

Base de datos de MOF's

CICATA Legaria – IPN
Laboratorio Nacional de Conversión
y Almacenamiento de Energía

Pantalla inicial al usuario

- 3 botones de acción:
 - Buscar información de compuesto
 - Subir información de compuesto
 - Personal autorizado
- Buscar información del compuesto
 - Autentificar usuario (correo electrónico y clave proporcionada por el usuario)
 - Botón de recuperación de clave
 - Campo de búsqueda del material por: palabras clave o investigador responsable o director de tesis (1 ó 2) o clasificación del compuesto o nombre del compuesto (de modo parcial o total) o listado completo
 - Botón de selección que lleve a la ficha del compuesto
- Subir información del compuesto
 - Autentificar usuario (correo electrónico y clave proporcionada por el usuario)
 - Botón de recuperación de clave
 - Abrir campos para capturar información de portada
 - Abrir pestañas para capturar información (campo de texto) y subir imágenes
- Personal autorizado
 - Autentificar usuario (correo electrónico y clave proporcionada por el usuario)
 - Botón de recuperación de clave
 - Dar de alta personal autorizado y usuarios que pueden subir información
 - Poder quitar y poner información que se haya subido en todas las secciones
 - Modificar comentarios de las cajas descriptivas de las figuras

Permisos de usuarios

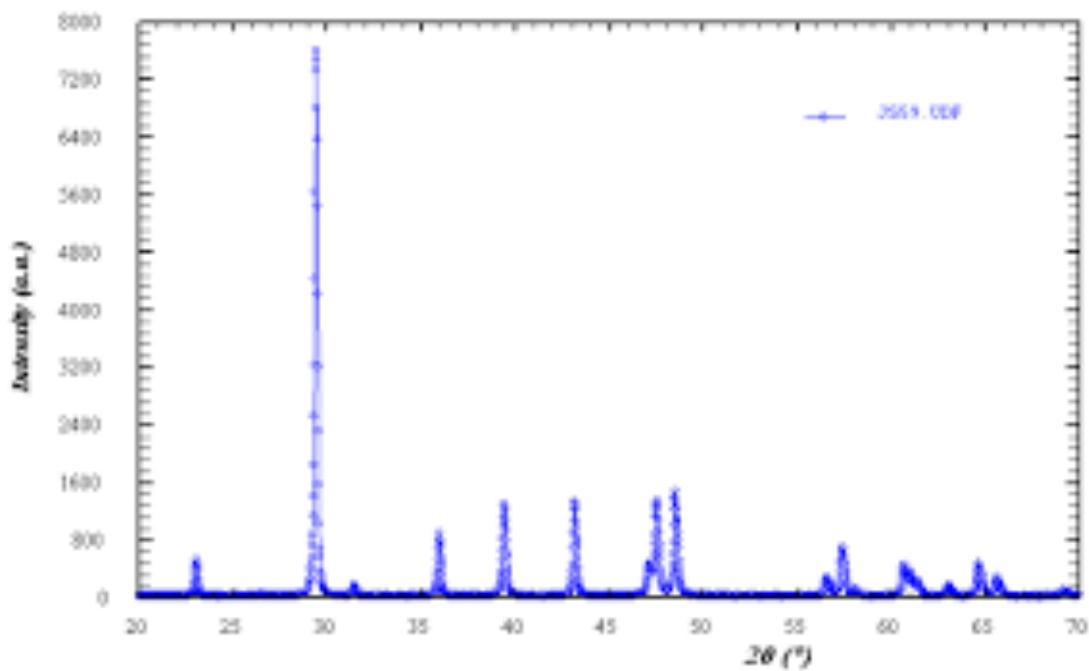
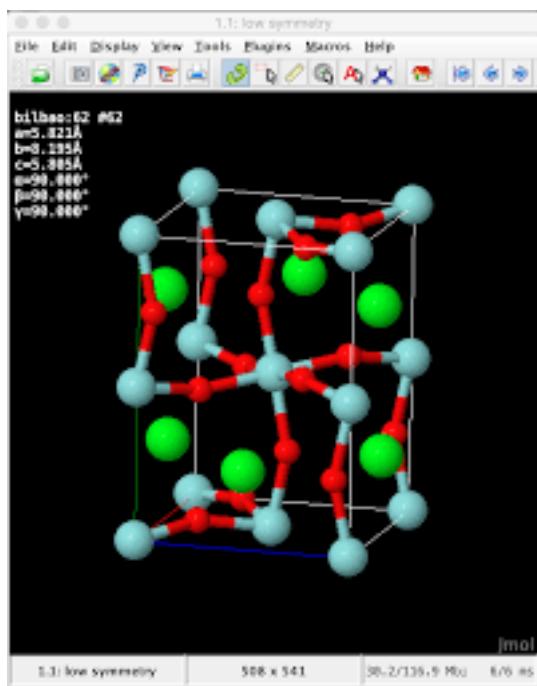
- El personal autorizado puede:
 - Dar de alta a usuarios registrados para que puedan consultar y subir información
 - Permitir que usuarios suban información a expedientes de otros usuarios; en tal caso, en la ficha del compuesto se debe poner los investigadores responsables de la información que se subió
- Los usuarios que suban información pueden:
 - Visualizar la información y descargar documentos
 - Modificar lo que suban a la portada y el expediente pero no la información que suban otros usuarios (a menos que el personal autorizado lo permita)

