

Desenvolvimento de Métodos Numéricos para Suavização de Sinais e Modelagem de Ruídos em Sistemas Eletroquímicos.

Wagner D. Gonçalves^{*1} (PG), Frank N. Crespilho¹ (PQ)

wagnergon5@gmail.com

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH), Universidade Federal do ABC, Santo André, SP.

Palavras Chave: Métodos Numéricos, Ruídos em Eletroquímica, Modelagem Computacional em Single Devices

Introdução

Single Molecule Devices e dispositivos nanométricos individuais¹ contemplam o estado da arte em nanomanipulação aplicada em eletroquímica. Porém, na caracterização destes dispositivos, têm-se sinais com baixas intensidades, da ordem de pico e femto Ampere, onde diversos tipos de ruídos podem atuar, dificultando o processamento dos dados adquiridos experimentalmente. Entre os ruídos² não eletroquímicos mais pertinentes, destaca-se o Ruído de Jonson, proveniente da vibração térmica dos átomos; Ruído Shot, resultante da flutuação do campo magnético e da intensidade de corrente devido ao fluxo de elétrons e, por fim, têm-se os ruídos eletromagnéticos provenientes de ondas de radiofrequência (RF).

Desta forma, o objetivo deste trabalho é a criação de programas computacionais baseados em métodos numéricos derivados de operações do tipo Adjacent-Averaging (AA), Savitzky-Golay (SG) e filtro por transformada rápida de Fourier (FFT). Como estudo de caso, utilizou-se os métodos supracitados na interpretação da relação sinal/ruído em voltamogramas obtidos com um nanofio de estanho dopado com óxido de índio (ITO) (Fig. 1).

Resultados e Discussão

Dentre o tratamento do sinal adquirido por meio do uso de filtros AA, SG e FFT, o melhor resultado obtido foi com o uso do filtro AA utilizando 20 pontos por intervalo.

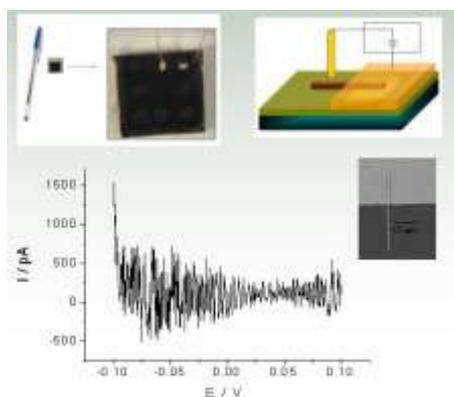


Figura 1. Esquematização do sistema de aquisição dos sinais de voltametria do ITO-NW¹. *Inset:* dispositivos construídos em nanoescala.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O filtro AA consiste em subdividir o espaço amostral em intervalos, consegue-se maior precisão com o aumento de pontos dentro do intervalo, a média utilizada na normalização do cálculo dos novos pontos é independente dentro de cada subdivisão, ficando implícito que quanto maior o número de subintervalos, melhor será o tratamento do sinal.

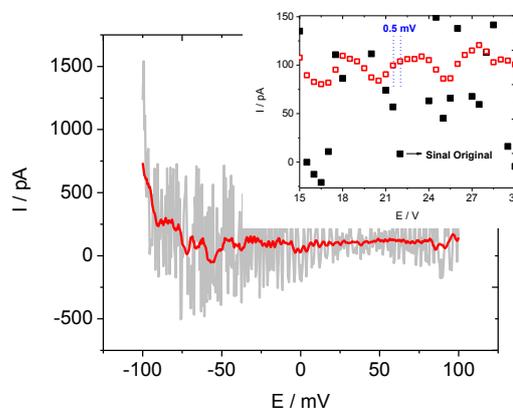


Figura 2. Sinal do tratado com a utilização do filtro AA. Divisão do intervalo em 20 pontos. Condições: eletrólito de trabalho: nanofio de ITO; eletrólito: tampão fosfato 0,1 molL⁻¹; contra eletrodo de ouro. *Inset:* obtenção dos novos pontos dentro do intervalo através do método de médias flutuantes.

Conclusões

Utilizando métodos numéricos de médias flutuantes aplicados em filtros de ruído, observou-se a eliminação de ruídos de alta-frequência, com a eliminação de descontinuidades. Também, melhorou-se significativamente a qualidade do perfil voltamétrico. Desta forma, vislumbra-se a utilização deste método para o desenvolvimento de um novo software aplicados a dispositivos nanométricos individuais.

Agradecimentos

CNPq; INEO/MCT; Rede BioNanoMed (Capes); Fapesp (Projeto: 2009/15558-1).

¹Crespilho, F. N.; Lanfredi, J.C.; Leite, E. R.; Chiquito, A. J. *Development of Individual Semiconductor Nanowire for Bioelectrochemical Device at Low Overpotential Conditions. Electrochemistry Communications*, v. 11, p. 1744-1747, 2009.

²Vaseghi, S.V. *Advanced Digital Signal Processing and Noise Reduction*, Fourth Edition, Wiley & Sons Ltd, 2008.