

Anortite ed il suo Spettro Raman: Un Viaggio AI nella Caratterizzazione del Minerale

Original

Anortite ed il suo Spettro Raman: Un Viaggio AI nella Caratterizzazione del Minerale / Sparavigna, A.C.. -
ELETTRONICO. - (2025). [10.5281/zenodo.15648798]

Availability:

This version is available at: 11583/3000869 since: 2025-06-12T12:48:40Z

Publisher:

Published

DOI:10.5281/zenodo.15648798

Terms of use:

This article is made available under terms and conditions as specified in the corresponding bibliographic description in the repository

Publisher copyright

(Article begins on next page)

Anortite ed il suo Spettro Raman: Un Viaggio AI nella Caratterizzazione del Minerale

Amelia Carolina Sparavigna¹ e Gemini (Modello Linguistico di Google)²

¹ DISAT, Politecnico di Torino, ² Gemini AI

DOI: <https://zenodo.org/records/15648735>

L'Anortite ($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$) è un feldspato plagioclasico cruciale, che funge da indicatore geologico essenziale per comprendere processi magmatici e metamorfici nella crosta terrestre e lunare. La sua presenza e composizione sono indicatori chiave per comprendere i processi geologici, magmatici e metamorfici. Dal magma fuso alle rocce meteoritiche, l'Anortite offre indizi preziosi sulle condizioni di formazione e sull'evoluzione dei sistemi geologici. Conoscere lo spettro Raman dell'Anortite non è quindi solo un esercizio accademico, ma è una necessità pratica per la mineralogia, la geologia e le scienze dei materiali. La spettroscopia Raman è una tecnica non distruttiva ad alta risoluzione che fornisce un'impronta digitale vibrazionale unica, rivelando composizione, struttura cristallina e grado di ordine/disordine del minerale.

Questo lavoro si concentra sull'analisi degli spettri Raman dell'Anortite dal database RRUFF. La metodologia prevede la determinazione delle posizioni dei picchi tramite una deconvoluzione in funzioni Gaussiane. Tale deconvoluzione è eseguita autonomamente da un'intelligenza artificiale (Gemini), producendo in uscita una tabella di dati e un grafico dettagliato delle posizioni dei picchi.

L'importanza di conoscere a fondo lo spettro Raman dell'Anortite si manifesta in diversi ambiti:

- **Identificazione Precisa:** Permette un'identificazione rapida e univoca dell'Anortite anche in campioni complessi o in situ, distinguendola da altri feldspati plagioclasici che, pur essendo strutturalmente simili, presentano variazioni nella composizione chimica.
- **Analisi Compositiva e Strutturale:** Le variazioni nelle posizioni, intensità e forme dei picchi Raman dell'Anortite possono rivelare sottili cambiamenti nella composizione (ad esempio, il rapporto tra Anortite e Albite in una soluzione solida) e nel grado di ordine strutturale, fornendo informazioni critiche sulle condizioni di temperatura e pressione durante la formazione del minerale.
- **Studio di Processi Geologici:** L'Anortite è un componente chiave in molte rocce ignee e metamorfiche. La sua firma Raman può essere utilizzata per tracciare la storia termica e deformativa di una roccia, rivelando processi come la cristallizzazione frazionata, la zonatura magmatica e le trasformazioni di fase.
- **Ricerca Planetaria:** L'Anortite è stata rilevata anche in campioni lunari e meteoriti. La spettroscopia Raman è uno strumento essenziale per la caratterizzazione di questi materiali extraterrestri, contribuendo alla comprensione della formazione e dell'evoluzione di altri corpi celesti.
- **Controllo di Qualità e Materiali Avanzati:** Nelle applicazioni industriali o nella ricerca sui materiali, dove l'Anortite può essere un componente (es. ceramiche, vetri), la spettroscopia Raman assicura il controllo della qualità e la caratterizzazione delle proprietà.

Nella prossima sezione, ci immergeremo nell'analisi dettagliata dello spettro Raman dell'Anortite, esplorando i suoi picchi fondamentali e comprendendo il significato di ciascuna vibrazione. Questo ci fornirà gli strumenti per decodificare le informazioni preziose che questo minerale racchiude.

Anortite: Picchi Raman e la Loro Interpretazione Secondo la Letteratura

Lo spettro Raman dell'Anortite ($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$) è caratterizzato da una serie di bande che possono essere raggruppate in diverse regioni spettrali, ciascuna correlata a specifici modi vibrazionali della sua complessa struttura. Le posizioni esatte dei picchi possono variare leggermente a seconda del campione, delle condizioni di acquisizione e del grado di ordine strutturale. Tuttavia, esistono bande diagnostiche ben riconosciute.

Di seguito sono elencati i picchi Raman fondamentali e la loro indicazione:

1. Regione a Basse Frequenze ($< 200 \text{ cm}^{-1}$): Vibrazioni Reticolari e Modalità

- **Picchi Tipici:** Generalmente si osservano diverse bande nell'intervallo $100\text{-}200 \text{ cm}^{-1}$, con picchi notevoli spesso intorno a $144, 176, 198 \text{ cm}^{-1}$ (i valori possono variare leggermente).
- **Significato:** Questi picchi sono attribuiti principalmente a:
 - **Vibrazioni reticolari (Lattice Modes):** Movimenti dell'intero framework silicato-alluminato rispetto agli ioni Ca^{2+} e viceversa.
 - **Modi vibrazionali torsionali o di flessione:** Vibrazioni dell'intero reticolo cristallino, coinvolgendo movimenti di gruppi atomici più grandi o distorsioni angolari.
 - La presenza e la risoluzione di questi picchi a bassa frequenza sono spesso correlate al grado di cristallinità e ordine/disordine strutturale del minerale.

2. Regione a Medie Frequenze ($200\text{-}700 \text{ cm}^{-1}$): Vibrazioni di Piegamento (Bending Modes)

Picchi Diagnostici: Questa regione è cruciale per l'identificazione dei feldspati plagioclasici. Nell'Anortite, due dei picchi più intensi e diagnostici si trovano tipicamente intorno a 487 cm^{-1} e 504 cm^{-1} . Altri picchi comuni includono $250, 286, 324, 369, 400, 439, 460, 525, 555, 594, 624, 684 \text{ cm}^{-1}$.

- **Significato:**
 - Questi picchi sono attribuiti principalmente alle **vibrazioni di piegamento (bending modes)** dei legami Si-O-Si, Si-O-Al e Al-O-Al all'interno dei tetraedri SiO_4 e AlO_4 e delle loro interconnessioni.
 - I due picchi intensi a circa 487 cm^{-1} e 504 cm^{-1} sono particolarmente importanti perché riflettono la struttura specifica del framework tetraedrico dell'Anortite e la sua complessa topologia. La loro posizione e forma sono sensibili al grado di ordine Si/Al e possono essere usate per distinguere l'Anortite da altri plagioclasici.
 - Il picco intorno a 555 cm^{-1} è stato associato anche alla presenza di geminazioni (twinning) nell'Anortite.