Portada

- 5 Palabra clave (5 campos de texto) ✓
- Ventana de visualización 3D (ventana gráfica interactiva) —
- Patrón de difracción calculado (imagen) —
- Nombre del compuesto (campo de texto) ✓
- Clasificación del compuesto (listado precargado) ✓ ✓
- Formula química del compuesto (campo de texto) ✓ ✓
- Archivo CIF del compuesto (archivo CIF con opción de descarga) —
- Propósito o aplicaciones para el desarrollo del material (campo de texto) ✓
- Método de síntesis (campo de texto) ✓
- Artículo donde se publicó el trabajo (link a la revista y PDF con opción de descarga)
- Titulo de tesis donde se publicó (campo de texto)
- Tesis donde se publicó (PDF con opción de descarga)
- Director de tesis 1 y director de tesis 2 (listado precargado)
- Investigador responsable (nombres, apellido paterno y apellido materno)
- Fecha de actualización de la información (campo de fecha automático)
- Botón para descargar expediente del compuesto (completo o algunas secciones)
- icono de menú de inicio para otra búsqueda o actualización de información

Visualización 3D

Patrón de difracción



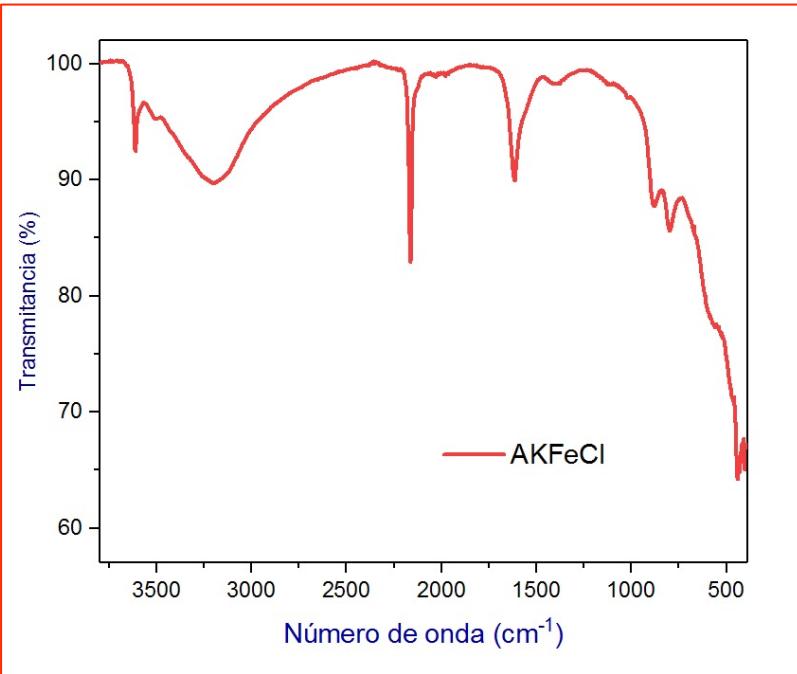
Expediente

✓ ✓

(campo de texto e imágenes en TIF, PNG, JPG)

