

Aluno: Felipe Moreira Moraes da Silva
Orientador: Roberto de Oliveira Magnago

Criação de Software Web para Indexação de Picos Cristalográficos associados a Difractogramas de Raios X utilizando o Algoritmo Search-Match



MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS



Plano de Apresentação

- Introdução
- Objetivos
- Justificativas
- Revisão Bibliográfica
- Desenvolvimento do Software
- Resultados
- Discussão
- Conclusão
- Projetos Futuros



Introdução

- Raios X e difração
- Softwares estrangeiros
- Necessidade de instalação
- Foco na pesquisa



Objetivos

- Geral
 - Indexação de Picos Cristalográficos sem necessidade de instalação
- Específicos
 - Padronização da entrada de dados
 - Padronização da arquitetura interna
 - Previsão de adição de novos métodos ou bases de dados



Justificativa

- Ausência de sistemas com processamento online
- Nenhuma opção em língua portuguesa
- Dificuldade para instalação e uso das opções disponíveis



Revisão Bibliográfica

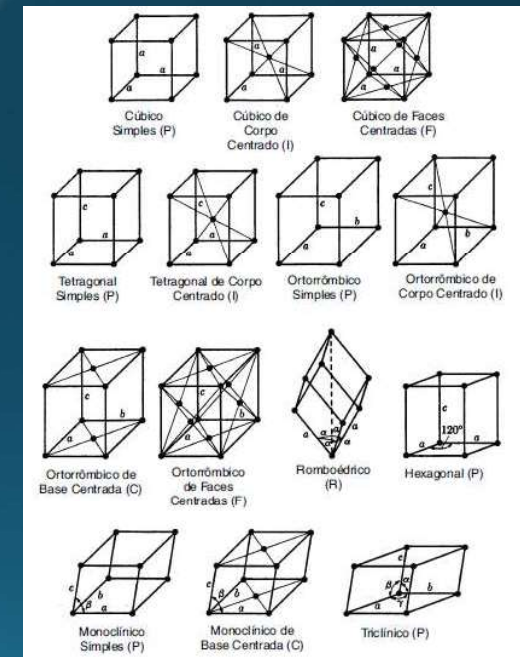
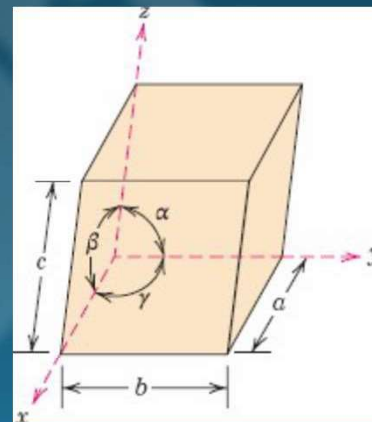


MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS



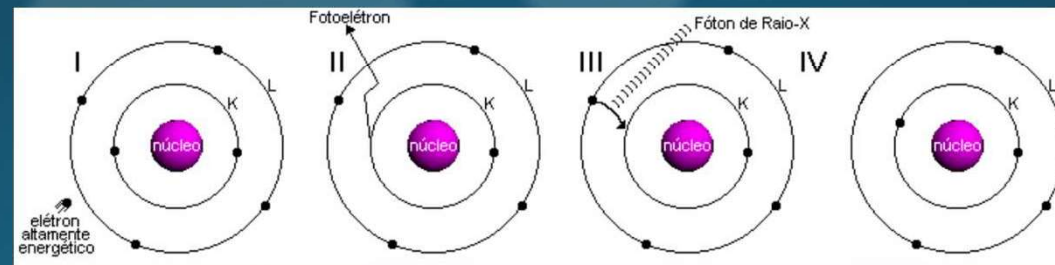
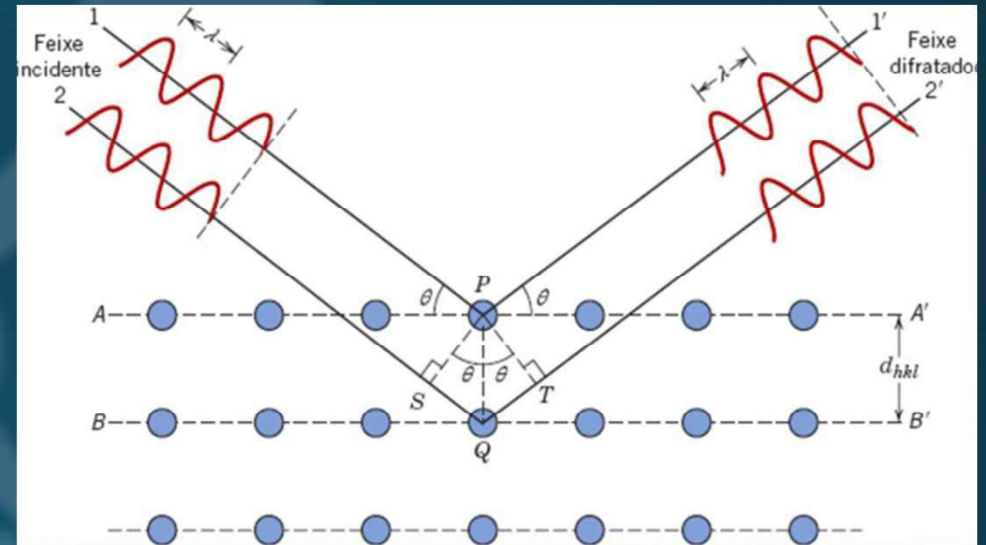
Estruturas, Sistemas e Planos Cristalinos

- Estruturas cristalinas e sistemas cristalinos
 - Célula unitária
 - Parâmetros de rede cristalina
- Definição de planos cristalográficos
 - Índice de Miller-Bravais



