



**Universidade do Minho**  
Escola de Ciências

## **Desenvolvimento de scripts em python para o projeto berry**

Relatório final

Projeto de investigação em física

Licenciatura em Física

Diogo de Sousa Mascarenhas, a89548

Trabalho efetuado sob a orientação:

**Professor Ricardo Mendes Ribeiro**

Junho 2023

# ÍNDICE

<b>Índice de Figuras .....</b>	<b>3</b>
<b>Introdução .....</b>	<b>4</b>
<b>Conceitos teóricos .....</b>	<b>5</b>
Cristais .....	5
Estrutura do cristal .....	6
Rede de Bravais .....	6
Células Wigner-Seitz .....	7
Zona de Brillouin .....	7
Construção da zona de Brillouin .....	8
<b>Procedimento .....</b>	<b>9</b>
Criação da janela principal .....	9
Criação da barra de ficheiro .....	10
Leitura do ficheiro .....	10
Interpretação do ficheiro .....	11
Desenho da zona de Brillouin .....	12
Pontos da figura .....	15
<b>Conclusão .....</b>	<b>17</b>
<b>Bibliografia .....</b>	<b>18</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 – Cálculo dos vetores do espaço recíproco .....	7
Figura 2 - Janela principal anterior .....	9
Figura 3 - Barra do menu .....	10
Figura 4 - Leitura do ficheiro.....	11
Figura 5 - Zona de Brillouin com vetores com $120^\circ$ entre si .....	14
Figura 6 – Zona de Brillouin com vetores com $90^\circ$ entre si .....	14
Figura 7 - Janela principal .....	15
Figura 8 - Zona de brillouin com vetores com $120^\circ$ entre si com 30 pontos no sentido X e Y com afastamento de 0,05.....	16
Figura 9 - Zona de brillouin com vetores com $90^\circ$ entre si com 30 pontos no sentido X e Y com afastamento de 0,05.....	16

# INTRODUÇÃO

Desenvolver um projeto de investigação em física e conciliar as minhas duas áreas de interesse preferidas, a física e a programação, foram o grande desafio desta licenciatura. A possibilidade de abraçar o projeto “desenvolvimento de scripts em python para o projeto *berry*”, permitiu a concretização desse desafio.

O conjunto de programas *berry*, área de investigação do Professor Ricardo Ribeiro, extrai e ordena os fatores de Bloch a partir dos cálculos de DFT (Density Functional Theory) de maneira que possam ser usados diretamente para realizar cálculos de propriedades dos materiais. Na prática, o *berry* extrai as funções de onda e os seus gradientes no espaço recíproco ordenado por bandas não entrelaçadas, onde a continuidade analítica se aplica.

A partir das ondas de Bloch, o *berry* consegue calcular: conexões, a partir das quais podemos calcular propriedades óticas lineares e não lineares; curvaturas, em que a partir destas podemos calcular a condutividade de Hall, e consegue também calcular a condutividade ótica de segunda geração harmónica do material.

O meu papel neste projeto de investigação baseia-se na compreensão e análise das propriedades de cada elemento, seja químico ou físico, e a tradução das mesmas para a informática, realizando uma interface gráfica (Graphic User Interface, GUI) para os respetivos inputs do programa, para a observação do espaço recíproco de cada elemento e também para a exportação de dados que irão ser usados nos cálculos.

Foi necessária a realização de pesquisa bibliográfica para a compreensão de todos os conceitos teóricos e pesquisa na Internet para aceder às últimas possíveis soluções a utilizar nas áreas da programação.

A linguagem de programação escolhida foi o python, devido à facilidade na escrita do código e à facilidade na acessibilidade a variáveis.

## CONCEITOS TEÓRICOS

A utilização da programação em projetos de investigação em Física tem-se tornado uma ferramenta poderosa. A possibilidade que nos dá de recolher, armazenar e extrair informações, de forma eficiente, de grandes volumes de dados, sejam experimentais ou teóricos, deve ser, obrigatoriamente, considerada. Neste sentido, a criação de uma interface gráfica (GUI) facilita a interação com o programa, a inserção de parâmetros, assim como a visualização de gráficos ou mesmo resultados.

A programação como ferramenta num projeto em física pode ser adaptada às suas especificidades. É possível otimizar os processos em análise e compreender melhor as propriedades físicas ou químicas.

A programação permite, por exemplo, criar algoritmos para representar a estrutura de cristais num sistema computacional, desenvolver programas que gerem visualizações gráficas e facilitem a compreensão da sua estrutura. Permite a construção de redes de Bravais, e zonas de Brillouin, auxiliando a compreensão e análise da estrutura e propriedades dos materiais cristalinos.