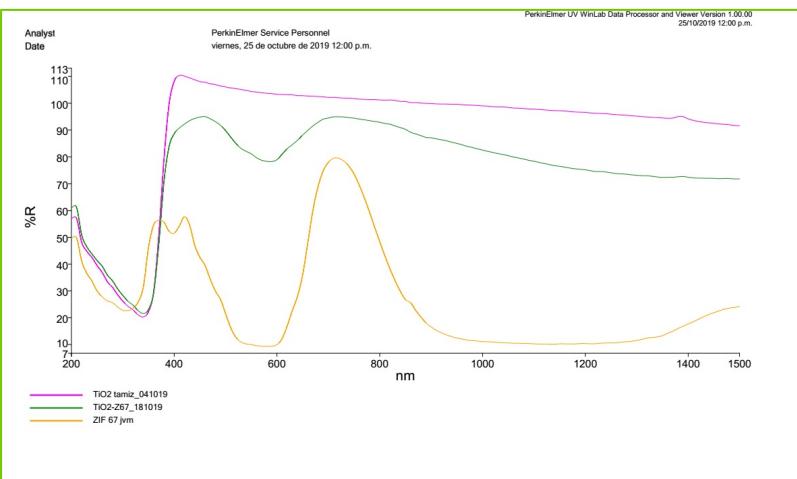
- Pruebas espectroscópicas (UV-vis, IR)
- Pruebas eléctricas
- Pruebas magnéticas
- Pruebas térmicas (TG, Isotermas de absorción)
- Pruebas adicionales (Raman, ADX, fluorescencia)
- Simulaciones y cálculos teóricos (diagrama de bandas, DOS, densidad electrónica)
- Si la sección contiene información se desplegará el título de la sección en verde si no contiene información se desplegará en gris ✓
- Poner hasta 4 gráficas en una pantalla de cada sección con opción a hacer la imagen en pantalla completa y si son más curvas relacionadas a una sección del expediente, dar opción a agregar otra pantalla con el nombre correspondiente de la sección ✓
- Cada gráfica debe tener una caja de texto con el comentario asociado que interprete el significado o las condiciones de medición la caja y el comentario deben ser del mismo color para ubicarlos con facilidad ✓
- En cada pantalla de cada sección se debe ver las pestañas a las otras secciones del expediente ✓
- En cada pantalla de cada sección poner un ícono de menú de inicio para otra búsqueda o actualización de información ✓

