

DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE PARA DETERMINAÇÃO DE TAMANHO DE CRISTALITO E MICRODEFORMAÇÕES UTILIZANDO O GRÁFICO DE WILLIAMSON-HALL A PARTIR DE DADOS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X

Luan Hernandes Batista (PIBITI/FA/UEPG), André Vitor Chaves de Andrade

luanhb7@gmail.com; avcandrade@gmail.com

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física

Ciências Exatas e da Terra – Física – Física da Matéria Condensada - Cristalografia

Palavras-Chave: *Cristalografia Computacional, Desenvolvimento de Software, Método de Rietveld, Programação*

Introdução

A cristalografia computacional é uma ferramenta útil para examinar materiais com relevância tecnológica com base em informações obtidas a partir da difração de raios X. Os cálculos computacionais, particularmente no contexto do refinamento de Rietveld, permitem a realização de uma variedade de análises, que vão desde a análise estrutural à análise de microestrutura, isto é, de tamanho de cristalito e microdeformações do retículo cristalino.

Potencial de Mercado e Diferencial Competitivo

O programa foi desenvolvido pensando na praticidade do pesquisador no momento em que for realizar a análise. Foi observado nos softwares tradicionais que utilizam o Método de Rietveld uma falta dos resultados que o *PyWhall* propõe. Por isso, deseja-se oferecer uma outra perspectiva de estudo, sendo ela mais rápida e simples. O diferencial do projeto é a agilidade na obtenção de variáveis de importância no momento da busca por materiais policristalinos de interesse tecnológico e industrial, tanto por empresas quanto por acadêmicos.

Problema

Ao se utilizar o programa GSAS-II, é possível oferecer uma alternativa à análise de tamanho de cristalito e de microdeformações do retículo cristalino oferecida por este programa, uma vez que elas não são obtidas de maneira trivial quando se realiza a análise de Rietveld?

Considerações Finais

O programa tem muito potencial e poderia facilmente ser cada vez mais aperfeiçoado com novas funções. Acredita-se despertar o interesse de muitos pesquisadores na área da cristalografia. Além de resultados validados pela literatura e inclusão no quesito requisitos de sistema para utilizá-lo, podemos destacar a facilidade de utilizar o software: ele é simples, intuitivo e com um desenvolvimento compreensível para os interessados na programação. Em contrapartida, o *PyWhall* oferece resultados apenas para sistemas de fase única e necessita da exportação de um arquivo através do software gratuito GSAS-II, responsável pela Análise de Rietveld.

Solução e Benefícios

A solução foi desenvolver um software, atualmente denominado *PyWhall*, utilizando a linguagem de programação Python. O benefício do projeto é obter de forma rápida e simples, os valores do tamanho médio de cristalito e das microdeformações do tamanho de cristalito por meio do gráfico de Williamson-Hall. Para obter tais informações, basta um arquivo de saída da análise de Rietveld que contenha a largura total à meia altura e a correspondente posição em 2θ do pico de difração do material.

Estágio de Desenvolvimento da Tecnologia

- (X) Laboratório; () Mercado
() Scale-up (mudança de escala) () Protótipo

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação Araucária e à UEPG pelo apoio financeiro. Certamente os recursos auxiliaram e motivaram o desenvolvimento desse projeto. Ao programa PIBITI pela oportunidade de desenvolver recursos humanos na área da inovação tecnológica.

Contato Institucional

Universidade Estadual de Ponta Grossa
Departamento de Física
defis@uepg.br
(42) 3220-3044

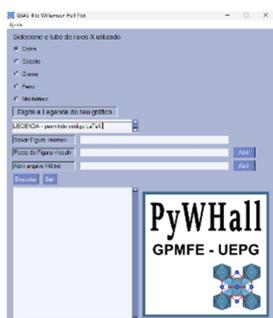


Figura 1. Menu principal

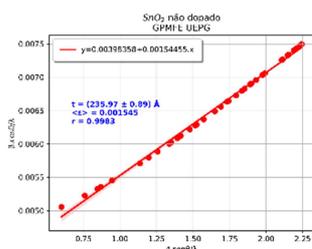


Figura 2. Saída da execução