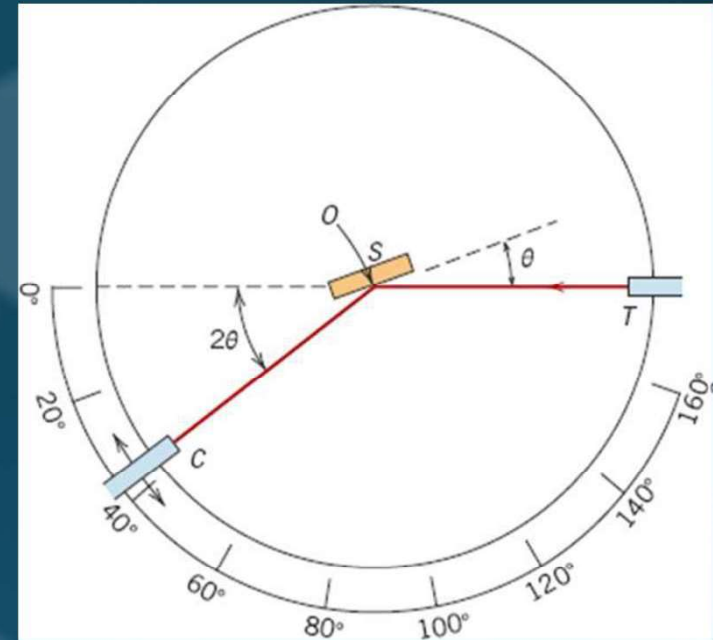
Raios X

- Histórico
 - Wilhelm Conrad Röntgen (1895)
- Características
- Difração
 - $n\lambda = 2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin \vartheta$ (Lei de Bragg)
 - $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$



Raios X

- Difratorômetro
- Difratoograma
- Indexação



Propriedades de Sistemas

- Funcionalidade
- Manutenibilidade
- Usabilidade
- Confiabilidade
- Portabilidade
- Eficiência
- Segurança
- Disponibilidade
- Escalabilidade
- Robustez



Arquitetura de sistemas

- Arquitetura Desktop
- Arquitetura Cliente/Servidor
- Arquitetura Web
- Arquitetura em Nuvem



Metodologias de software

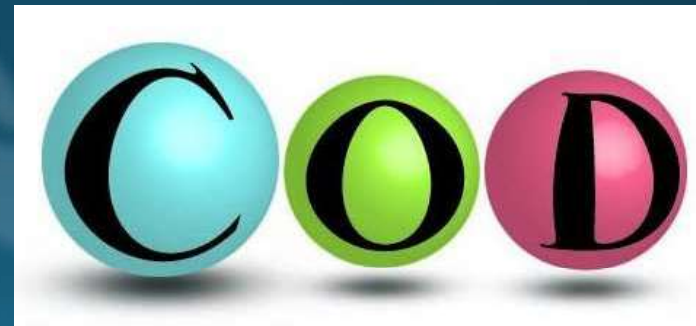
- UML
 - Unified Modeling Language
- SOLID
 - *Single Responsibility Principle* (Princípio da Responsabilidade Única)
 - *Open-Closed Principle* (Princípio Aberto-Fechado)
 - *Liskov Substitution Principle* (Princípio da Substituição de Liskov)
 - *Interface Segregation Principle* (Princípio da Segregação de Interface)
 - *Dependency Inversion Principle* (Princípio da Inversão da Dependência)
- MVC
 - Model-View-Controller



Informações Cristalográficas

- STAR – Self-Defining Text Archive and Retrieval
- SCFS – Standard Crystallographic File Structure
- CIF – Crystallographic Information File

- Crystallography Open Database



Métodos de Análise

- Simulação de Padrões
- Whole Pattern Modelling
- Curve-Fitting
- Search-Match



Sistemas disponíveis e métodos

Software	Desenvolvedor	Idioma Nativo	Menor Preço	Propósito Geral	Simulação de Padrões	Whole Pattern Structure Refinement	Whole Pattern Decomposition	Curve-Fitting	Search-Match	Indexação
HighScore Plus	Panalytical	Inglês	Pago*	X						
Siroquant	Sietronics	Inglês	Pago*	X						
Match!	Crystal Impact	Inglês	599,00 EUR	X						
PCPDFWIN	ICDD	Inglês	1.250,00 USD	X						
RIETAN	Izumi	Inglês	Gratuito**		X	X	X			
FullProf	Rodriguez-Carvajal	Inglês	Gratuito**			X				X
GSAS	Larson e Von Dreele	Inglês	Gratuito			X	X			
TOPAS	Coelho	Inglês	1.600,00 EUR			X	X			
LHPM-Rietica	Hunter e Howard	Inglês	Gratuito**			X	X			
Fityk	Wojdyr	Inglês	Gratuito					X		
CMPR	Toby	Inglês	Gratuito					X	X	X
Xfit	Cheary e Coelho	Inglês	Gratuito**					X		
dSNAP	Barr, Dong et al	Inglês	Gratuito**						X	
Crysfire	Shirley	Inglês	Gratuito							X
Origin	OriginLab	Inglês	69,00 USD	X						



C#

- Parte do Microsoft .NET Framework
- Linguagem amplamente utilizada pelo mercado
- Permite vários tipos de aplicação e arquiteturas



Desenvolvimento



MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS



Desenvolvimento do Produto

- Microsoft Visual Studio 2019
- gnuPlot
- GitHub
- Busca por API
- Bootstrap v4.5.3
 - Interface por etapas



Etapas

- 1 – solicitação do arquivo DRX, ou a planilha fornecida
- 2 – busca na base de dados COD
 - Limitação de resultados a 2000
- 3 – seleção dos resultados a serem utilizados na indexação
- 4 – entrada dos parâmetros adicionais referentes ao ensaio
- 5 – indexação e ajuste do gráfico resultante



Resultados



MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS



Tela inicial

Glendex Indexador Sobre Idioma

Glendex

A forma mais simples e rápida de indexar seus resultados!

[Começar agora!](#)

Como proceder?