Na realização deste projeto tornou-se fundamental a compreensão dos seguintes conceitos teóricos:

### CRISTAIS

Materiais cristalinos, ou cristais, são caracterizados por uma estrutura atômica regular que se repete nas 3 dimensões cartesianas. Esta estrutura consiste num grupo simples de átomos que se repete periodicamente no espaço, e esta repetição é chamada de rede. Esta rede é definida por vários pontos, separados pela mesma distância, sendo estes pontos chamados de pontos da rede.

## ESTRUTURA DO CRISTAL

A estrutura do cristal pode ser composta por um elemento a ser repetido ao longo das três dimensões cartesianas. Este elemento é chamado de célula unitária, e é a fundação de toda a rede. Em três dimensões, a célula unitária forma um sólido geométrico, cujos vértices são pontos de rede. Da mesma maneira, a duas dimensões, a célula forma uma figura geométrica, cujos vértices são pontos da rede. Em geral, devido à possível repetição infinita de células unitárias, para representação da célula é escolhida a de menor dimensão, que reflete a simetria da estrutura.

A estrutura do cristal pode ser descrita combinando os seguintes elementos: tipo de rede, que define a localização dos pontos de rede que formam a célula unitária; parâmetros da rede, que definem o tamanho e forma da célula unitária; padrão da rede, sendo este uma lista de átomos associados a cada ponto da rede, associando-se também as suas coordenadas. Como todos os pontos da rede são, por definição, idênticos, se adicionarmos o padrão da rede a cada ponto, será gerada a estrutura completa.

## REDE DE BRAVAIS

Rede de Bravais, denominada em honra de Auguste Bravais, é um leque infinito de pontos gerados por translações descritas em três dimensões no espaço por esta equação:  $R = n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3$ , onde  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  são quaisquer números inteiros, e  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  são os vetores de translação, vetores estes que definem e expandem a rede. Um aspecto fundamental da rede de Bravais é a permanência da aparência da rede visto a partir de qualquer ponto da rede.

## CÉLULAS WIGNER-SEITZ

Células Wigner-Seitz são células unitárias que são construídas sob aplicação da decomposição de Voronoi a uma rede cristalina. Esta decomposição de Voronoi é uma partição de um plano em regiões perto umas das outras. No caso mais simples, estas divisões são simplesmente pontos num plano, em que cada divisão tem uma região correspondente, chamada célula de Voronoi. Esta célula consiste em todos os pontos que estão mais próximos do próprio plano do que quaisquer outros pontos.

## ZONA DE BRILLOUIN

O termo zona de Brillouin foi introduzido pela primeira vez por Leon Brillouin (1889-1969) no seu trabalho sobre propriedades de estruturas periódicas. Zonas de Brillouin são poliedros no espaço recíproco em materiais cristalinos, e são geometricamente equivalentes a células Wigner-Seitz no espaço real. Fisicamente, as barreiras da zona de Brillouin representam planos de Bragg, que refletem e difratam ondas que contêm vetores de onda específicos que causam interferências construtivas.

Cada estrutura periódica tem duas redes associadas. A primeira é a rede real, rede esta que descreve a estrutura periódica. A segunda é a rede recíproca, e esta determina como é que a estrutura periódica interage com as ondas. Os vetores da rede real “a” podem ser obtidos a partir da equação da rede de Bravais:  $R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ . As expressões para obter os vetores da rede recíproca são as seguintes:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}; \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}; \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

FIGURA 1 - CÁLCULO VETOR ESPAÇO RECÍPROCO

Os vetores base da rede recíproca constroem um espaço vetorial que é normalmente chamado de espaço recíproco, ou em contexto de mecânica quântica, o espaço  $k$ .

## CONSTRUÇÃO DA ZONA DE BRILLOUIN

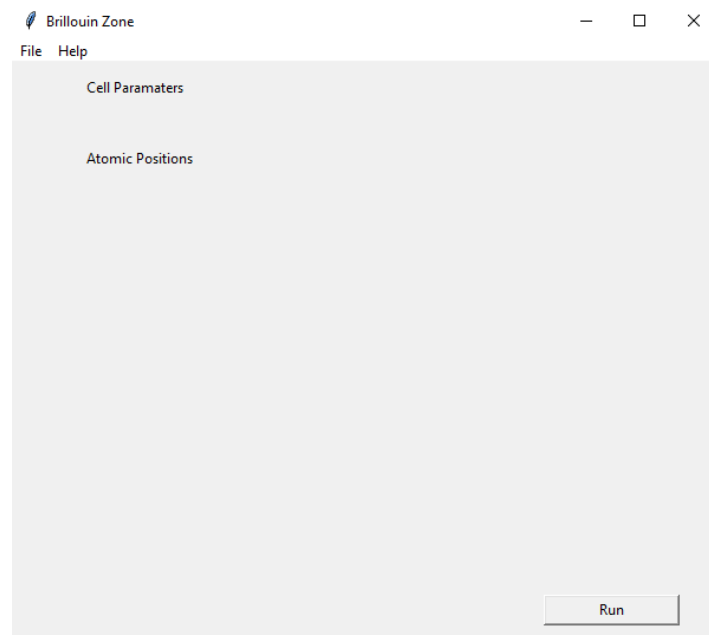
Para construir a zona de Brillouin a duas dimensões, é necessário passar pelos seguintes passos: primeiro, devemos calcular os vetores da rede recíproca a partir dos vetores da rede real. Um dos pontos no espaço recíproco é, em seguida, designado como sendo a origem, apenas para respeitar a simetria da imagem, não havendo especificidade no ponto escolhido. De seguida, deve-se desenhar uma linha a conectar a origem a um ponto dos que estão mais próximos da origem. Esta linha é um vetor da rede recíproca. De seguida, deve-se desenhar uma perpendicular a essa linha, perpendicular que representa um plano de Bragg. Deve-se repetir este processo para os pontos vizinhos restantes. O espaço entre os planos de Bragg que contém a origem é chamada zona de Brillouin, e é equivalente à célula unitária de Wigner Seitz do espaço recíproco. Repetindo o processo para os restantes pontos vizinhos, poderemos criar a segunda zona de Brillouin, e assim sucessivamente.