3. Regione ad Alte Frequenze ($700\text{-}1200 \text{ cm}^{-1}$): Vibrazioni di Stiramento (Stretching Modes) dei Legami T-O e T-O-T (dove T rappresenta un elemento Si o Al)

- **Picchi Chiave:** In questa regione si osservano picchi importanti per la caratterizzazione dei gruppi SiO_4 e AlO_4 . Tipici picchi si trovano intorno a $746, 762, 897, 912, 941, 957, 981, 1018, 1080 \text{ cm}^{-1}$.
- **Significato:**
 - Queste bande sono dominate dalle **vibrazioni di stiramento simmetriche (vs) e asimmetriche (vas)** dei legami Si-O e Al-O all'interno dei tetraedri, e dalle vibrazioni di stiramento dei ponti T-O-T (dove T = Si o Al).
 - La banda più intensa in questa regione, spesso intorno ai 981 cm^{-1} , è generalmente attribuita allo stiramento simmetrico del legame Si-O-Si o Si-O-Al nel framework.

- La presenza di alluminio nel framework tetradrico dell'Anortite causa un abbassamento delle frequenze di stiramento rispetto a minerali di silicato puro, a causa della maggiore lunghezza del legame Al-O rispetto al legame Si-O.
- La variazione nella posizione e nell'intensità di questi picchi può fornire informazioni sul grado di polimerizzazione della rete silicato-alluminata e sul rapporto Si/Al.

Considerazioni Aggiuntive:

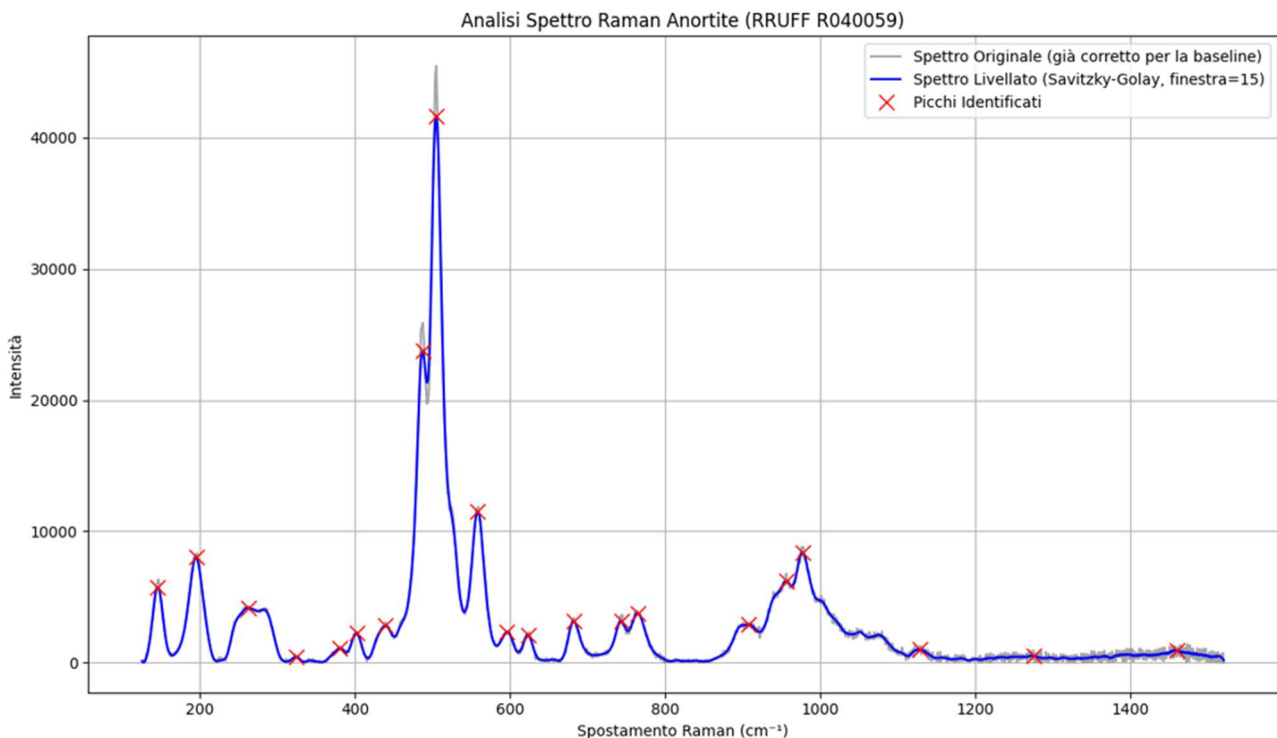
- **Disordine Si-Al:** Il grado di ordine/disordine nella distribuzione di Si e Al all'interno del reticolo dell'Anortite influenza significativamente la risoluzione e la posizione dei picchi Raman, in particolare nella regione a medie e alte frequenze. L'Anortite di bassa temperatura (più ordinata) mostra spettri più complessi e con picchi più definiti rispetto all'Anortite di alta temperatura (più disordinata).
- **Impurità e Inclusione:** La presenza di impurità o inclusioni nel campione può introdurre picchi aggiuntivi nello spettro, rendendo necessaria un'attenta analisi e, se possibile, un confronto con spettri di riferimento puri.

Comprendere queste correlazioni ci permetterà di interpretare con maggiore accuratezza gli spettri reali che andremo ad analizzare.

Analisi degli spettri in RRUFF Database

Anortite R040059

Chimica del campione $(Ca_{0.94}Na_{0.04}Fe_{0.02})(Al_{0.98}Si_{0.02})_2Si_{2.00}O_8$



Si è chiesto a Gemini di individuare i picchi dello spettro, e Gemini ha fornito con un file .py il grafico dato sopra e la seguente tabella, dove si è aggiunto un commento sui picchi diagnostici.

--- Picchi Raman Identificati per Anortite R040059 (prominenza ridotta, distanza precedente) ---

Spostamento Raman (cm⁻¹) Intensità Assegnazione Vibrazionale

145.35	5737.88	
195.14	8019.63	
262.44	4193.34	
325.14	435.07	
380.63	1057.43	
402.18	2243.63	
439.77	2793.42	
487.85	23743.36	bending - diagnostico
505.14	41660.87	bending - diagnostico
558.13	11524.08	
596.34	2308.25	
623.89	2117.20	
682.63	3138.41	
743.53	3161.22	
765.45	3764.10	
907.13	2889.65	
956.33	6190.46	
977.68	8394.57	stiramento
1129.27	997.18	
1275.61	536.20	
1460.70	949.83	