<h4>Carregue o arquivo</h4> <p>Escolha o arquivo texto do difratômetro ou utilize nosso modelo em Excel para informar os dados do difratograma</p>	<h4>Busque artigos</h4> <p>Utilize nossa interface para buscar artigos e outros documentos presentes na COD - Crystallography Open Database</p>	<h4>Parametrize a indexação</h4> <p>Defina como será a identificação dos picos e como será feita a relação entre os dados dos artigos e os picos</p>	<h4>Indexe!</h4> <p>O gráfico com todos os pontos do arquivo informado será gerado, e você terá a oportunidade de personalizar cada ponto e o título, podendo exportar a imagem gerada.</p>
--	---	--	---

© 2021 - Felipe M. M. da Silva
Mestrado Profissional em Materiais - UniFOA®



Passo 1

Glendex Indexador Sobre Idioma ▾

[Início](#) / [Arquivo DRX](#) / [Busca COD](#) / [Resultado Busca](#) / [Configurações Adicionais](#) / [Indexação](#)

Passo 1/5

Selecione o arquivo do difratômetro de raios-X

Arquivo Difratômetro Raios-X Nenhum ar...ecionado.

Para agilizar a indexação, utilize o arquivo de exemplo a seguir para inserir os dados oriundos do difratograma. Para baixar, [clique aqui](#)

© 2021 - Felipe M. M. da Silva
Mestrado Profissional em Materiais - UniFOA®



Passo 2

Glendex [Indexador](#) [Sobre](#) Idioma ▾

[Início](#) / [Arquivo DRX](#) / [Busca COD](#) / [Resultado Busca](#) / [Configurações Adicionais](#) / [Indexação](#)

Passo 2/5: Busca na Crystallography Open Database

Busque na base de dados COD (Crystallographic Open Database) os artigos para indexação dos picos:

[Elementos distintos da fórmula química](#)

Elemento 1	Elemento 2	Elemento 3	Elemento 4
<input type="text" value="Zr"/>	<input type="text" value="O"/>	<input type="text" value="Mg"/>	<input type="text" value="Al2"/>
Elemento 5	Elemento 6	Elemento 7	Elemento 8
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

[Elementos distintos que não devem aparecer na fórmula química](#)

Elemento 1	Elemento 2	Elemento 3	Elemento 4
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

[Quantidade de elementos distintos da fórmula química](#)

Mínimo Máximo

[Valores mínimos e máximos dos parâmetros de rede](#)

A	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>
B	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>
C	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>
Alpha	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>
Beta	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>
Gamma	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>
Volume	Mínimo	<input type="text"/>	Máximo	<input type="text"/>

© 2021 - Felipe M. M. da Silva
Mestrado Profissional em Materiais - UniFOA®



Passo 3

Glendex Indexador Sobre Idioma

Início / Arquivo DRX / Busca COD / Resultado Busca / Configurações Adicionais / Indexação

Passo 3/5: Resultado da busca (Crystallography Open Database - COD)

Artigos selecionados

Fórmula	Ano Publicação	Autor(es)	Trabalho	A	B	C	Alpha	Beta	Gamma	Volume
- C29 H61 Al2 N Ni O8 -	2008	Michael Veith; Kroum Valtchev; Volker Huch	Tetraalkoxyaluminates of Nickel(II), Copper(II), and Copper(I) Inorganic Chemistry	13084	17054	17805	90	9781	90	39361
- C33 H57 Al2 N3 Ni O7 -	2008	Michael Veith; Kroum Valtchev; Volker Huch	Tetraalkoxyaluminates of Nickel(II), Copper(II), and Copper(I) Inorganic Chemistry	12034	16732	17281	90	9525	90	3465

Confirmar escolha

Artigos encontrados

Mostrar 10 registros Procurar:

Fórmula	Ano Publicação	Autor(es)	Trabalho	A	B	C	Alpha	Beta	Gamma	Volume
- C81 H108 Al2 Cl4 N12 Ni5 O37 -	2018	Fraser, Hector; Nichol, Gary Stephen; Uhrin, Dusan; Nielsen, Ulla Gro; Evangelisti, Marco; Schnack, Jürgen; Brechin, Euan K.	Order in disorder: solution and solid-state studies of [MIII2MIIS] wheels (MIII = Cr, Al; MII = Ni, Zn) Dalton Transactions	145316	145316	37926	90	90	120	693577
- C344 H640 Al28 F32 N4 Ni4 O128 -	2007	Sañudo, E Carolina; Muryn, Christopher A; Helliwell, Madeleine A; Timco, Grigore A; Wernsdorfer, Wolfgang; Winpenny, Richard E P	Al, Ga and In heterometallic wheels and their by-products. Chemical communications (Cambridge, England)	26016	20219	25896	90	111	90	12717
- C3.8 H9.9 Al2.5 Co0.5 Ni1.1 Ni0.25 O12.5 P3 -	2001	Garcia, Raquel; Philp, Eilidh F.; Slawin, Alexandra M. Z.; Wright, Paul A.; Cox, Paul A.	Nickel complexed within an azamacrocyclic structure directing agent in the crystallization of the framework metalloaluminophosphates STA-6 and STA-7 Journal of Materials Chemistry	186842	186842	9408	90	90	90	32843

Mostrando de 1 até 3 de 3 registros

Anterior 1 Seguinte

Pesquisar novamente

© 2021 - Felipe M. M. da Silva
Mestrado Profissional em Materiais - UniFOA®



Passo 4

Glendex Indexador Sobre Idioma ▾

[Início](#) / [Arquivo DRX](#) / [Busca COD](#) / [Resultado Busca](#) / [Configurações Adicionais](#) / [Indexação](#)

Passo 4/5 - Parâmetros Adicionais

Demais parâmetros de indexação

Tamanho mínimo dos picos	<input type="text" value="130"/>
Distância mínima entre picos	<input type="text" value="3"/>
Módulo de arredondamento	<input type="text" value="0,005"/>
Comprimento de onda	<input type="text" value="Cu K Alpha - 1.54065"/>