# PROCEDIMENTO

## CRIAÇÃO DA JANELA PRINCIPAL

O primeiro passo da parte informática deste projeto de investigação começou pela criação da janela principal. Na programação em python, existem várias bibliotecas pré-definidas que nos ajudam a definir e a editar a nossa janela de trabalho principal, sendo a mais simples e também mais usada, a biblioteca “tkinter”, sendo a que preferimos também usar.



**FIGURA 2 - JANELA PRINCIPAL ANTERIOR**

A criação da janela principal não exigiu muito trabalho, sendo rápida de criar e editar, de forma a conseguir mostrar o que queremos. Comecei por definir as dimensões, escrever o texto que quero apresentar de início, como é o caso dos vetores da rede recíproca e as posições atômicas. Criou-se também um botão, que ao ser pressionado lê as informações que são obtidas do programa, de forma a desenhar a zona de Brillouin.

## CRIAÇÃO DA BARRA DE FICHEIRO

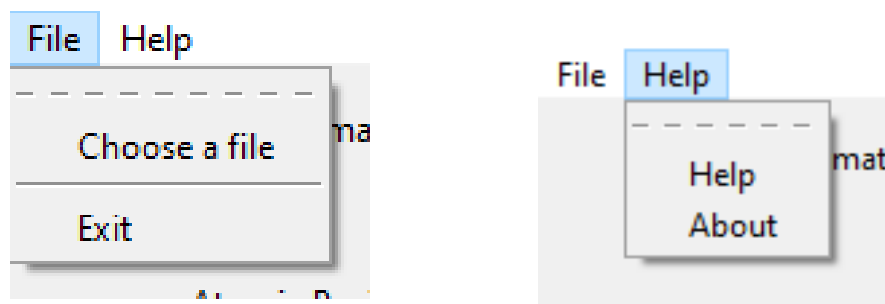


FIGURA 3 - BARRA DO MENU

Na criação de uma aplicação, que se destine a ser usada no futuro, é importante que tenha, para além de onde seleccionar o ficheiro, uma aba onde seja possível obter, por um lado, informações de como trabalhar com o programa, por outro, mais informações sobre o programa, podendo até conter informações sobre o seu autor. Privilegiamos a leitura do ficheiro.

## LEITURA DO FICHEIRO

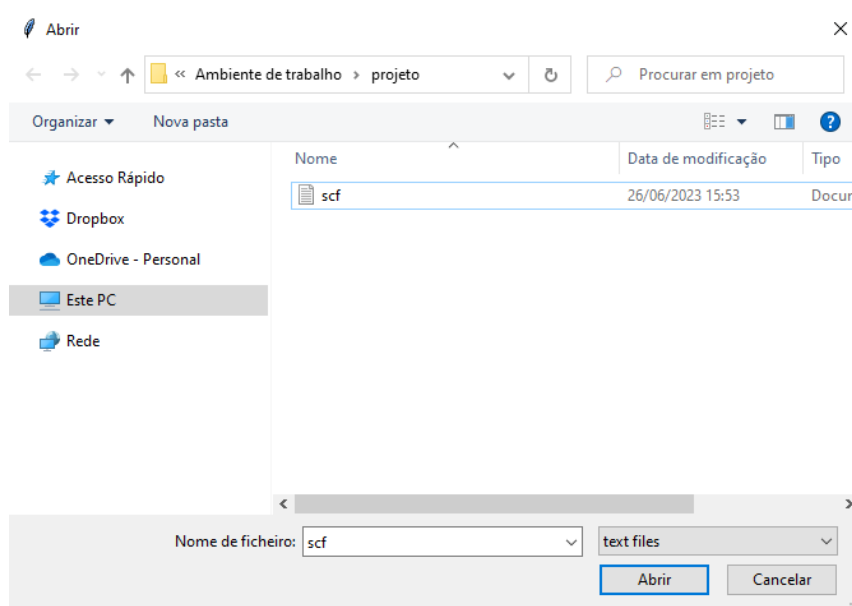
A forma como se devia aceder à leitura do ficheiro foi um dos elementos que mais alterações sofreu ao longo da realização do projeto. Procurou-se sempre melhorar a facilidade de acesso.