Pruebas espectroscópicas



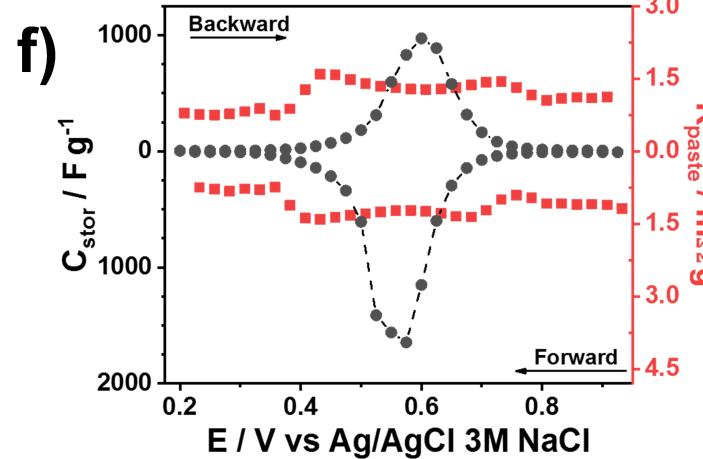
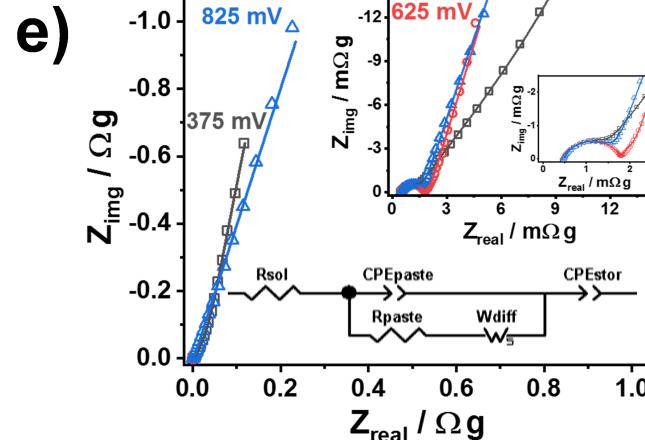
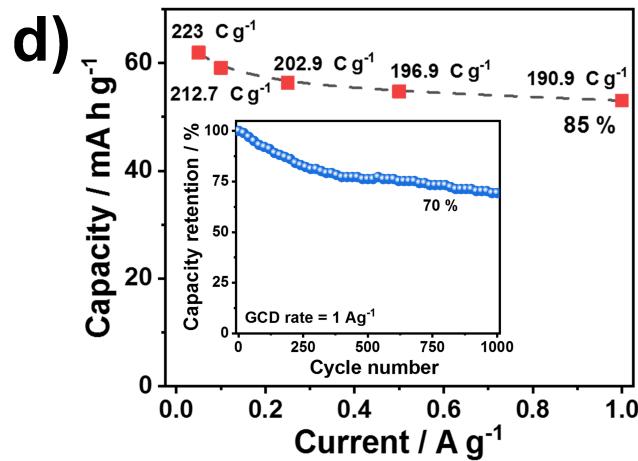
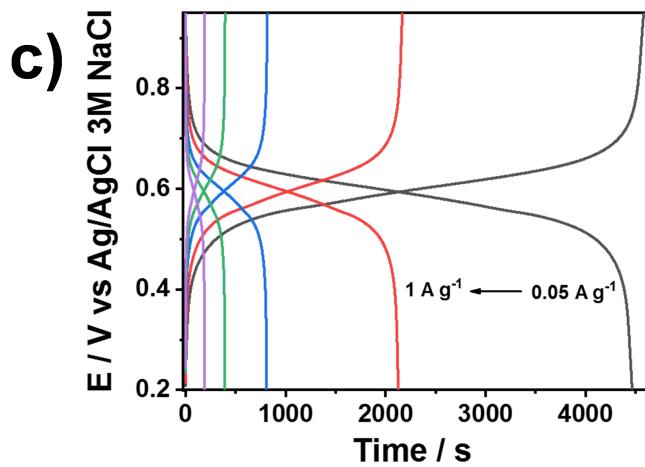
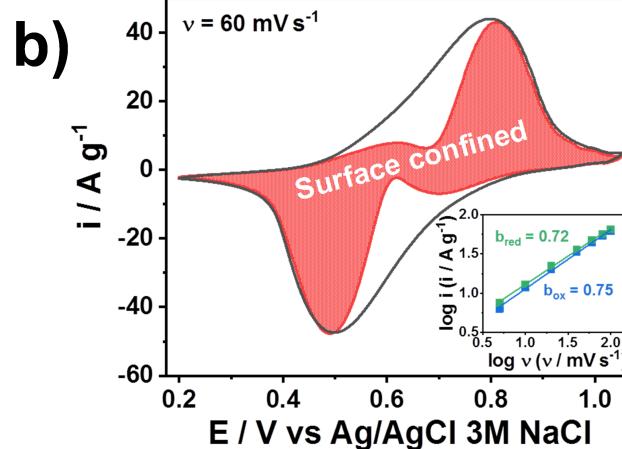
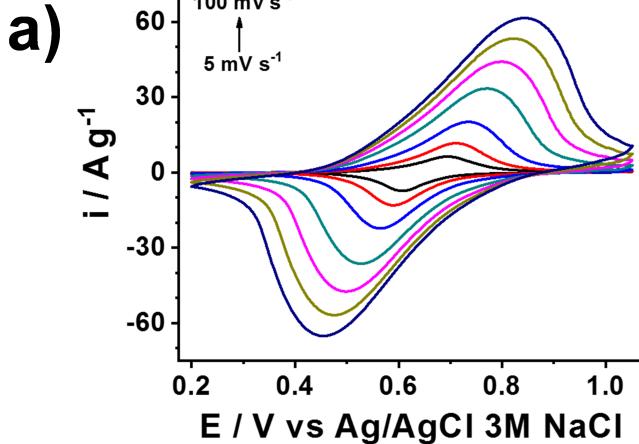
PX1. Esta figura se aprecia

PX2. En esta otra figura se ve el comportamiento...