© 2021 - Felipe M. M. da Silva
Mestrado Profissional em Materiais - UniFOA®



Passo 5

Glendex Indexador Sobre Idioma

Início / Arquivo DRX / Busca COD / Resultado Busca / Configurações Adicionais / Indexação

Passo 5/5: Indexação dos Picos

Indexação dos Picos

Download

Indexação de Picos Cristalográficos

Intensidade

Ângulo (2θ)

Título do gráfico: Indexação de Picos Cristalográficos Eixo X: Ângulo (2θ) Eixo Y: Intensidade Alterar Gráfico

Pico #	Ponto	Ângulo	Intensidade	Ocultar	Texto Alternativo	Alterar Pico
#1009	(Ponto 1009; Ângulo = 30,18; Intensidade = 1554)	30,18	1554	Não	texto	Alterar Pico
#1347	(Ponto 1347; Ângulo = 36,94; Intensidade = 1124)	36,94	1124	Não		Alterar Pico
#2017	(Ponto 2017; Ângulo = 50,34; Intensidade = 964)	50,34	964	Não		Alterar Pico
#2013	(Ponto 2013; Ângulo = 50,26; Intensidade = 962)	50,26	962	Sim		Alterar Pico
#1742	(Ponto 1742; Ângulo = 44,84; Intensidade = 834)	44,84	834	Não	(h, k, l) - Elemento	Alterar Pico