De início, devido a diferenças que pudesse haver entre sistemas operativos, foi considerado adicionar uma janela secundária, como no tópico descrito anteriormente, semelhante a esta.

Como fazer o programa ler o ficheiro era simples: introduzia-se o caminho para o ficheiro, por exemplo “C:\Users\Utilizador\Desktop\ficheiro.txt”, aceitávamos o caminho e o programa iria ler as informações do documento.

Mais tarde, sempre com o intuito de facilitar a acessibilidade e a leitura do ficheiro, e após várias pesquisas efetuadas, foi decidido usar uma biblioteca secundária da biblioteca “tkinter”, sendo “tkinter.filedialog”. Desta biblioteca,

podemos usar uma função específica, a “askopenfilename”, que define e aceita os tipos de ficheiros que são escolhidos, e se esse ficheiro existir, o programa corre o ficheiro e interpreta as suas informações.



**FIGURA 4 - LEITURA DO FICHEIRO**

## INTERPRETAÇÃO DO FICHEIRO

Apesar de já haver um código python com uma função definida para interpretar o ficheiro corretamente, este código funcionava sob o sistema operativo, o que levava à existência de erros de leitura do ficheiro. Procedemos à alteração e adaptação deste código, permitindo obter os resultados esperados.

O código, após as devidas alterações, baseia-se no seguinte: inicialmente, ao encontrar o ficheiro, existe uma seleção de palavras-chave, entre elas “cell parameters” e “atomic positions”, que são procuradas no ficheiro. Caso essas palavras-chave existam, o programa vai procurar os respetivos valores apresentados no ficheiro, e devolve para a janela principal.

No caso específico da palavra-chave “cell parameters”, o ficheiro contém, em tabela, os vetores da rede real, sendo cada linha o respetivo vetor. O programa calcula os vetores da rede recíproca, sendo estes os que são apresentados na janela principal.

## DESENHO DA ZONA DE BRILLOUIN

Este ponto de trabalho é o ponto fulcral da parte informática do projeto de investigação, tendo como objetivo o desenho da zona de Brillouin e zonas adjacentes. Para efetuar este ponto de trabalho, foi usada uma ferramenta da biblioteca “tkinter”, o “canvas”.

Começamos por, ao pressionar o botão “run”, abrir uma janela à parte com dimensões específicas, em que toda esta janela funcionaria como uma tela para o desenho da figura.

Depois de definirmos todas as dimensões, verificou-se que a tela não se comportava como um referencial cartesiano, sendo o ponto (0,0) dado no canto superior esquerdo da janela secundária. Então, para contornar isto, a partir das proporções totais da tela do “canvas”, o centro seria a metade de ambas as dimensões de comprimento e largura. De notar que o sentido positivo para o eixo dos xs era da esquerda para a direita e dos ys de cima para baixo.

Como a tela do “canvas” não tem as mesmas dimensões que os vetores da rede, se apresentassem os vetores da rede recíproca com as dimensões originais, não se iriam conseguir distinguir. Portanto, multiplica-se cada componente do vetor da rede recíproca por 50, apenas para as suas dimensões serem maiores e ser visível na tela do “canvas”.

Com estas dimensões, a primeira tarefa realizada foi desenhar os vetores da rede recíproca,  $b_1$  e  $b_2$ . Depois disto, a maneira pensada de como traduzir a zona de Brillouin para o canvas foi: a partir de cada vetor, ou da soma deles para obter os vetores intermédios, determina-se os extremos de cada vetor, para calcular o seu declive. Cria-se exceções, para englobar os casos em que os lados da figura possam ser horizontais ou verticais, no caso de cada declive ser 0 ou infinito. Cria-se uma lista vazia, de forma a podermos adicionar nesta lista todos os declives perpendiculares, como se fossem retas, e outra para os respetivos pontos  $b$ , os pontos quando as retas passam no eixo da origem, segundo a equação  $y=mx+b$ . Caso não sejam os casos excecionais, e haja de facto um declive real, calcula-se o inverso do declive, adiciona-se este à lista de

