

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Desenvolvimento de Software para Extração de Dados de Imagens de Difratomogramas

Lucas Rossetto Agra¹
Julia Sawaki Tanaka²
Selma Gutierrez Antonio³
Instituto de Química, UNESP, Araraquara, SP

1 Introdução

A identificação de fases cristalinas por difração de raios X por policristais é importante em várias áreas do conhecimento. Para essas análises existem bancos de dados como o ICDD-PDF [1]. Porém, na área farmacêutica, esses bancos ainda não contemplam estruturas cristalinas de grande parte de polimorfos. Nestes casos, pode-se gerar o difratograma baseado em informações de patentes ou artigos e compará-lo com o difratograma observado do material para a identificação de fases presentes.

Para isso foi desenvolvido o software JST-XRD [2] que gera padrões de difração a partir dos dados ($2\theta \times I$) ou ($d \times I$) de substâncias, obtidos em patentes ou artigos, para permitir a comparação com o difratograma observado. Nesses dados, θ é o ângulo de Bragg, I é a intensidade do pico e d é a distância interplanar.

Às vezes, esses dados não são encontrados em patentes e artigos científicos, porém, imagens dos difratogramas são fornecidas e são úteis para a identificação de fases desde que se possa extrair uma tabela ($2\theta \times I$) ou ($d \times I$). Atualmente, a extração desses dados é realizada de forma manual, com o uso de régua.

O objetivo deste trabalho é desenvolver um software que permita uma extração mais rápida e precisa da posição e intensidade dos picos de Bragg de uma imagem de difratograma, para que possam ser utilizados no programa JST-XRD para análise e identificação de fases presentes em um material policristalino.

2 Desenvolvimento

O software está sendo desenvolvido utilizando-se o ambiente de desenvolvimento integrado Lazarus.

¹lragra@hotmail.com

²juliasawaki@yahoo.com

³selma_ga@yahoo.com.br

O software já possui várias funções implementadas. Inicialmente, deve-se definir o sistema ortogonal, informando as coordenadas reais de um ponto em cada eixo, para que o programa possa calcular o fator de conversão entre as coordenadas dos pixels da imagem e as coordenadas do difratograma. A partir daí o programa mostra em tempo real as coordenadas do difratograma de acordo com o movimento do mouse, Figura 1.

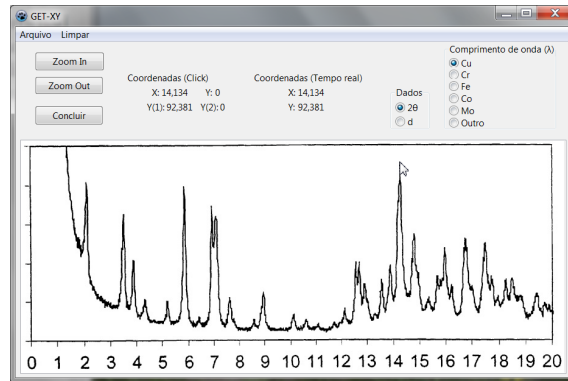


Figura 1: Interface do programa Get-XY

O usuário deve clicar no pico de Bragg, cuja posição e intensidade deseja extrair e em seguida na altura do background. A intensidade (I) considerada é a diferença entre a altura do pico e a altura do background. O usuário deve ainda informar se na imagem a posição dos picos é dada em d (distância interplanar) ou 2θ . Quando for 2θ , deve ser selecionado o elemento (Cu, Cr, Fe,...) que constitui o alvo de metal do tubo de raios X, pois o seu comprimento de onda (λ) será utilizado para converter 2θ para d , através da lei de Bragg $\lambda = 2d \cdot \sin\theta$, para o armazenamento dos dados em um arquivo texto.

3 Conclusões

Os arquivos de dados gerados já podem ser utilizados pelo programa JST-XRD.

4 Agradecimentos

À FAPESP - Processo nº 2015/17101-0

Referências

- [1] International Centre for Diffraction Data - ICDD-PDF. [acessado em 15/02/2016] Disponível em: <http://www.icdd.com/products/>.
- [2] J. S. Tanaka, C. O. Paiva-Santos, S. G. Antonio. *Desenvolvimento de um software para gerar difratogramas de raios X a partir de informações de referências bibliográficas*, Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 3, n. 1, 2015. DOI: 10.5540/03.2015.003.01.0091.