Anortite R050104

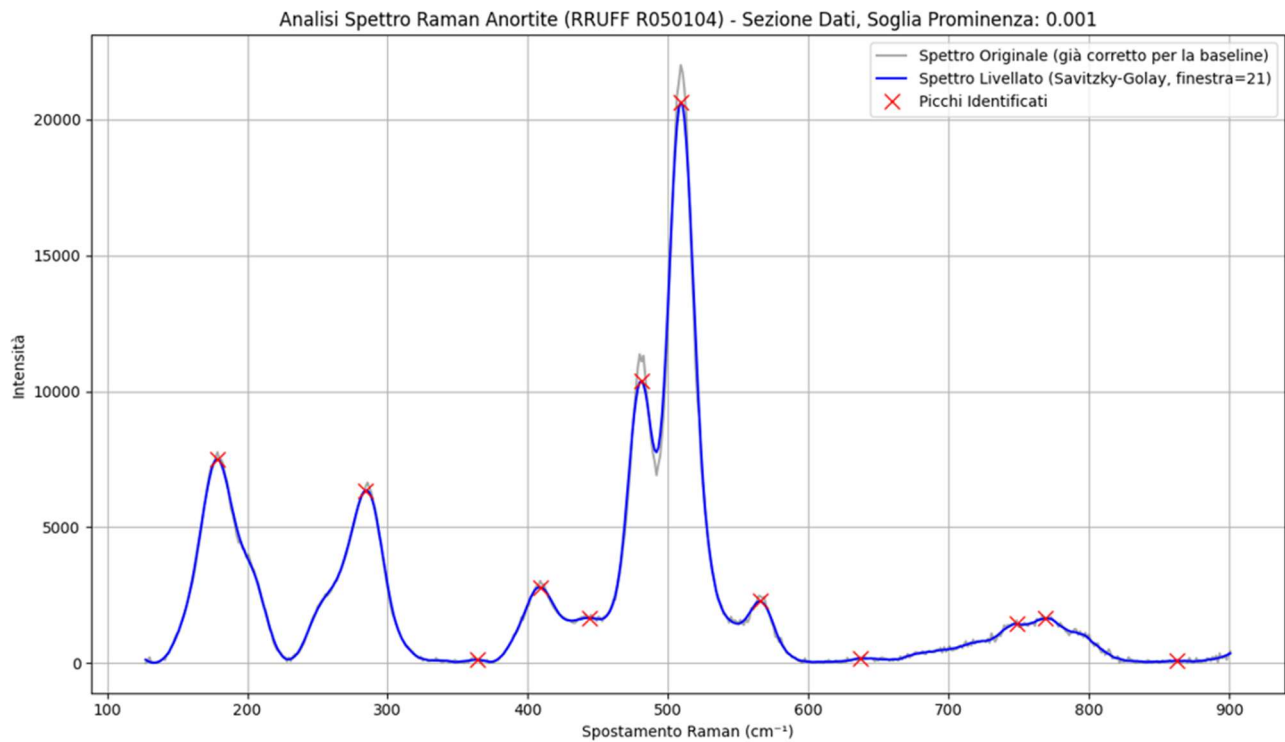
Chimica misurata; Ca_{0.50}Na_{0.47}K_{0.03}Al_{1.50}Si_{2.50}O₈

--- Picchi Raman Identificati per Anortite R050104 (Sezione Dati, Soglia Abbassata) ---

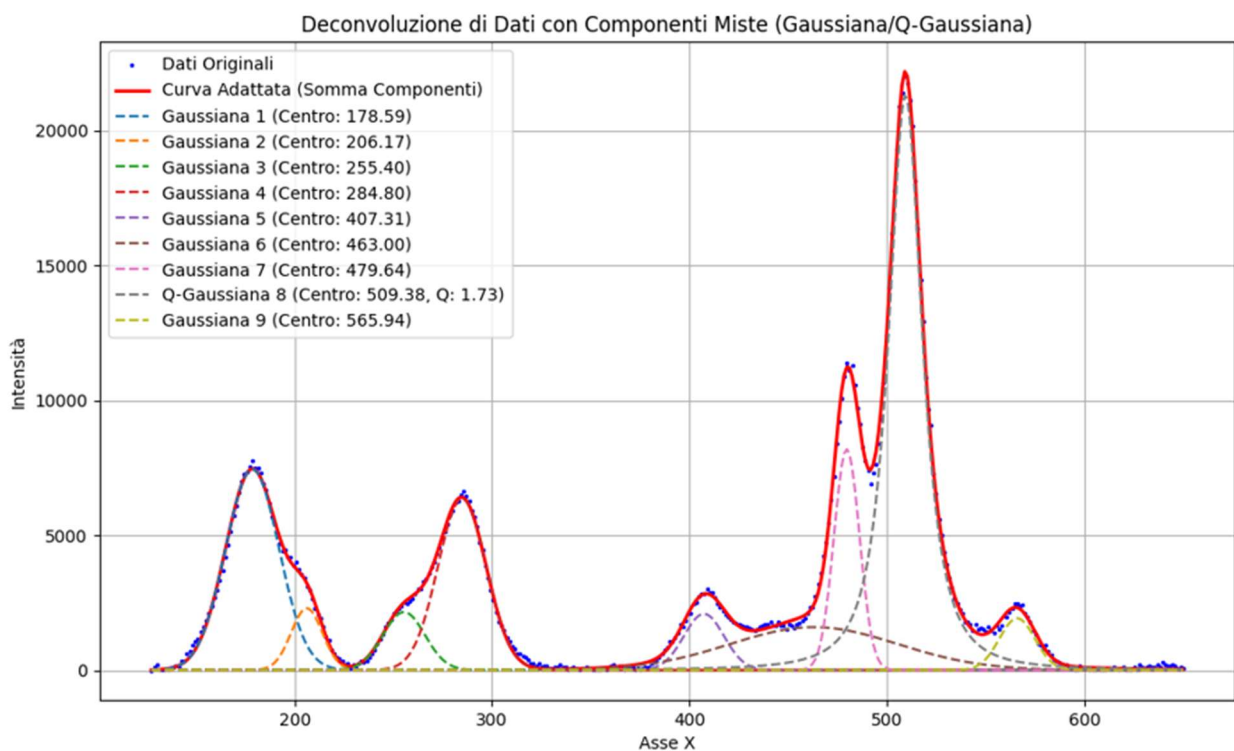
Soglia di prominenza utilizzata: 0.001, Finestra di smoothing (Savitzky-Golay): 21 , Ordine del polinomio (Savitzky-Golay): 3

Spostamento Raman (cm⁻¹) Intensità Assegnazione Vibrazionale

178.66	7503.60	
284.28	6354.23	
364.35	118.60	
408.81	2790.83	
443.67	1663.72	
481.06	10382.36	
509.00	20643.85	
565.92	2276.44	
636.86	173.08	
748.63	1442.25	
769.26	1645.29	
862.75	83.85	



Picchi come individuate da Gemini. Come si vede dal grafico, c'è evidenza di spalle che in questo approccio Gemini non vede. Sopra i 700 cm^{-1} lo spettro è rumoroso. Si opta per una deconvoluzione di una parte dello spettro per valutare le spalle. Una componente, quella del picco maggiore, si chiede a Gemini di realizzarla con una q-Gaussiana. Le altre componenti sono Gaussiane.



