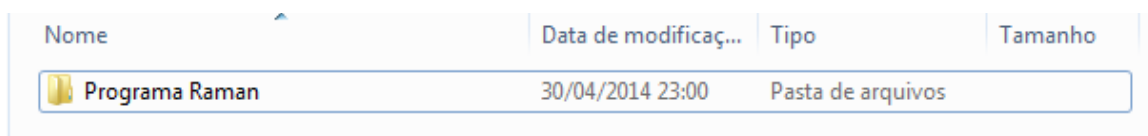
DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

Os usuários do Laboratório Associado de Sensores e Materiais (LAS) obtém o Espectro Raman das amostras através do equipamento MicroRaman Sistema 2000 da Renishaw. Infelizmente, é um equipamento antigo. A obtenção do espectro Raman neste equipamento só é obtido em intervalos de 800cm^{-1} . Isto se tornou um problema para os usuários que necessitam adquirir o espectro estendido. Atualmente o espectro Raman é feito da seguinte forma; o usuário faz o espectro Raman por partes. Deve-se no final unir as partes do espectro Raman manualmente para a obtenção de um espectro contínuo. Este programa tem como objetivo agrupar as parte do espectrometro Raman obtidos em um único espectro, criando assim, um arquivo novo contendo todo o espectro estendido da amostra.

Abril de 2014

COMO UTILIZAR O PROGRAMA

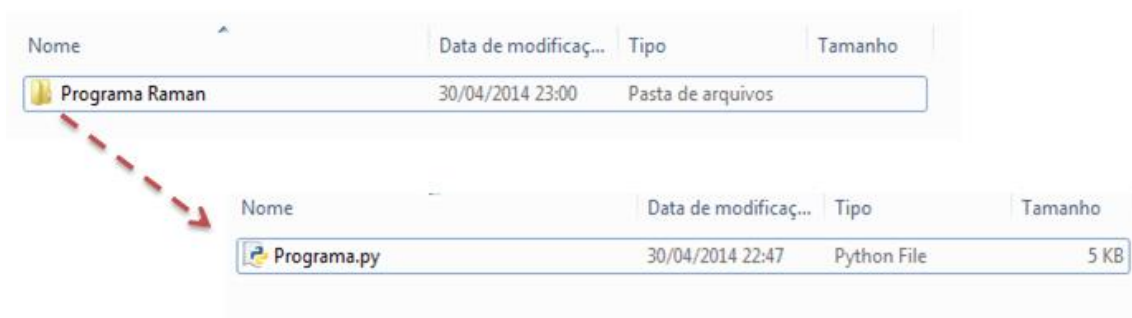
Primeiramente, deve ser instalado a linguagem de programação Python em seu computador (Python 2.7 link: www.python.org). Após a instalação, abaixe o programa da biblioteca online do INPE. Para fins de organizar seus resultados, crie uma pasta qualquer com nome, por exemplo, “Programa Raman” (Figura 1).



Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
Programa Raman	30/04/2014 23:00	Pasta de arquivos	

Figura 1: Pasta com nome Programa Raman.

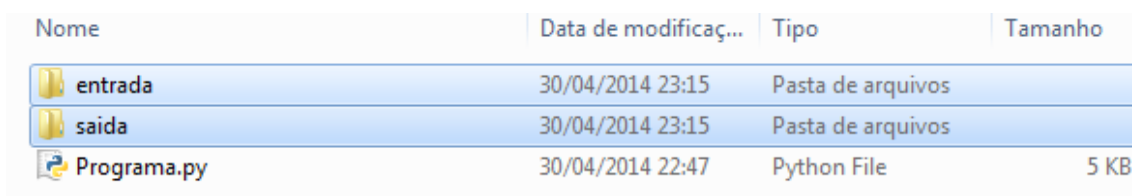
Em seguida, abra a pasta “Programa Raman” e copie o programa em formato python (.py) para dentro da pasta (Figura 2).



Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
Programa Raman	30/04/2014 23:00	Pasta de arquivos	
Programa.py	30/04/2014 22:47	Python File	5 KB

Figura 2: Copiar o programa para pasta “Programa Raman”.