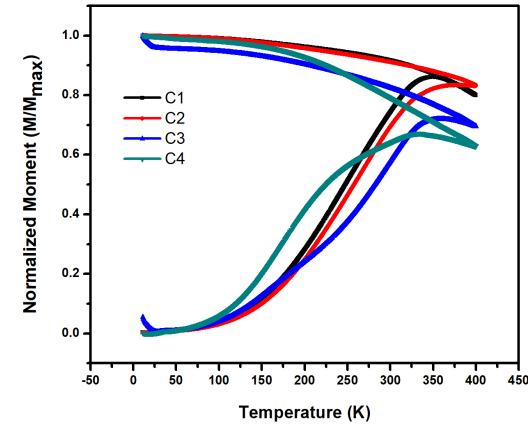
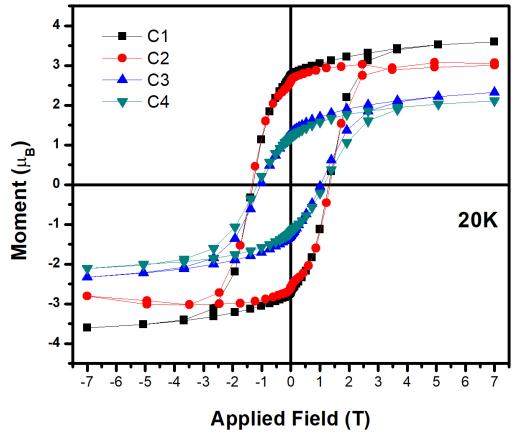
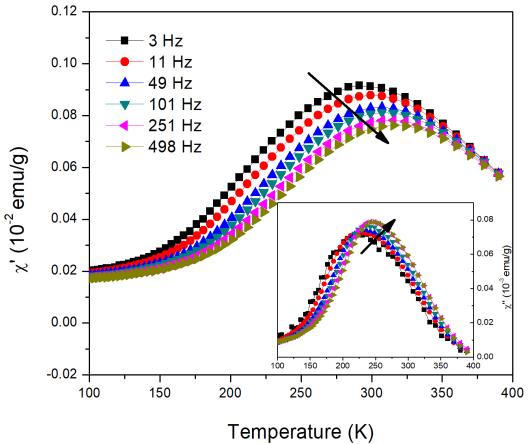
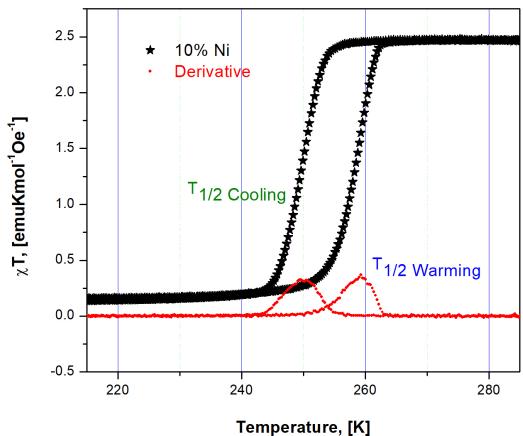


Pruebas eléctricas

No se permiten
6 figuras en una
Pantalla, añadir una
Nueva pantalla a
La sección PE.