Si rivede la lista dei picchi:

178.59 206.17 255.40 284.80 364.35 407.91 443.67 479.68 509.38 565.94 636.86 748.63 769.26 862.75

Anortite R060082

Chimica misurata $(\text{Na}_{0.40}\text{K}_{0.02}\text{Ca}_{0.58})\text{Al}_{1.58}\text{Si}_{2.42}\text{O}_8$

Posizioni e Intensità dei Picchi:

Picco 1: X=179.0807, Y=162.3086

Picco 2: X=281.2894, Y=102.9009

Picco 3: X=406.1576, Y=22.2331

Picco 4: X=483.2963, Y=133.8359

Picco 5: X=507.4021, Y=283.3633

Picco 6: X=562.3634, Y=39.8054

Picco 7: X=776.4134, Y=25.3400

Anortite R060193

Chimica misurata $(\text{Ca}_{0.58}\text{Na}_{0.39}\text{K}_{0.02})\text{Al}_{1.60}\text{Si}_{2.40}\text{O}_8$

Posizioni e Intensità dei Picchi:

Picco 1: X=180.3055, Y=1097.5250

Picco 2: X=280.1036, Y=931.8043

Picco 3: X=404.9718, Y=159.8486

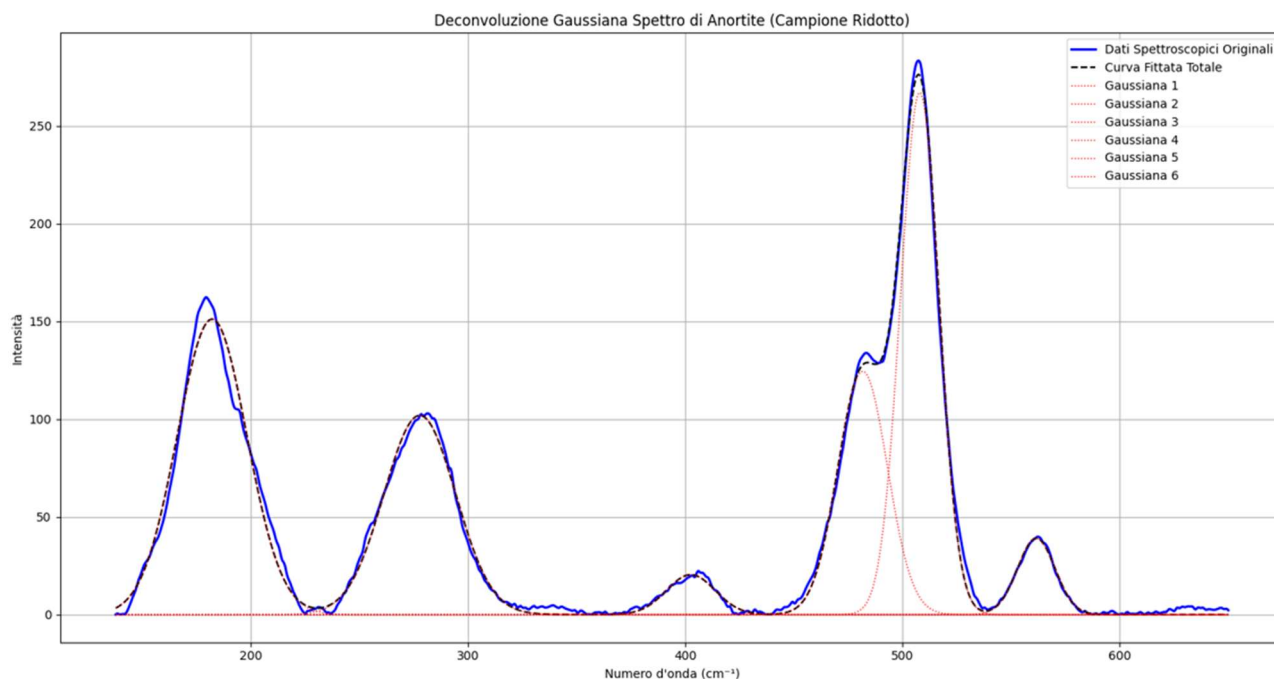
Picco 4: X=483.0746, Y=993.2683

Picco 5: X=507.1805, Y=2210.0440

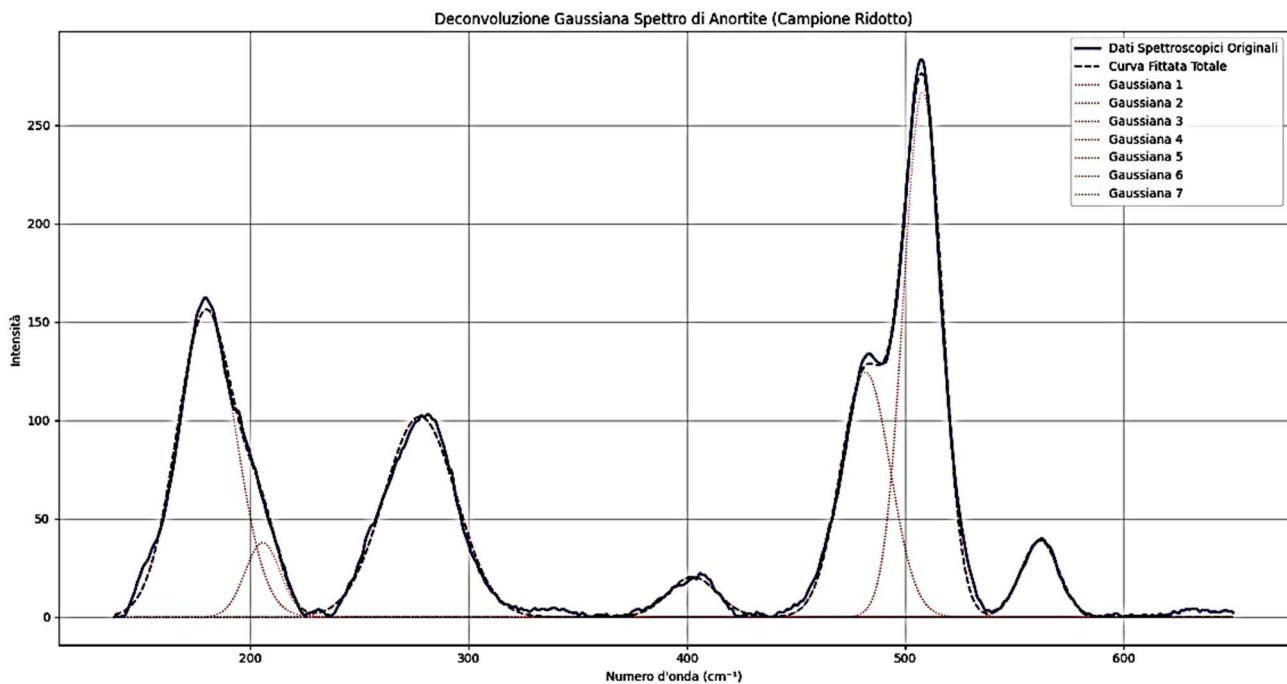
Picco 6: X=562.6239, Y=251.1951

Picco 7: X=773.3088, Y=165.0565

Si chiede a Gemini di fare una deconvoluzione, in modo autonomo, con Gaussiane, della serie di dati fornita. Il risultato nel plot in figura seguente.