MESTRADO PROFISSIONAL
EM MATERIAIS



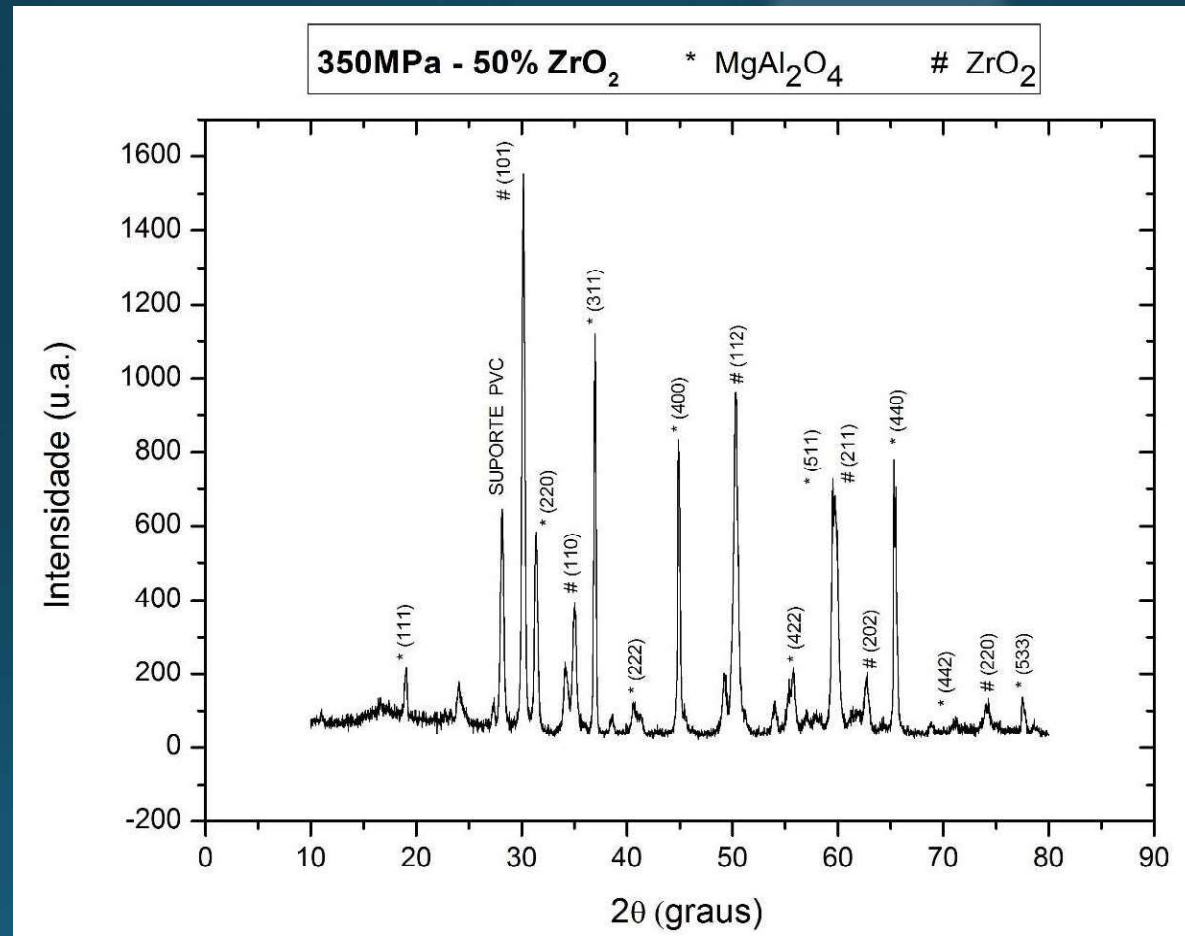
Discussão



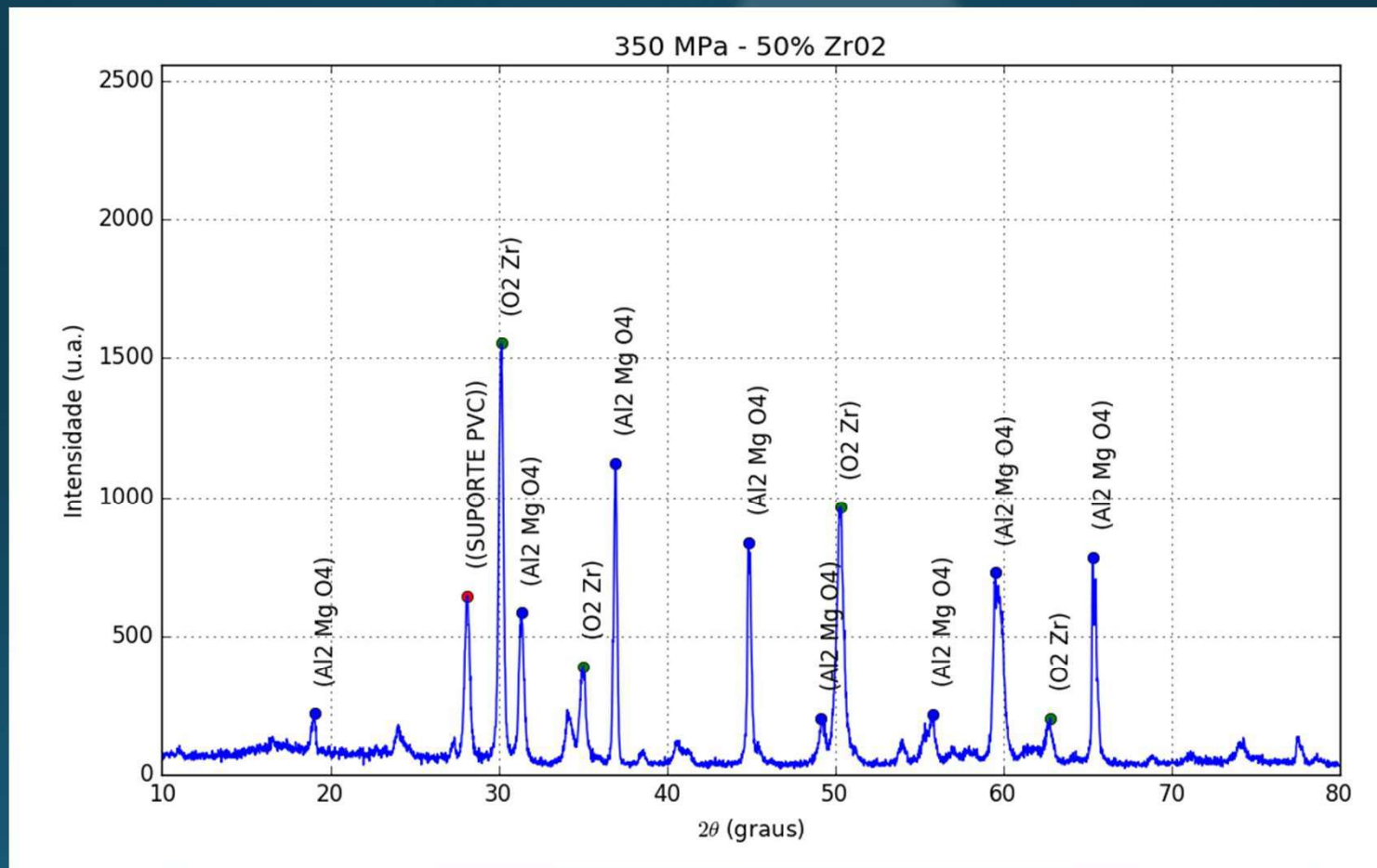
MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS



