

Istruzioni

La cartella contiene:

- Il pdf "Note per gli studenti", contenente la presentazione effettuata la mattina dell'esperimento. Le slide includono i miei contatti.
- Due files excel contenenti gli esercizi fatti dagli studenti nell'ultima parte della visita qui ad Elettra
- Una cartella "spettri FTIR" contenente gli spettri I e I₀ FTIR di trealosio, albumina e DNA
- Una cartella "Raman studenti 29" (o "Raman studenti 30") contenente tutti gli spettri Raman acquisiti dai ragazzi durante la giornata, con aggiunta di alcuni spettri che non sono stati acquisiti per mancanza di tempo

Riduzione dati FTIR

Per ogni campione misurato avete due file di testo, uno con la dicitura I e l'altro con la dicitura I₀ nel nome (esempio RSC_I₀_Albumina.0011.dpt e SSC_I_Albumina.0011.dpt) .

ATTENZIONE: in questi files il separatore dei decimali è il punto. Nel caso il vostro "Office" abbia il separatore decimale con la virgola, potete fare una delle seguenti cose:

- 1) modificare le impostazioni di office o di windows inserendo il punto come separatore dei decimali
- 2) Aprire con "blocco note" il file di testo, sostituire tutti i punti con le virgole, salvare il file con un nome diverso. Aprire poi quest'ultimo con excel

Riporto qui l'esempio dell'albumina, fate lo stesso con gli altri 2 campioni. Aprite il file *RSC_I₀_Albumina.0011.dpt* trascinandolo sulla finestra di excel. Fate lo stesso con il file *SSC_I_Albumina.0011.dpt*. Ciascun file contiene 2 colonne, la prima relativa all'asse x (wavenumber in cm⁻¹), la seconda relativa all'asse y. Copiate in una nuova scheda o in un nuovo file excel la colonna dell'asse x (è uguale in entrambi i files), la colonna corrispondente all'intensità I e la colonna corrispondente all'intensità I₀. In una colonna calcolate $Abs = -\log_{10}(I/I_0)$. Graficate il tutto. Fate lo stesso con DNA e trealosio.

Lista file Raman:

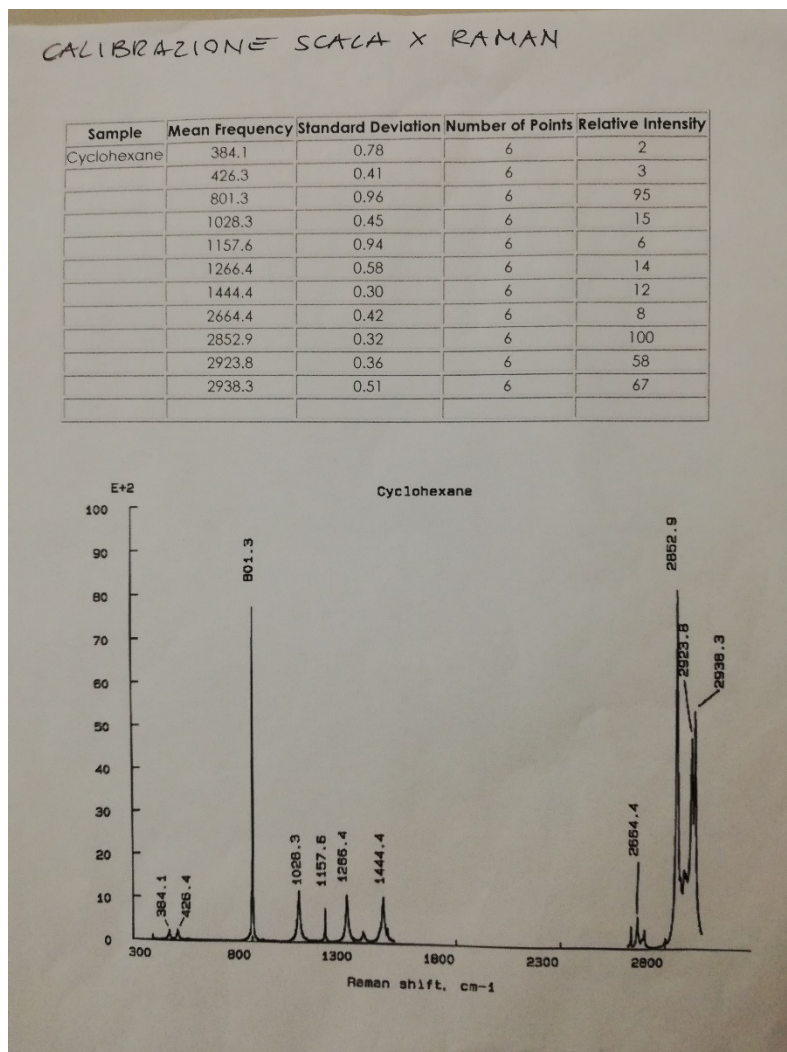
Per ogni campione misurato avete il file di testo nomefile_1, nomefile_2 ... nomefile_n. Ciascuno di questi file contiene 2 colonne, la prima corrispondente all'asse x (non calibrato) nella scala dei cm⁻¹, la seconda all'asse y.