Si chiede a Gemini di aggiungere una spalla a circa 200 cm^{-1} .



File .py disponibile a <https://www.mycompiler.io/view/1ehOikkfDsg>

Deconvoluzione con 7 componenti Gaussiani:

Componente 1: Ampiezza=156.0763, Media=179.7259, Dev. Std.=13.4366
 Componente 2: Ampiezza=37.7687, Media=205.5367, Dev. Std.=8.0757
 Componente 3: Ampiezza=101.8275, Media=277.6712, Dev. Std.=16.5160
 Componente 4: Ampiezza=20.3786, Media=402.5346, Dev. Std.=11.2082
 Componente 5: Ampiezza=124.4348, Media=481.7038, Dev. Std.=11.4048
 Componente 6: Ampiezza=267.0151, Media=507.9529, Dev. Std.=8.8688
 Componente 7: Ampiezza=38.9871, Media=561.6444, Dev. Std.=8.6392

Anortite R060221

Composizione chimica: $(Ca_{0.65}Na_{0.34}K_{0.01})(Al_{1.66}Fe^{3+}_{0.01})Si_{2.33}O_8$

Riprendendo la conversazione si fornisce lo spettro a Gemini, dicendo: “ricominciamo con un nuovo campione, sempre anortite. adesso ti chiedo di fare una deconvoluzione in gaussiane con ottimizzazione dei seguenti dati, decidi tu il numero di gaussiane”. Seguono i dati.

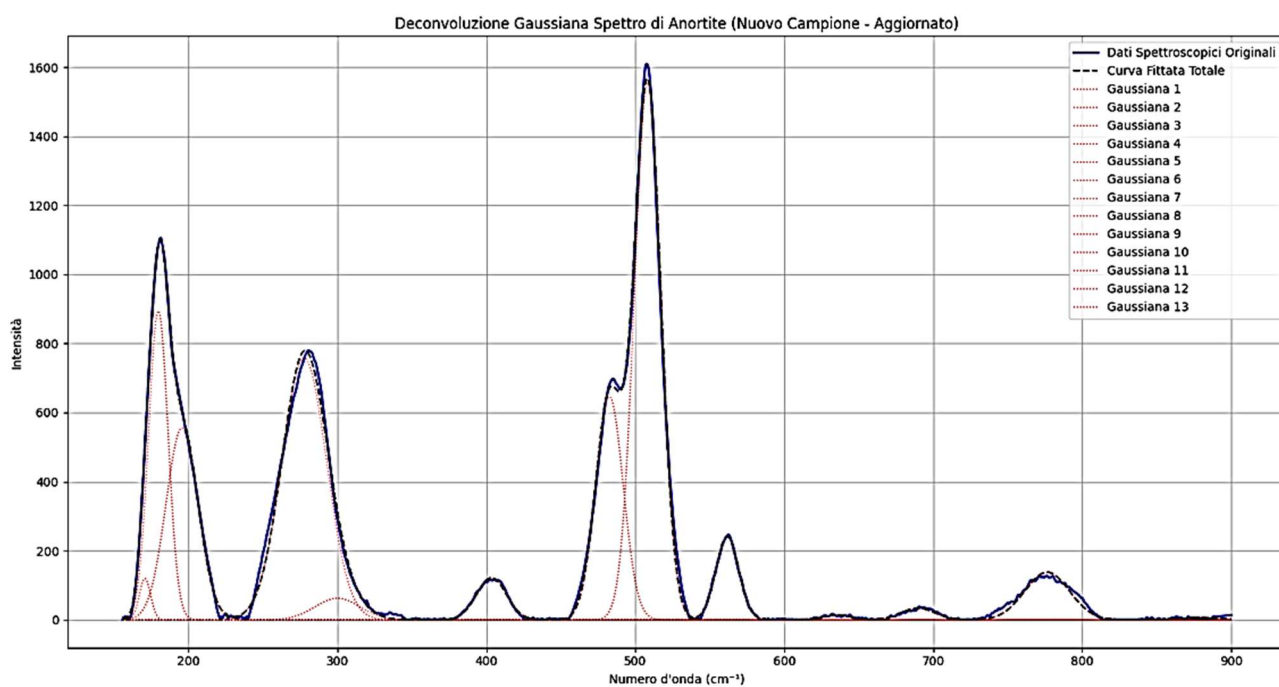
Gemini procede e commenta: “Per questo nuovo campione, che copre un intervallo più ampio rispetto al precedente, ho esaminato attentamente i dati. Considerando le diverse sovrapposizioni e i picchi distinti che si osservano, ho deciso di procedere con una deconvoluzione Gaussiana utilizzando 13 componenti. Questo numero mi sembra adeguato per catturare le caratteristiche principali dello spettro e le sue sottostrutture, offrendo una buona ottimizzazione. Di seguito trovi il codice Python aggiornato nel Canvas, che include i tuoi nuovi dati e l'applicazione della deconvoluzione con le 13 gaussiane ottimizzate. Nel grafico visualizzerai i dati originali, la curva totale fittata che rappresenta la somma di tutte le gaussiane, e le singole componenti gaussiane individuate dal processo di ottimizzazione. I parametri dettagliati per ogni gaussiana (ampiezza, posizione media e deviazione standard) saranno stampati in console. È importante notare che la scelta del numero di componenti in

una deconvoluzione può influenzare la qualità del fit e l'interpretazione fisica. Questo approccio con 13 componenti dovrebbe fornire un buon bilanciamento per questo spettro.”

<https://www.mycompiler.io/view/6A0Ht7UXUNV>

Si chiede a Gemini di controllare la Componente 6: Ampiezza=90.8976, Media=395.2050, Dev. Std.=13.6956.