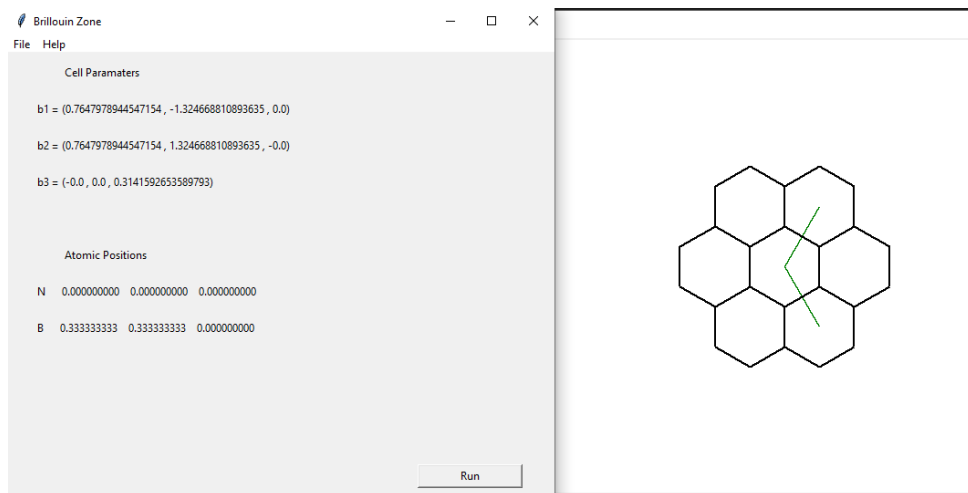
declives perpendiculares e a partir do ponto médio de cada vetor e da equação da reta  $y=mx+b$ , determinamos o ponto  $b$  da reta e adicionamos à lista.

Depois de obtermos todos os declives das retas perpendiculares a cada vetor, e obtermos os pontos  $b$ , devemos encontrar quais as posições em que as retas perpendiculares aos vetores se intersectam. Para isto, começamos por criar novamente uma lista vazia, agora para adicionarmos as coordenadas dos pontos de interseção. De seguida, criamos uma função externa que dado 2 declives e 2 constantes, interpreta como sendo duas retas do tipo  $y=mx+b$  e encontra a interseção das duas.

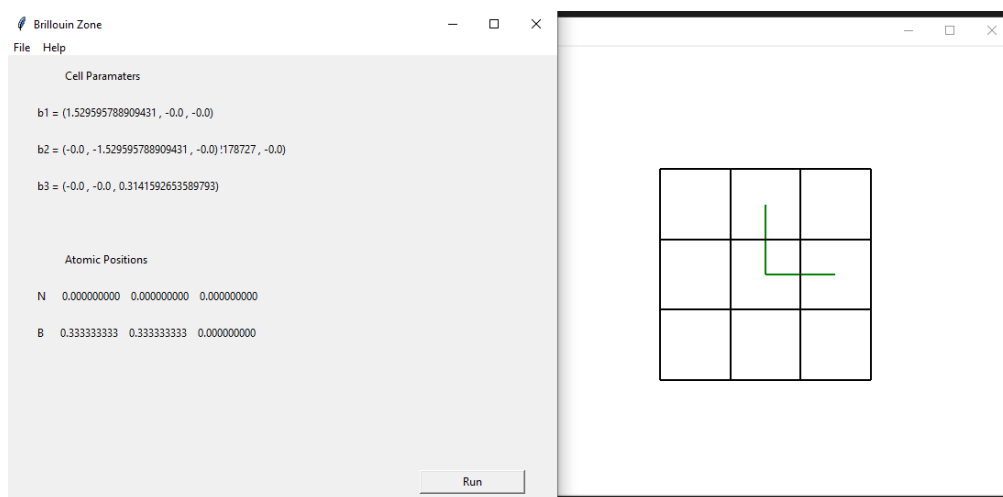
Aqui chegados, constatamos que existem erros quando uma das retas tem declive 0 ou declive infinito. Para ultrapassarmos esta questão criamos exceções que determinam as interseções de uma reta oblíqua com estas retas, calculando a partir da coordenada  $x$  ou  $y$  de cada ponto no declive seguinte da lista.

Uma vez concluída esta fase, obtendo todos os pontos da interseção, criou-se uma função que liga todas as interseções, formando assim a zona de Brillouin. Por fim, criamos as figuras adjacentes, definindo que em cada centro deveria ter uma figura igual à da zona de Brillouin.

Devido à diferença de características dos vetores, foi necessário criar condições para o desenho da zona de Brillouin. Para isso, calcula-se o ângulo entre os vetores: se o ângulo for  $90^\circ$ , a figura desenha-se de maneira mais simples, desenhando a linha perpendicular ao vetor, do centro do vetor perpendicular até ao centro do inverso do mesmo. Depois existe a diferença entre se o ângulo entre os vetores é entre  $0$  a  $90^\circ$  ou entre  $90^\circ$  a  $180^\circ$ . Esta diferença prende-se ao facto das duas ordens distintas de vetores, fazendo com que os lados adjacentes sejam calculados de maneira diferentes.