ATTENZIONE: come per i dati FTIR questi files il separatore dei decimali è il punto. Nel caso il vostro "Office" abbia il separatore decimale con la virgola, potete fare una delle seguenti cose:

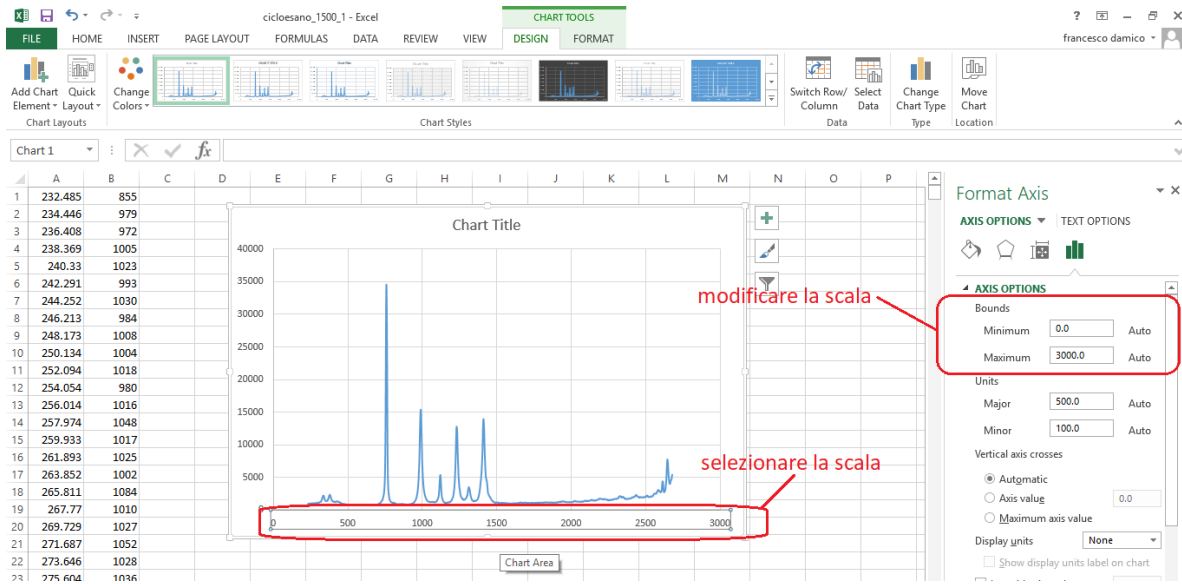
- 3) modificare le impostazioni di office o di windows inserendo il punto come separatore dei decimali
- 4) Aprire con "blocco note" il file di testo, sostituire tutti i punti con le virgole, salvare il file con un nome diverso. Aprire poi quest'ultimo con excel

Raman, calibrazione scala x

La prima operazione da fare, come abbiamo fatto qui da noi, è la calibrazione dell'asse x. Per effettuare questa operazione si deve importare su excel il file "ciloesano" (1500 o 3000, dipende da quali dati stiamo trattando), fare un grafico e identificare la posizione del massimo dei picchi, Confrontarli con la seguente figura.



Trovare la posizione dei picchi modificando progressivamente il range della scala x del grafico fino a indentificate perfettamente il picco.



Creare una tabella a 2 colonne x_{reali} e x_{misurati} , effettuare la regressione lineare con il metodo dei minimi quadrati come visto da noi e ricavarsi i coefficienti A e B dell'equazione $x_{\text{reale}} = A + B \cdot x_{\text{misurata}}$.

Ricavare lo spettro "ridotto"

A questo punto si passa ad analizzare gli spettri veri e propri. Quello che faremo adesso sarà ricavare il cosiddetto spettro "ridotto". Qui di seguito, come esempio, riporto il DNA con spettro centrato a 1500 cm^{-1} . Queste indicazioni potete poi estenderle a tutti gli altri campioni.

Del DNA a 1500 cm^{-1} abbiamo i files di testo (estensione .txt) *DNA_1500_5min_1*, *DNA_1500_5_min_2* e *DNA_1500_5min_3*. Importate i file su 3 schede excel trascinando il file sulla finestra del programma excel. Su una quarta finestra excel copiate le tre colonne y di ciascun file. Create una quarta colonna che sarà uguale a $y_{\text{media_DNA}} = (\text{colonna_y1} + \text{colonna_y2} + \text{colonna_y3}) / 3$ (la media delle tre colonne y).

Utilizzando i parametri A e B della regressione create una colonna con x_{reali} partendo da una qualunque delle colonne X dei file del DNA (come potete vedere i 3 file hanno le stesse identiche

colonne x). Ponetela uguale a $x_{reale}=A+B*colonna_x$ dove al posto di A e B inserite i valori ottenuti con l'operazione di calibrazione scala.

