Hoja ‘Análisis FTIR’

Añadir etiqueta en vertical a los picos que muestren el valor de los ejes x e y del pico. Ejemplo de la etiqueta: ‘3500 cm-1; 0.375’

Al finalizar la modificación, por favor chequear que el resto del código sigue la siguiente estructura (Secciones):

Selector de muestras: quitar mensaje ‘No se pudieron leer espectros válidos.’ Cuando no hay ningún espectro seleccionado.

Opciones checkbox (Suavizado, Normalizar intensidad, Picos detectados): desactivados por defecto. Si se activa ‘Mostrar picos’ los valores por defecto son: ‘Altura minima’ = 0 y ‘Distancia mínima entre picos’ = 70. Para no generar error en ‘Aplicar suavizado’, añadir ‘.reset\_index(drop=True)’ al final de la línea del suavizado, así: y = ‘pd.Series(savgol\_filter(y, window\_length=window, polyorder=2)).reset\_index(drop=True)’

Rango de visualización: en un solo renglón x min, x max, y min, y max. Sin título ni subtitulo.

Gráfico combinado

Descargar Excel: con formato ‘‘FTIR’ fecha y hora’

Descargar png: con formato ‘‘FTIR’ fecha y hora’

No existe la sección ‘Slider interactivo’ que supimos utilizar alguna vez

peak\_prominences(...), peak\_widths(...)

Permite calcular la prominencia (intensidad relativa) y el ancho de los picos. Muy útil para caracterizar bandas espectrales.

resample(signal, num)

Reescala la señal para tener más o menos puntos (útil para igualar espectros antes de comparar).

fftconvolve(signal1, signal2)

Convolución rápida por FFT. Usado para suavizar, calcular funciones de correlación o simular espectros.

diferenciar enlaces libres vs. asociados por H

**Detectar similitudes** entre dos espectros

¿Es posible que al activar la ‘deteccion de picos’ en la sección de checkbox , se presenten las coordenadas del pico en vertical (como veníamos haciendo) seguido de valor de ancho a media altura (FWHM) en cada pico?

No entiendo bien como funciona la coparacion de espectros. ¿Es posible añadir un checkbox nuevo que permita ver un porcentaje de similitud entre los distintos espectros seleccionados? No tengo bien claro como presentar esta información cuando son mas de 2 espectros a comparar. Que podemos hacer? Puedes intuir como se vería en mi app?

3500 cm⁻¹ ⇒ 0.37

Ancho (FWHM): 85 cm⁻¹

3500 (85) cm⁻¹ ⇒ 0.3752