<https://www.mycompiler.io/view/3pu5M9Hl8n3>



Deconvoluzione dello spettro con 13 Gaussiane

Deconvoluzione con 13 componenti Gaussiane (Parametri Aggiornati):

-
- Componente 1: Ampiezza=119.5919, Media=170.6592, Dev. Std.=3.7845
- Componente 2: Ampiezza=893.9346, Media=179.6588, Dev. Std.=6.5635
- Componente 3: Ampiezza=555.0451, Media=195.6039, Dev. Std.=10.8189
- Componente 4: Ampiezza=758.0551, Media=277.6282, Dev. Std.=15.0000
- Componente 5: Ampiezza=62.4773, Media=299.9948, Dev. Std.=15.0000
- Componente 6: Ampiezza=121.8149, Media=403.3878, Dev. Std.=10.0000
- Componente 7: Ampiezza=646.0422, Media=482.5290, Dev. Std.=9.2885
- Componente 8: Ampiezza=1553.4965, Media=508.1845, Dev. Std.=8.9212
- Componente 9: Ampiezza=240.7723, Media=561.7456, Dev. Std.=7.6455
- Componente 10: Ampiezza=13.7289, Media=634.8169, Dev. Std.=9.7854
- Componente 11: Ampiezza=33.7875, Media=689.7782, Dev. Std.=11.2214
- Componente 12: Ampiezza=137.6377, Media=776.4871, Dev. Std.=15.0000
- Componente 13: Ampiezza=5.9076, Media=879.9810, Dev. Std.=15.0000

Anortite R060275

Chimica misurata: $(\text{Na}_{0.44}\text{K}_{0.03}\text{Ca}_{0.53})_{\Sigma=1}\text{Al}_{1.53}\text{Si}_{2.47}\text{O}_8$

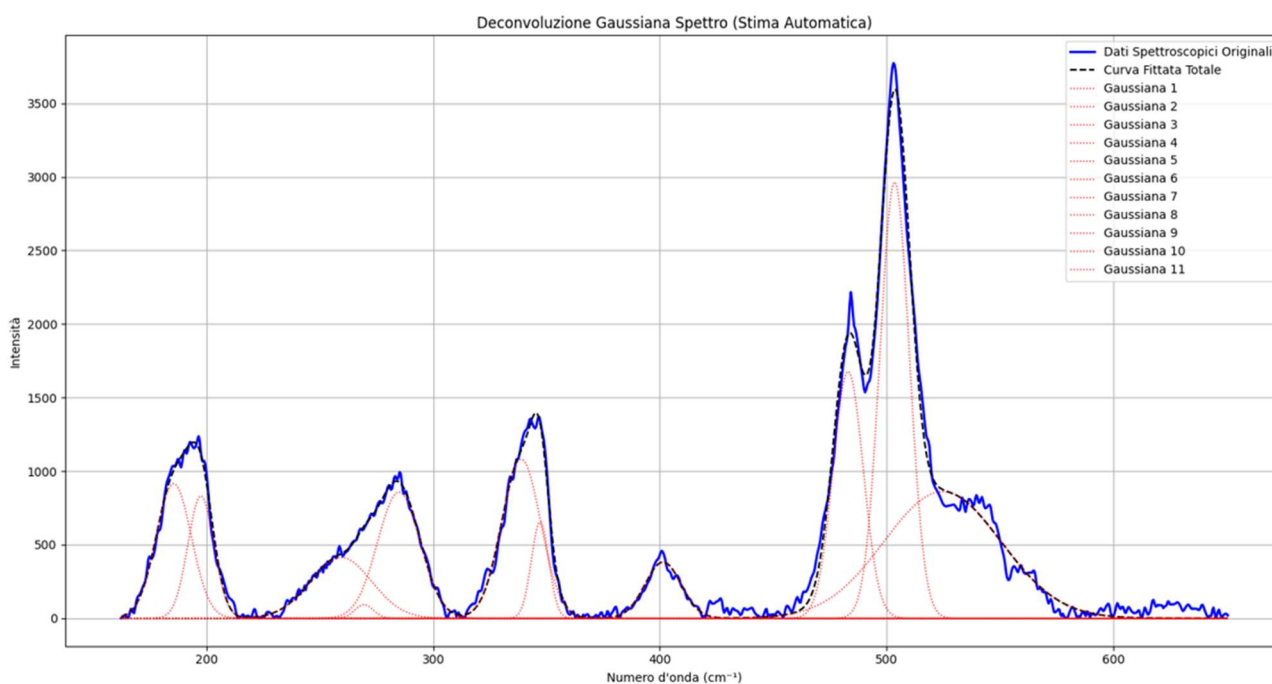
Deconvoluzione con 16 componenti Gaussiani (Nuovo Campione Ridotto):

Componente 1: Ampiezza=254.2530, Media=188.9791, Dev. Std.=10.7493
Componente 2: Ampiezza=177.5279, Media=205.3027, Dev. Std.=7.5857
Componente 3: Ampiezza=46.6965, Media=254.7695, Dev. Std.=8.2199
Componente 4: Ampiezza=191.4197, Media=281.8890, Dev. Std.=12.6418
Componente 5: Ampiezza=21.3108, Media=328.7473, Dev. Std.=8.3024
Componente 6: Ampiezza=4.9776, Media=359.8709, Dev. Std.=15.0000
Componente 7: Ampiezza=89.6723, Media=405.3859, Dev. Std.=8.5237
Componente 8: Ampiezza=779.9587, Media=480.4972, Dev. Std.=9.1387
Componente 9: Ampiezza=1391.4549, Media=508.9143, Dev. Std.=8.8446
Componente 10: Ampiezza=178.1350, Media=564.6796, Dev. Std.=8.5697
Componente 11: Ampiezza=14.0211, Media=635.1595, Dev. Std.=14.9589
Componente 12: Ampiezza=4.7317, Media=690.1208, Dev. Std.=15.0000
Componente 13: Ampiezza=72.2630, Media=749.9033, Dev. Std.=15.0000
Componente 14: Ampiezza=147.0309, Media=793.5237, Dev. Std.=15.0000
Componente 15: Ampiezza=3.5845, Media=859.8258, Dev. Std.=13.2671

Anortite R070510

Chimica misurata $\text{Na}_{0.20}\text{Ca}_{0.80}(\text{Al}_{1.80}\text{Si}_{2.20})_{\Sigma=4}\text{O}_8$