Então, crie duas pastas dentro da pasta “Programa Raman”. Uma com nome de “entrada” e a outra “saida” (Não utilize letras maiúsculas e regra de pontuação para a pasta), veja Figura 3.



Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
entrada	30/04/2014 23:15	Pasta de arquivos	
saida	30/04/2014 23:15	Pasta de arquivos	
Programa.py	30/04/2014 22:47	Python File	5 KB

Figura 3: Crie as pastas “entrada” e “saida”.

Para que o programa funcione corretamente, nomeie os arquivos que contem o espectro Raman das amostras como “nome_numero.asc”.

Finalmente, insira os dados dentro da pasta “entrada”. A Figura 4 exibe um exemplo de como nomear seus dados corretamente.





Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
 exemplo_1.ASC	31/03/2014 11:49	Arquivo ASC	20 KB
 exemplo_2.ASC	31/03/2014 11:49	Arquivo ASC	20 KB
 exemplo_3.ASC	31/03/2014 11:49	Arquivo ASC	20 KB
 exemplo_4.ASC	31/03/2014 11:49	Arquivo ASC	20 KB

Figura 4: Exemplo de como nomear seus dados.

Feito isto, basta apenas executar o programa “Programa.py”. O resultado se encontrara dentro da pasta “saída”, o qual será nomeado como “nome.txt” (depende do nome dado aos dados). Veja a Figura 5.


Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
 exemplo.txt	30/04/2014 22:42	Documento de Te...	45 KB

Figura 5: Arquivo final gerado pelo programa.

Abaixo é exibido um exemplo do espectro Raman ajustado com o programa (Figura 6). A figura abaixo se trata do espectro Raman de uma amostra de fibra de carbono, a qual, passou pelo tratamento do programa.

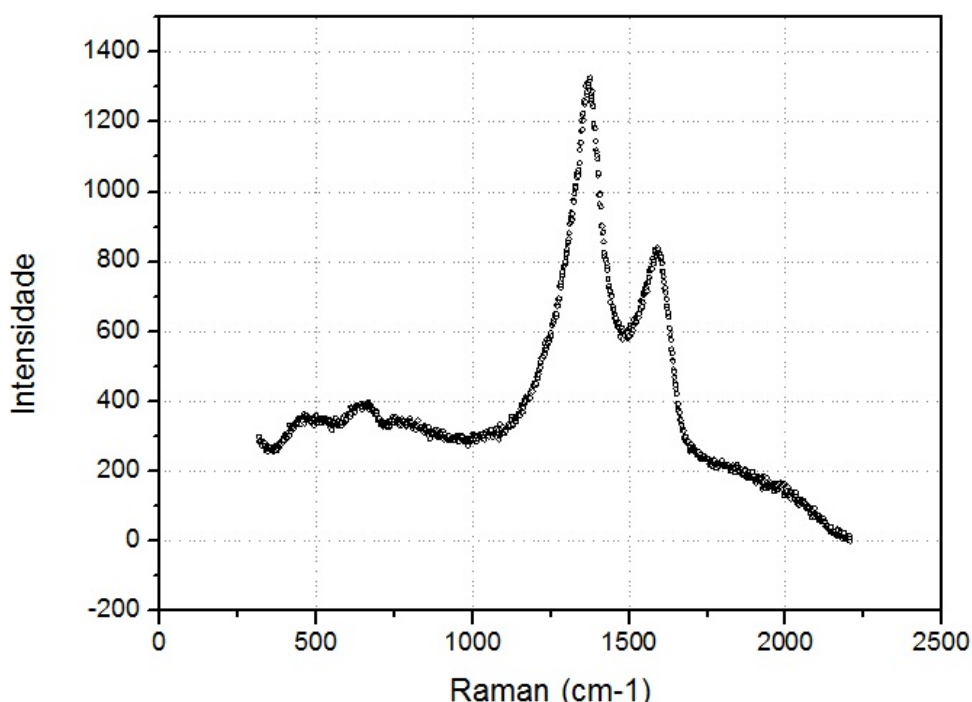


Figura 6: Espectro Raman de uma amostra de Fibra de Carbono.