Pruebas magnéticas



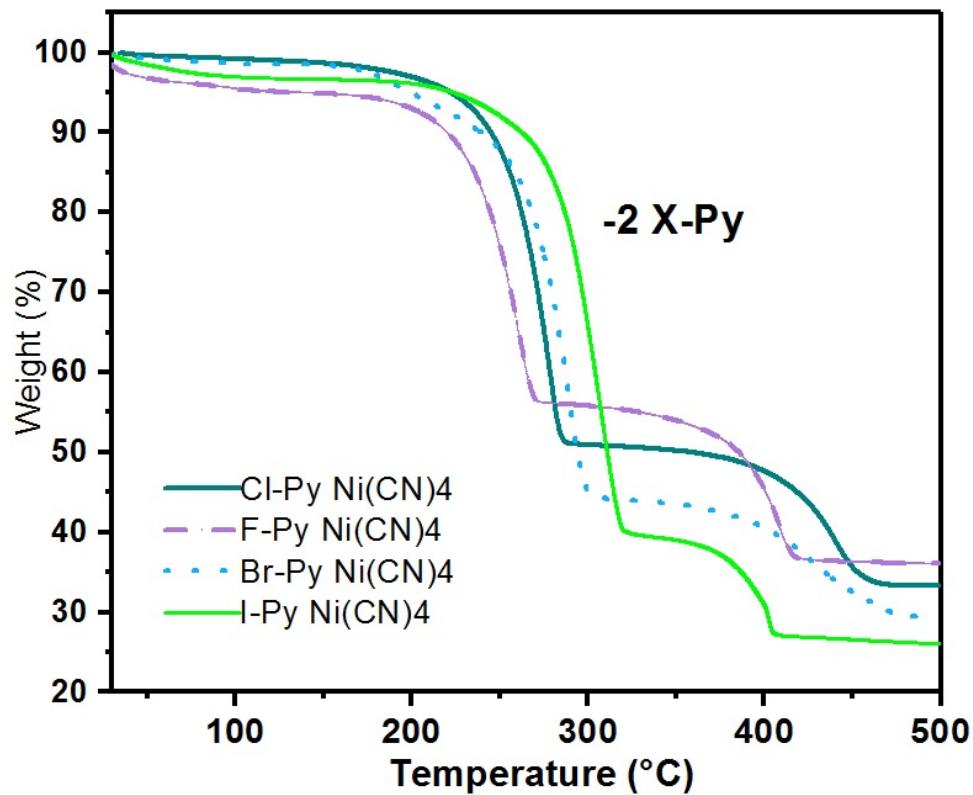
PM1. Esta figura se aprecia

PM2. En esta otra figura se ve el comportamiento...

PM3. Diagrama de histeresis

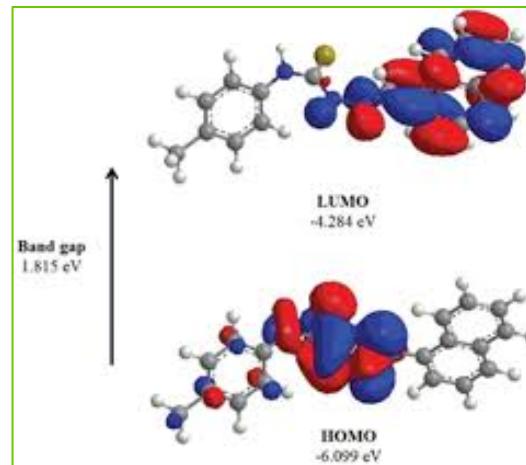
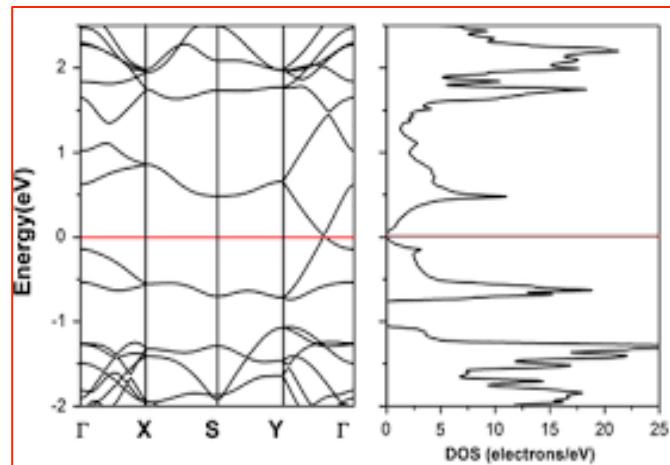
PM4. Curva de densidad

Pruebas térmicas



PT1. Patrón TG de variaciones al compuesto fulano realizado en atmósfera de nitrógeno

Pruebas
adicionales



Simulaciones y
cálculos teóricos

SCT1. Diagrama de banda s

SCT2. HUMO-LUMO

SCT3. Diagrama de densidad