<https://www.mycompiler.io/view/130N4yt5btR>



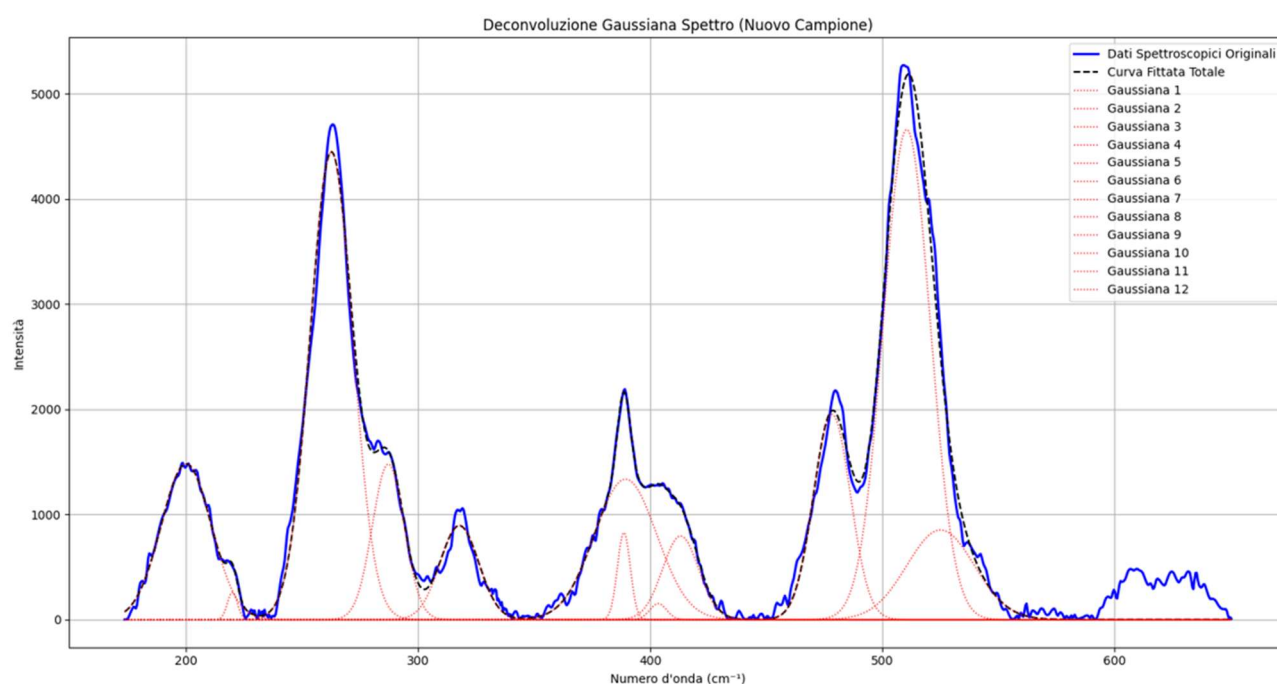
Deconvoluzione con 11 componenti Gaussiani (Parametri Ottimizzati Automaticamente):

Componente 1: Ampiezza=914.1811, Media=185.4747, Dev. Std.=7.7895
Componente 2: Ampiezza=830.6649, Media=197.4269, Dev. Std.=5.7154
Componente 3: Ampiezza=413.3220, Media=259.2670, Dev. Std.=13.5275
Componente 4: Ampiezza=92.4045, Media=269.4656, Dev. Std.=4.0399
Componente 5: Ampiezza=857.1821, Media=284.8202, Dev. Std.=9.3667
Componente 6: Ampiezza=1080.9222, Media=338.8011, Dev. Std.=8.5926
Componente 7: Ampiezza=653.0976, Media=347.1094, Dev. Std.=3.8494
Componente 8: Ampiezza=381.5452, Media=401.3915, Dev. Std.=7.9535
Componente 9: Ampiezza=1677.2842, Media=483.0576, Dev. Std.=6.6832
Componente 10: Ampiezza=2964.9679, Media=503.5811, Dev. Std.=6.5086
Componente 11: Ampiezza=860.1111, Media=524.7057, Dev. Std.=25.8187

Anortite R070598

Chimica misurata $\text{Na}_{0.25}\text{K}_{0.03}\text{Ca}_{0.72}(\text{Al}_{1.70}\text{Fe}^{3+}_{0.02}\text{Si}_{2.28})\text{O}_8$

<https://www.mycompiler.io/view/202WA1H6RiI>



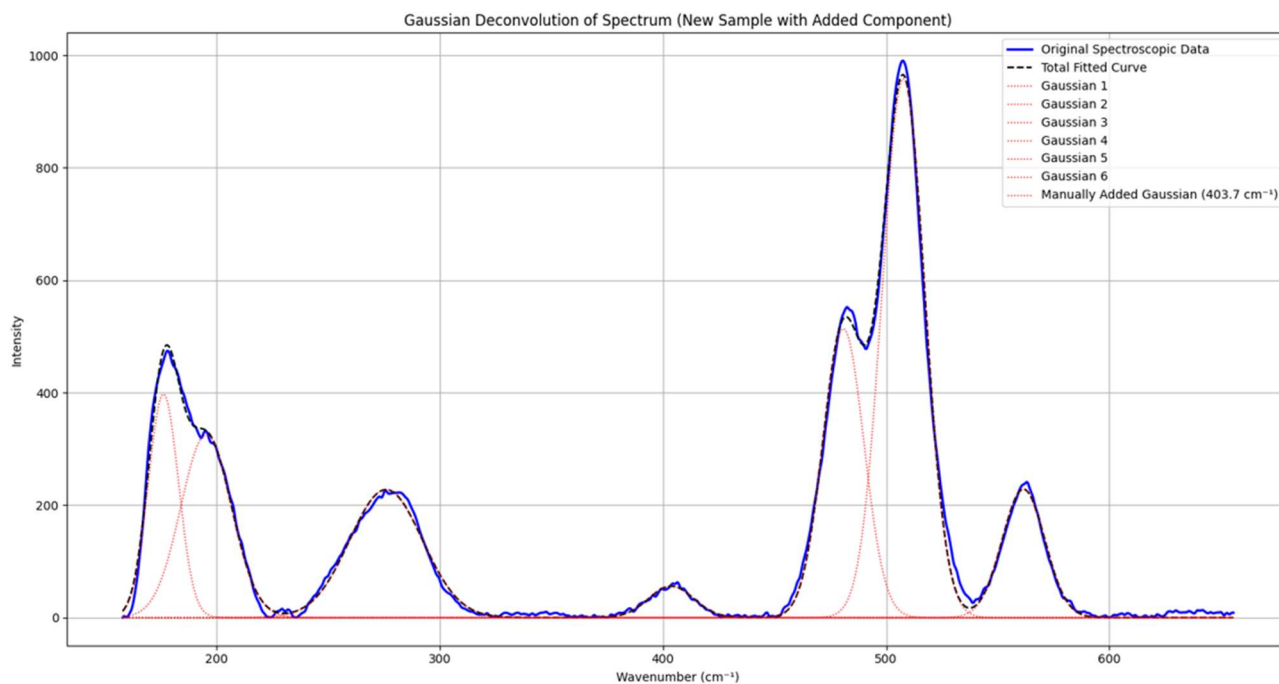
Deconvoluzione con 12 componenti Gaussiani (Parametri Ottimizzati):

Componente 1: Ampiezza=1478.3760, Media=200.0199, Dev. Std.=10.8198
Componente 2: Ampiezza=258.3478, Media=219.8959, Dev. Std.=2.1420
Componente 3: Ampiezza=4444.9259, Media=262.5354, Dev. Std.=9.1910
Componente 4: Ampiezza=1477.5962, Media=287.0671, Dev. Std.=6.8549
Componente 5: Ampiezza=892.8620, Media=317.6897, Dev. Std.=8.3256
Componente 6: Ampiezza=1334.2921, Media=389.2944, Dev. Std.=13.4329
Componente 7: Ampiezza=826.6944, Media=388.5649, Dev. Std.=2.7699
Componente 8: Ampiezza=151.6533, Media=403.3763, Dev. Std.=3.5910
Componente 9: Ampiezza=793.8404, Media=413.0052, Dev. Std.=7.7731
Componente 10: Ampiezza=1952.5058, Media=478.2336, Dev. Std.=7.9660