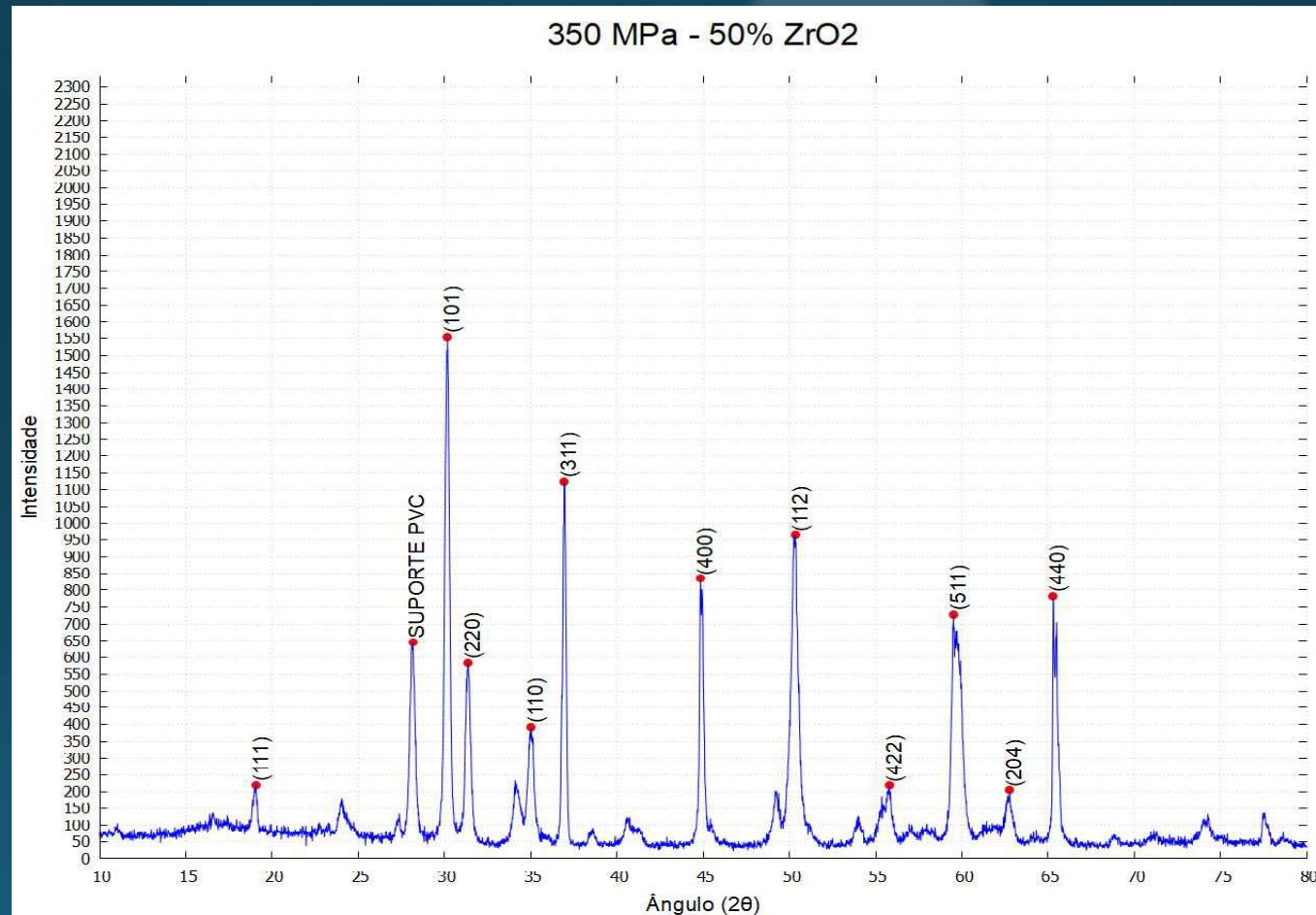
ZrO₂ – Manual



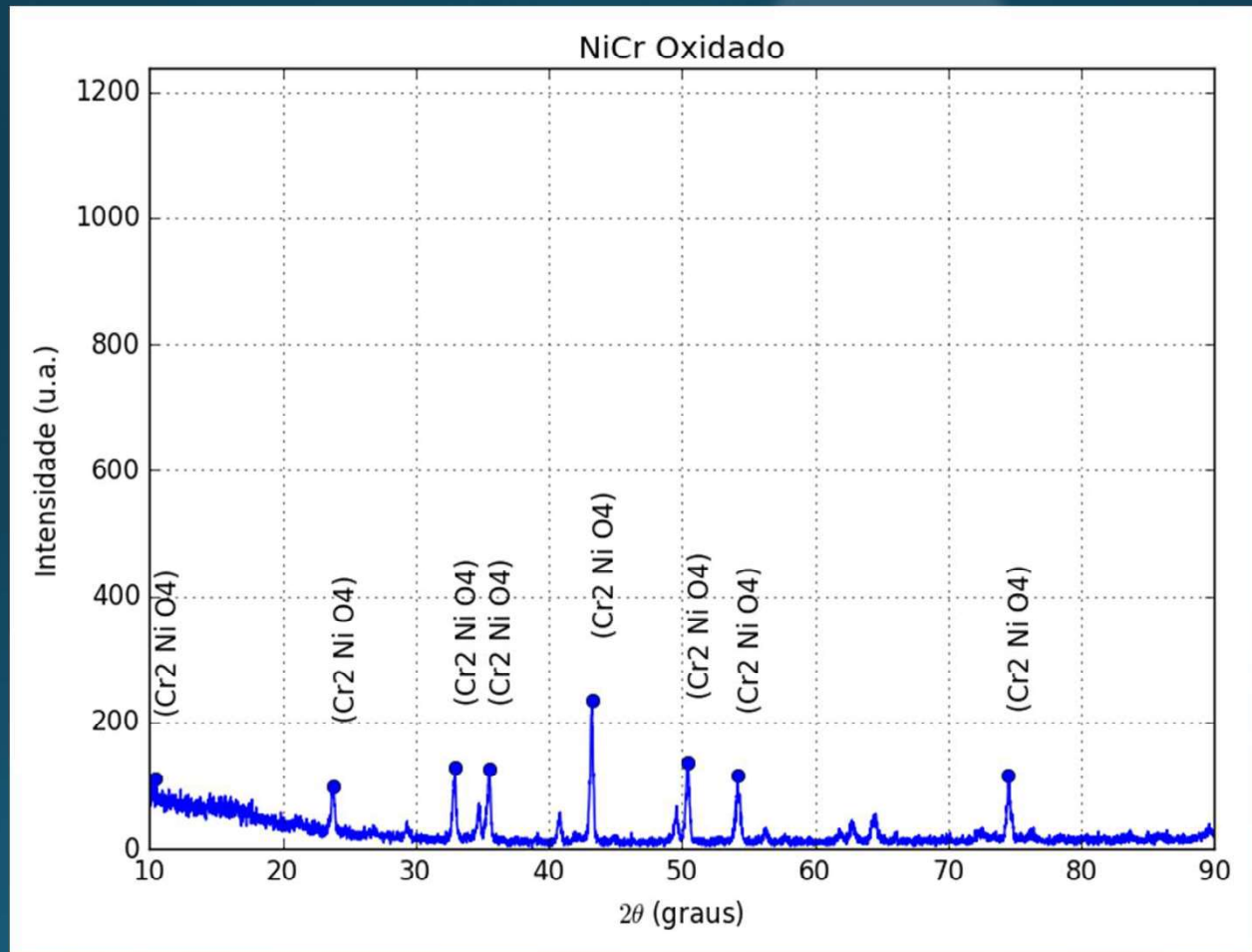
ZrO₂ – Sistema-base



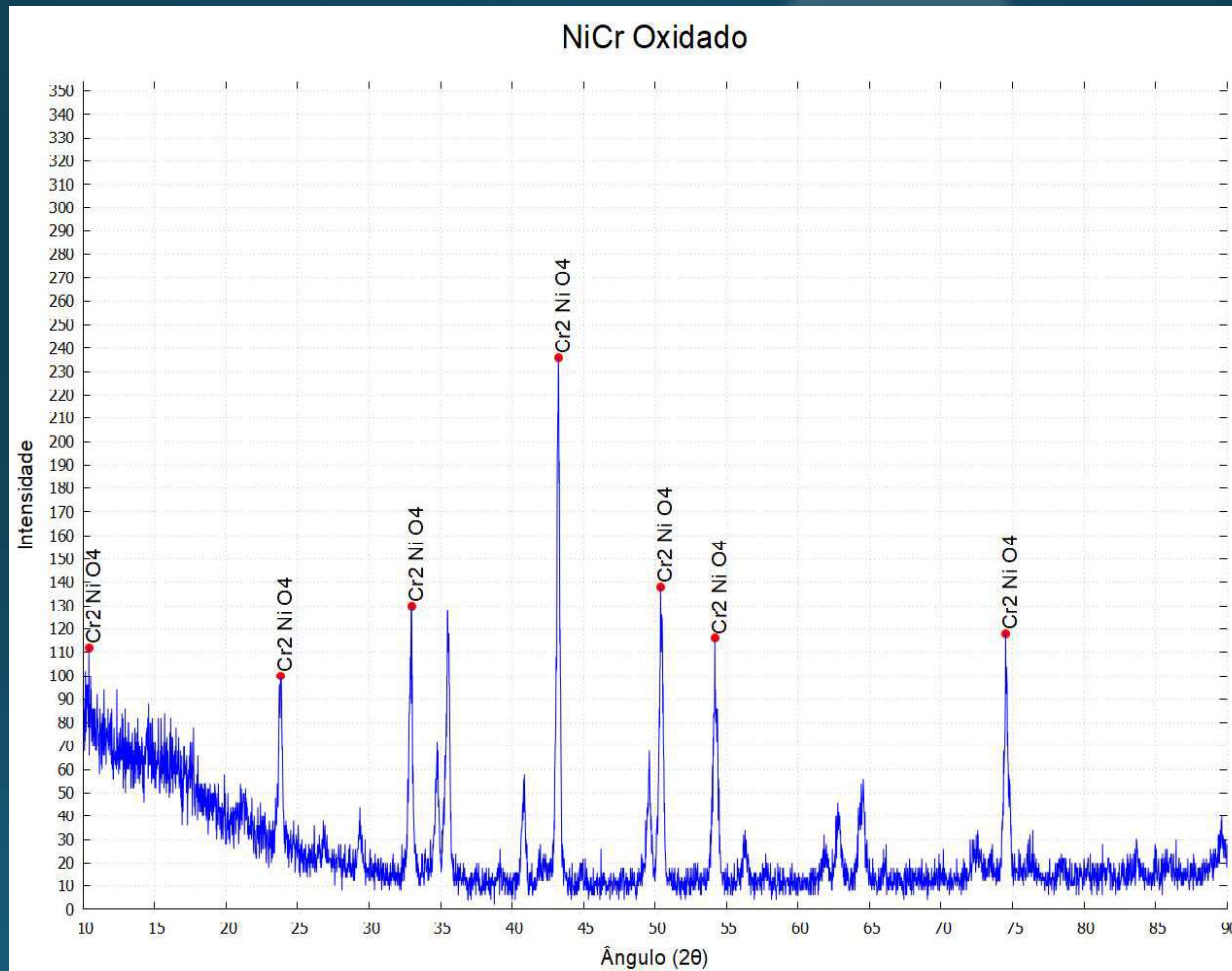
ZrO₂ – Glindex



NiCr oxidado – Sistema-base



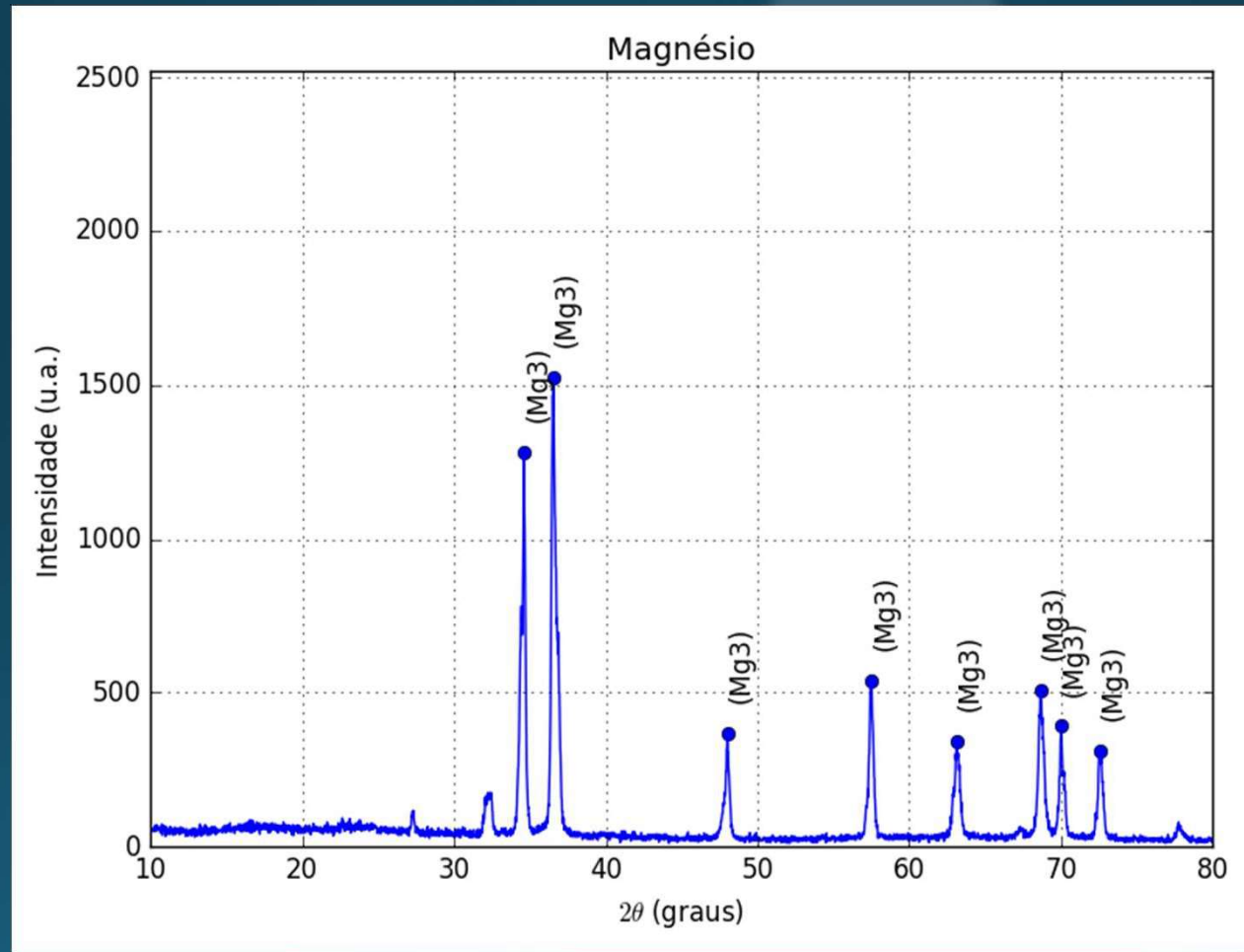
NiCr oxidado – Glindex



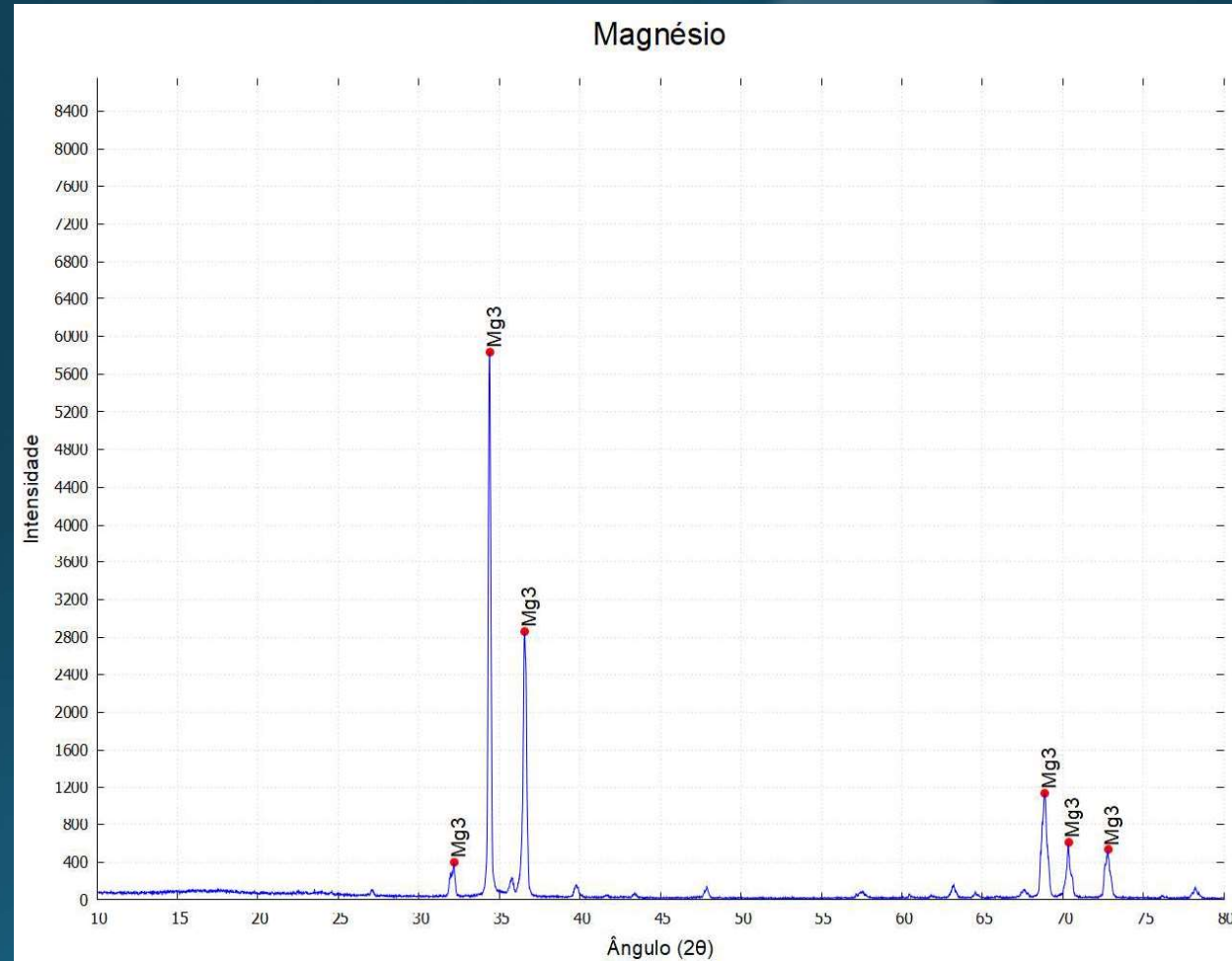
MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS

UniFOA
CENTRO UNIVERSITÁRIO
DE FÍSICA

Mg – Sistema-base



Mg – Glindex



MESTRADO PROFISSIONAL
EM
MATERIAIS

UniFOA
CENTRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO
EM MATERIAIS

Conclusão

- Gráficos gerados de qualidade comparável às alternativas mencionadas
- Sem preocupação de preparar ambientes próprios para instalação
- Indexação em minutos
- Arquitetura permite a fácil evolução do sistema
- Possibilidade de utilização em outros dispositivos



Trabalhos Futuros

- Conversão do código para .Net Core
 - Funcionará em servidores não-Microsoft
- Implementação de outros métodos de análise
 - Curve-Fitting (análise dos difratogramas)
 - Método de Rietveld (análise de fases)
 - Whole Pattern Modelling (caracterização de fases)