Fate un grafico con x_{reale} e y_{media}

Questo file conterrà anche la cella vuota, che andrà rimossa. Per fare ciò prendete la cella vuota acquisita sulla stessa scala e con lo stesso tempo di acquisizione. Nel nostro caso i file saranno *cella_vuota_1500_5min_1*, *cella_vuota_1500_5min_2*, *cella_vuota_1500_5min_3*. Come fatto per il campione di DNA, ricavate $y_{media_cella_vuota}$. Non servirà rifare x_{reale} . Basterà farla una volta sola, potete usare quella ottenuta prima.

A questo punto dovete sottrarre il contributo di cella vuota. Create una colonna $y_{media_finale_DNA}=y_{media_DNA}-y_{media_cella_vuota}$. Graficate x_{reale} e $y_{media_finale_DNA}$. Questo è il vostro grafico ridotto.

Eseguite queste operazioni anche per gli altri campioni e per l'altro range (3000 cm^{-1}).

Attenzione! Come cella vuota utilizzate sempre quella che ha la stessa durata della vostra misura!

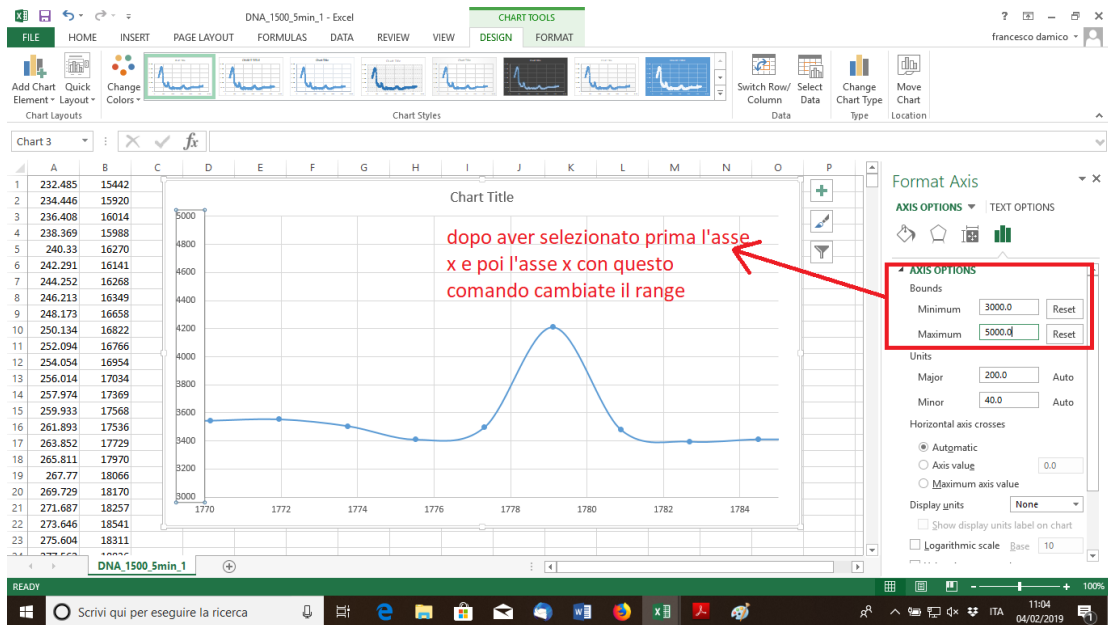
Rimuovere i “raggi cosmici”

Noterete che nei vostri grafici vi sono diversi raggi cosmici che rendono la vostra figura in un certo senso “antiestetica”. Senza entrare nei dettagli di vari algoritmi di riduzione, vi consiglio una semplice rimozione “manuale” degli stessi. Procedete in questo modo:

- 1) Fate un grafico con linee e punti. Identificate il vostro raggio cosmico da rimuovere



- 2) Selezionate prima l'asse x e poi l'asse y, cambiate la scala in modo da includere solo il picco di interesse



In questo caso sapete che il vostro raggio cosmico è tra 1778 cm⁻¹ e 1780 cm⁻¹

- 3) Modificare il punto selezionato sostituendolo con la media tra i due punti adiacenti, in questo caso

$$3488 = (3497 + 3479) / 2$$

819	1770.149	3545
820	1771.94	3555
821	1773.73	3507
822	1775.521	3410
823	1777.311	3497
824	1779.102	4211
825	1780.891	3479
826	1782.681	3396

punto da modificare

819	1770.149	3545
820	1771.94	3555
821	1773.73	3507
822	1775.521	3410
823	1777.311	3497
824	1779.102	3488
825	1780.891	3479

punto modificato

Dopo aver ridotto i files, eseguire le operazioni indicate nelle slides, sia per il range a 1500 che per il range a 3000 cm⁻¹