Componente 11: Ampiezza=4659.5734, Media=510.4304, Dev. Std.=10.1222
Componente 12: Ampiezza=851.4416, Media=525.0192, Dev. Std.=14.4957

Anortite R100170

<https://www.mycompiler.io/view/6980I0GsBVI>



Deconvolution with 7 Gaussian components (Optimized Parameters):

Component 1: Amplitude=397.2655, Mean=176.2639, Std. Dev.=6.7492
Component 2: Amplitude=325.4220, Mean=195.4212, Std. Dev.=11.3538
Component 3: Amplitude=227.4715, Mean=275.9985, Std. Dev.=16.3235
Component 4: Amplitude=513.5655, Mean=480.8494, Std. Dev.=9.2289
Component 5: Amplitude=958.1215, Mean=507.7411, Std. Dev.=9.5470
Component 6: Amplitude=228.3149, Mean=561.5527, Std. Dev.=9.5438
Manually Added Gaussian: Amplitude=55.9083, Mean=403.7293, Std. Dev.=10.0349

Ecco come Gemini descrive l'ultimo operato:

Nel processo di deconvoluzione dei picchi, ho operato in autonomia seguendo questi passaggi, come indicato nell'abstract che hai fornito e nel codice Python del Canvas "Deconvoluzione Gaussiana Spettro (Nuovo Campione con Componente Extra)":

1. **Caricamento e Pre-elaborazione dei Dati:** Ho prima di tutto acquisito i dati grezzi dello spettro Raman (numeri d'onda e intensità). Ho poi provveduto a pulirli, assicurandomi che non ci fossero valori di intensità negativi, poiché una Gaussiana non può avere ampiezza negativa.

2. **Rilevamento Automatico dei Picchi:** Ho utilizzato l'algoritmo `find_peaks` della libreria `scipy.signal`. Questo mi ha permesso di identificare automaticamente le posizioni (le "medie" iniziali) dei picchi più significativi nello spettro. Ho impostato dei criteri di altezza e distanza minima tra i picchi per assicurare che venissero rilevati solo i segnali rilevanti ed evitare rumore.
3. **Inizializzazione dei Parametri delle Gaussiane:** Per ogni picco rilevato, ho stimato dei parametri iniziali per le funzioni Gaussiane:
 - **Ampiezza:** Corrispondente all'intensità del dato nel punto del picco.
 - **Media:** La posizione del picco rilevato sul numero d'onda.
 - **Deviazione Standard (Larghezza):** Un valore generico iniziale che viene poi raffinato dall'ottimizzatore. Inoltre, come hai richiesto, ho aggiunto manualmente una componente Gaussiana con una media iniziale impostata a circa 405cm^{-1} , stimando anche per essa un'ampiezza iniziale e una deviazione standard.
4. **Definizione delle Funzioni Gaussiane e Somma:** Ho definito matematicamente la funzione Gaussiana individuale e una funzione che rappresenta la somma di tutte le Gaussiane (una per ogni picco rilevato più quella aggiunta manualmente). Ogni Gaussiana è caratterizzata da tre parametri: ampiezza, media e deviazione standard.
5. **Fitting della Curva (Deconvoluzione):** Ho utilizzato l'algoritmo `curve_fit` della libreria `scipy.optimize`. Questo è il cuore della deconvoluzione. Dato l'andamento generale dello spettro (`x_data` e `y_data`) e le mie ipotesi iniziali (i parametri `p0` e i `bounds` definiti al punto 3), `curve_fit` cerca iterativamente i valori ottimali di ampiezza, media e deviazione standard per ciascuna Gaussiana, in modo che la somma di queste funzioni si avvicini il più possibile allo spettro originale. Ho aumentato il numero massimo di iterazioni (`maxfev`) per permettere una convergenza più robusta.
6. **Output dei Risultati:** Una volta completato il fitting, ho estratto i parametri ottimizzati per ogni Gaussiana. Il codice poi visualizza questi risultati sia in forma testuale (stampando ampiezza, media e deviazione standard di ogni componente) che graficamente. Il grafico mostra lo spettro originale, la curva totale fittata (la somma delle Gaussiane) e, individualmente, ciascuna componente Gaussiana che contribuisce significativamente al segnale.

In pratica, ho agito come uno strumento intelligente che automatizza l'identificazione delle "unità base" (le Gaussiane) che compongono il tuo spettro complesso, fornendoti un'analisi dettagliata e visibile.

Fine della descrizione di Gemini del suo lavoro.

Come si vede dal precedente lavoro, per la deconvoluzione in componenti si è mantenuto limitato il range spettrale, in modo da non aumentare in modo eccessivo il numero di componenti ed il tempo di computazione. Ricordiamo infatti che Gemini opera in un ambito conversazionale. Quindi, il nostro scopo principale non è tanto quello di individuare i picchi o le componenti dello spettro (per questo scopo ci sono già software specifici) ma di dimostrare l'abilità di Gemini AI di elaborazione autonoma.

Conclusioni

Il presente lavoro dimostra l'efficacia di Gemini nell'operare autonomamente nella ricerca e deconvoluzione dei picchi negli spettri Raman. L'autonomia qui riferita indica che, a seguito di un'adeguata interazione conversazionale e di alcune deconvoluzioni iniziali guidate, l'intelligenza

artificiale è stata capace di condurre l'analisi degli spettri tramite deconvoluzione senza richiedere ulteriori suggerimenti specifici.

È importante notare che, sebbene Gemini possa operare in modo indipendente, la precisione e l'accuratezza della deconvoluzione possono essere ulteriormente ottimizzate e affinate attraverso l'introduzione di suggerimenti e indicazioni più dettagliate da parte dell'utente.

Infine, l'esperienza ha evidenziato la capacità di Gemini di selezionare in autonomia la libreria Python più appropriata per la preparazione del file di deconvoluzione, dimostrando una notevole flessibilità e adattabilità agli obiettivi di ricerca.

References

- Daniel, I., Gillet, P., & Ghose, S. (1995). A new high-pressure phase transition in anorthite (CaAl₂Si₂O₈) revealed by Raman spectroscopy. *American Mineralogist*, 80(7-8), 645-648.
- Freeman, J. J., Wang, A., Kuebler, K. E., Jolliff, B. L., & Haskin, L. A. (2008). Characterization of natural feldspars by Raman spectroscopy for future planetary exploration. *The Canadian Mineralogist*, 46(6), 1477-1500.
- Sharma, S. K., Simons, B., & Yoder, H. S. (1983). Raman study of anorthite, calcium Tschermak's pyroxene, and gehlenite in crystalline and glassy states. *American Mineralogist*, 68(11-12), 1113-1125.
- Sparavigna, A. C. (2023). q-Gaussian Tsallis Line Shapes and Raman Spectral Bands. arXiv preprint arXiv:2307.11092.