**FIGURA 5 - ZONA DE BRILLOUIN COM VETORES COM 120° ENTRE SI**

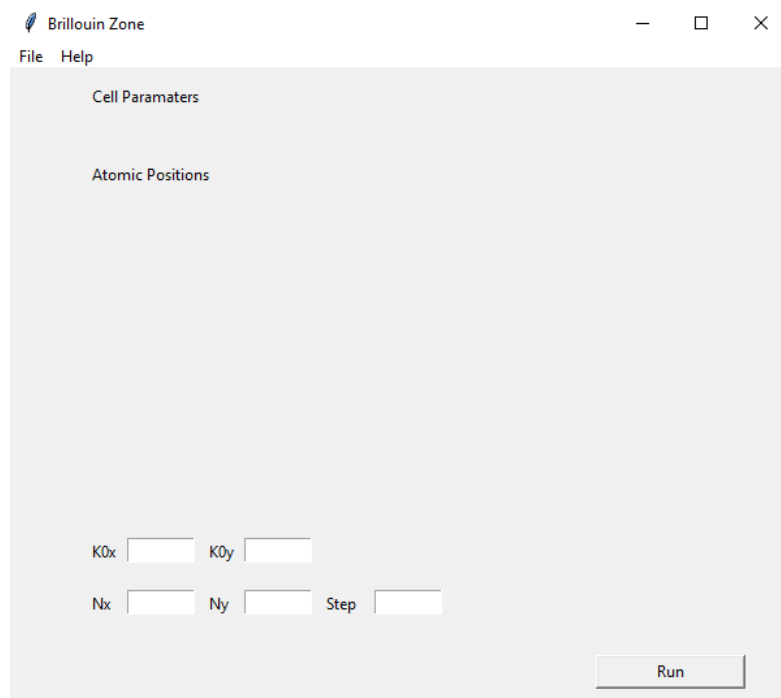


**FIGURA 6 - ZONA DE BRILLOUIN COM VETORES COM 90° ENTRE SI**

No final, para não haver falhas, divide-se cada componente dos vetores da rede recíproca por 50 novamente, para estabelecer o valor inicial dos vetores.

## PONTOS DA FIGURA

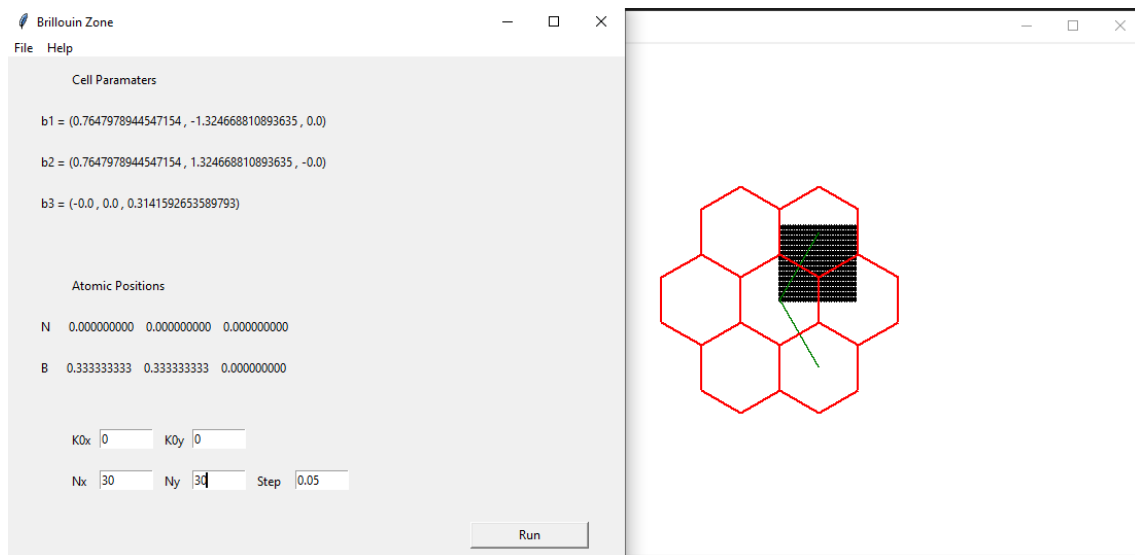
O programa desenvolvido aceita ainda o input de cada utilizador, podendo ser cada pessoa a decidir quantos pontos serão adicionados no desenho da zona de Brillouin. Sendo assim, na janela inicial, foram criadas zonas de texto em que cada utilizador deverá preencher com o ponto inicial desejado, nas caixas referentes ao  $k_0x$  e  $k_0y$ , quantos serão os pontos no eixo horizontal e quantos serão os pontos no eixo vertical, nas caixas correspondentes a  $N_x$  e  $N_y$ , respetivamente, e por fim em quantas unidades estarão separados os pontos entre si.



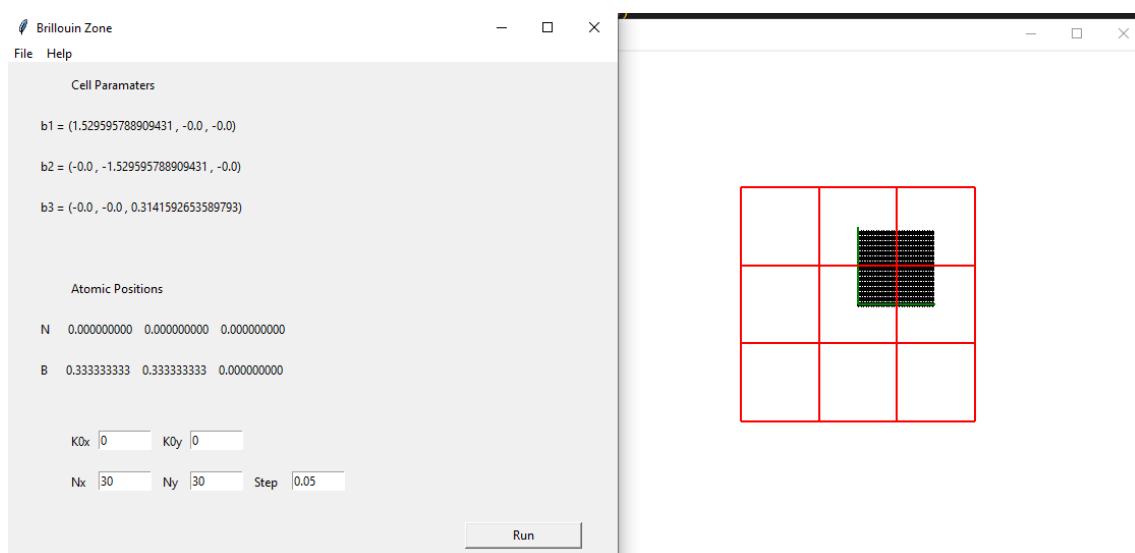
**FIGURA 7 - JANELA PRINCIPAL**

À semelhança do que acontece com os vetores, devido à pequena dimensão do step, devido ao facto de, fisicamente, a zona de Brillouin ser apenas observada na escala nano atómica, deve-se multiplicar por algum número elevado, neste caso 8000, apenas para o desenho ficar ilustrativo do que será na realidade.

Por fim, o programa irá obter qual o número introduzido em cada caixa, para fazer o desenho do número e da distância entre os pontos corretamente.



**FIGURA 8 - ZONA DE BRILLOUIN COM VETORES COM 120° ENTRE SI COM 30 PONTOS NO SENTIDO X E Y COM AFASTAMENTO DE 0,05**



**FIGURA 9 - ZONA DE BRILLOUIN COM VETORES COM 90° ENTRE SI COM 30 PONTOS NO SENTIDO X E Y COM AFASTAMENTO DE 0,05**



## CONCLUSÃO

Ao longo da realização deste projeto foram trabalhados e aplicados os conceitos teóricos apresentados anteriormente. O trabalho informático foi desenvolvido com o objetivo de traduzir as propriedades dos elementos físico-químicos numa interface gráfica, de modo a ser possível observar o espaço recíproco de cada elemento.

Considero que a minha maior dificuldade foi traduzir o desenho da zona de Brillouin para um algoritmo informático, já que se trata de um conceito bastante complexo. Contudo, o desafio foi superado com sucesso, tendo conseguido adaptar o algoritmo a qualquer caso possível.

Parti para este projeto com a expectativa de aprofundar conhecimentos sobre: teorias da física de estado sólido, a inter-relação entre a física e a informática e, paralelamente, possibilitar a expansão do meu conhecimento de física computacional. Após a realização do mesmo considero que todas as minhas expectativas foram excedidas.

Com a realização deste projeto de investigação, não só consegui trabalhar diretamente com um ambiente de informática, como também estar em constante aprendizagem sobre novas teorias físicas e informáticas. Este projeto desenvolveu o meu espírito crítico, a minha forma de pensar e de olhar para problemas e também o meu interesse pela física do estado sólido.

## BIBLIOGRAFIA

- Aytek, J. (abril de 2023). *Medium*. Obtido de <https://medium.com/kodluyoruz/importing-data-in-python-fe337f280df1>
- Brillouin Zones*. (abril de 2023). Obtido de [https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin\\_zones/printall.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/printall.php)
- Campbell, S. (maio de 2023). *Guru99*. Obtido de <https://www.guru99.com/python-regular-expressions-complete-tutorial.html#6>
- Cristalografia*. (abril de 2023). Obtido de <https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallography3/index.php>
- Digita Ocean*. (3 de abril de 2023). Obtido de <https://www.digitalocean.com/community/tutorials/python-remove-spaces-from-string>
- Docs python*. (junho de 2023). Obtido de <https://docs.python.org/3/library/tk.html>
- Docs Python*. (junho de 2023). Obtido de <https://docs.python.org/3/library/tkinter.html#module-tkinter>
- Docs Python*. (abril de 2023). Obtido de <https://docs.python.org/3/library/subprocess.html>
- Flexiple*. (abril de 2023). Obtido de <https://flexiple.com/python/find-index-of-element-in-list-python/>
- GeeksforGeeks*. (fevereiro de 2023). Obtido de <https://www.geeksforgeeks.org/python-gui-tkinter/>
- Kasper, E. (junho de 2023). *ScienceDirect*. Obtido de <https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/brillouin-zone>
- Pynative*. (maio de 2023). Obtido de <https://pynative.com/python-regex-split/>
- Pynative*. (15 de maio de 2023). Obtido de <https://pynative.com/python-regex-metacharacters/>
- PYnative*. (maio de 2023). Obtido de <https://pynative.com/python-search-for-a-string-in-text-files/>
- Python Tutorial*. (março de 2023). Obtido de <https://www.pythontutorial.net/tkinter/tkinter-open-file-dialog/>
- Python Tutorial*. (junho de 2023). Obtido de <https://www.pythontutorial.net/tkinter/tkinter-stringvar/>

RishabhSingh11. (junho de 2023). *GeeksforGeeks*. Obtido de <https://www.geeksforgeeks.org/saving-text-json-and-csv-to-a-file-in-python/>

roshanagarwal883. (março de 2023). *GeeksforGeeks*. Obtido de <https://www.geeksforgeeks.org/python-tkinter-entry-widget/>

roshanpaswan205. (março de 2023). *GeeksforGeeks*. Obtido de <https://www.geeksforgeeks.org/how-to-add-pdf-in-tkinter-gui-python/>

sanjeev2552. (março de 2023). *GeeksforGeeks*. Obtido de <https://www.geeksforgeeks.org/python-binding-function-in-tkinter/>

Sharma, D. P. (março de 2023). *tutorialspoint*. Obtido de <https://www.tutorialspoint.com/how-to-resize-an-entry-box-by-height-in-tkinter>

Sharma, D. P. (abril de 2023). *tutorialspoint*. Obtido de <https://www.tutorialspoint.com/how-to-draw-a-line-on-a-tkinter-canvas>

Simon, S. H. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. United Kingdom: Oxford University Press.

SS64. (maio de 2023). Obtido de <https://ss64.com/nt/findstr.html>

*stackoverflow*. (junho de 2023). Obtido de <https://stackoverflow.com/questions/1478697/for-line-in-openfilename>

*stackoverflow*. (maio de 2023). Obtido de <https://stackoverflow.com/questions/35662844/how-do-i-get-the-entrys-value-in-tkinter>

*stackoverflow*. (abril de 2023). Obtido de <https://stackoverflow.com/questions/50388786/python-ignore-special-characters-and-match-only-text>

*stackoverflow*. (abril de 2023). Obtido de <https://stackoverflow.com/questions/57065080/draw-perpendicular-line-of-fixed-length-at-a-point-of-another-line>

*tutorialspoint*. (fevereiro de 2023). Obtido de [https://www.tutorialspoint.com/python/tk\\_button.htm](https://www.tutorialspoint.com/python/tk_button.htm)

*tutorialspoint*. (abril de 2023). Obtido de <https://www.tutorialspoint.com/how-to-draw-a-line-on-a-tkinter-canvas>

*tutorialspoint*. (abril de 2023). Obtido de [https://www.tutorialspoint.com/python/tk\\_canvas.htm](https://www.tutorialspoint.com/python/tk_canvas.htm)

*TutorialsTeacher*. (fevereiro de 2023). Obtido de <https://www.tutorialsteacher.com/python/create-gui-using-tkinter-python>

*University of Cambridge*. (junho de 2023). Obtido de [https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin\\_zones/printall.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/printall.php)

*University of Cambridge*. (24 de junho de 2023). Obtido de <https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallography3/index.php>

*University of Cambridge*. (24 de junho de 2023). Obtido de <https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallography3/index.php>

*W3docs*. (maio de 2023). Obtido de <https://www.w3docs.com/snippets/python/how-can-i-make-one-python-file-run-another.html>

*Wikipédia*. (10 de maio de 2023). Obtido de [https://en.wikipedia.org/wiki/Brillouin\\_zone](https://en.wikipedia.org/wiki/Brillouin_zone)

*Wikipédia*. (junho de 2023). Obtido de [https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais\\_lattice](https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice)

Zach. (março de 2023). *Statology*. Obtido de <https://www.statology.org/numpy-replace/>