

UNIVERSIDAD DE
GUANAJUATO



LA RED TEMÁTICA DE USUARIOS DE
LUZ SINCROTRÓNLES DA LA MÁS CORDIAL BIENVENIDA A LA



SEDE: HOTEL WYNDHAM GARDEN
LEÓN, GUANAJUATO, MÉXICO
03 AL 06 DE OCTUBRE, 2017

FECHA LIMITE DE INSCRIPCIONES Y ENVÍO DE
RESÚMENES: **30 DE AGOSTO**





PROCEEDINGS

7th Mexican Synchrotron Radiation Users Meeting

**October 3-6, 2017
Leon, Gto, MEX**



ANAELU 2.0, una herramienta para el análisis de textura cristalográfica

Diana C. Burciaga-Valencia^a, Edgar E. Villalobos-Portillo^a, María E. Montero-Cabrera^a, Luis E. Fuentes-Cobas^a
Luis Fuentes-Montero^b

^a Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C., Chihuahua, México.

^b Diamond Light Source, Oxfordshire, UK
Email: luis.fuentes-montero@diamond.ac.uk

Palabras clave: *Difracción, Detectores bidimensionales, textura, propiedades*

Resumen

El análisis de textura de materiales policristalinos, como generalmente lo son las muestras cristalinas naturales, es importante para la interpretación de las propiedades físicas y mecánicas de materiales cristalinos tanto naturales como sintéticos. La estructura atómica, el tamaño, la forma y la distribución de orientaciones de los cristales, o dominio del sólido, controlan las propiedades mensurables por tensores como la conductividad eléctrica, la expansión térmica, la fuerza de compresión, la resistencia a la corrosión, o la elasticidad, entre otras. El análisis de textura mediante métodos de difracción ha avanzado grandemente en los últimos años debido a adelantos instrumentales y computacionales y actualmente es considerada como una herramienta de rutina para el análisis de la orientación cristalina en una amplia variedad de materiales incluyendo materiales naturales, productos industriales y muestras arqueológicas (DUGNANI, 2004). La difracción de rayos X con detección bidimensional es una técnica promisoriosa para el análisis estructural y así lo muestra el reciente crecimiento de su uso. Los datos obtenidos son analizados mediante herramientas

computacionales como el programa ANAELU 2.0 (ANALytical Emulator Laue Utility, version 2.0) para asistir con la interpretación de los patrones bidimensionales de difracción de rayos X de dos dimensiones producidos por muestras con textura como las extraídas de las mundialmente conocida minas de cristales de yeso de Naica, Chihuahua (Luis Fuentes-Montero, 2010). El presente trabajo describe los desarrollos recientes del programa ANAELU, orientados a incrementar significativamente su rapidez y versatilidad.

Originalidad

Los métodos de análisis de textura por difracción unidimensional son difícilmente concluyentes, principalmente debido a una severa superposición de picos y problemas de absorción. Lo anterior aunado a la dificultad que presenta la recolección de muestras naturales que presenten características “iguales” marca la necesidad del uso de técnicas no destructivas y eficientes (DUGNANI, 2004). Por lo anterior, la colección de perfiles completos de difracción se ha convertido en una técnica ampliamente usada para éste tipo de muestras. Hasta el momento, los grupos de investigación a nivel internacional realizan un proceso para el análisis cuantitativo de sus datos, que consiste en el uso de varios programas de computación: 1) programa para visualizar el espectro bidimensional e integrar la distribución de intensidades a lo largo de los anillos de Debye ((i) FIT2D (Hammersley et al., 1996), (ii) BLU-ICE (McPhillips et al., 2002), (iii) XRD2DSCAN (Rodríguez-Navarro, 2006), (iv) BAYINDEX (Pilz et al., 2002), (v) BEARTEX (Wenk et al., 1998) y (vi) MAUD (Ischia et al., 2005)); 2) programa para llevar a cabo un análisis tipo Rietveld (Rietveld, 2014), como son FULLPROF (Rodríguez-Carvajal J. , 1990) de libre acceso y TOPAS (Bruker, 2005) propiedad de la empresa Bruker que necesita licencia



para su uso. El programa ANAELU ofrece en su primera etapa un análisis cualitativo que permite comparar el difractograma bidimensional experimental y un modelo del experimento dando así al usuario la oportunidad de determinar con buena precisión la orientación preferida de los cristales de la muestra. En su segunda etapa puede realizar una modelación del fondo experimental, lo que le permite hacer una modelación más cercana a la realidad y así poner las bases para un análisis cuantitativo tipo Rietveld bidimensional.

Métodos

El programa ANAELU 2.0 incluye: la posibilidad de capturar patrones bidimensionales con los formatos de datos más comunes en los sincrotrones actuales, análisis y visualización de la información digital en difractogramas experimentales, simulación de patrones de difracción, modelación del fondo experimental y comparación semicuantitativa experimento vs modelo. El presente proyecto hace uso sistemático de la programación mezclada entre lenguajes compilados (FORTRAN 95/2003) e interpretados (wxPython) (Figura 1). Además, el programa emplea bibliotecas de libre acceso como son: en Fortran, CrysFML (Rodriguez-Carvajal J. &.-P., 2003) y en wxPython las herramientas Fabio, Matplotlib, entre otras.

Resultados

Se han logrado avances en las capacidades analíticas del programa; en lo que a cálculos se refiere, podemos asegurar gran portabilidad, soporte a largo plazo y aumento en la velocidad de ejecución (de 7 horas a 25 minutos en un ejemplo específico). Además se



cuenta hoy con la habilidad de modelación del fondo experimental que permite una comparación más real y semicuantitativa del modelo y el experimento.

Perspectiva futura

Los avances recientes en el programa nos permite tener una plataforma para desarrollar la capacidad de un análisis cuantitativo tipo Rietveld en dos dimensiones mediante una comparación punto a punto que realice un ajuste por medio de mínimos cuadrados y una variación de ciertas variables con el objetivo de buscar un mejor ajuste entre los datos experimentales y el modelo.

Agradecimientos

El autor (D.B.) agradece a RedTULS por el apoyo otorgado para alojamiento. Los autores agradecen el apoyo brindado por CONACYT mediante el proyecto 257912 “Representación y pronóstico de las propiedades físicas de los materiales mono- y policristalinos”. Los autores agradecen el apoyo brindado por el uso del Stanford Synchrotron Radiation Lightsource, SLAC National Accelerator Laboratory, is supported by the U.S. Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences under Contract No. DE-AC02-76SF00515.

Referencias

Bruker, A. X. (2005). *TOPAS V3: General profile and structure analysis software for powder diffraction data.*

DUGNANI, G. A. (2004). Crystallographic texture analysis: Applications in mineralogy and archaeometry. *Periodico di Mineralogia*, 5-16.

Luis Fuentes-Montero, M. E.-C.-C. (2010). The software package ANAELU for X-ray diffraction. *Journal of Applied Crystallography*, 241-246.

Rietveld, H. M. (2014). The Rietveld method. *Physica Scripta*.

Rodriguez-Carvajal, J. &.-P. (2003). Crystallographic Fortran 90 Modules Library (CrysFML): a simple toolbox for crystallographic computing programs. *Commission on Crystallographic Computing of IUCr, Newsletter*.

Rodriguez-Carvajal, J. (1990). FULLPROF™ program: Rietveld pattern matching analysis of powder patterns. *ILL, Grenoble*.

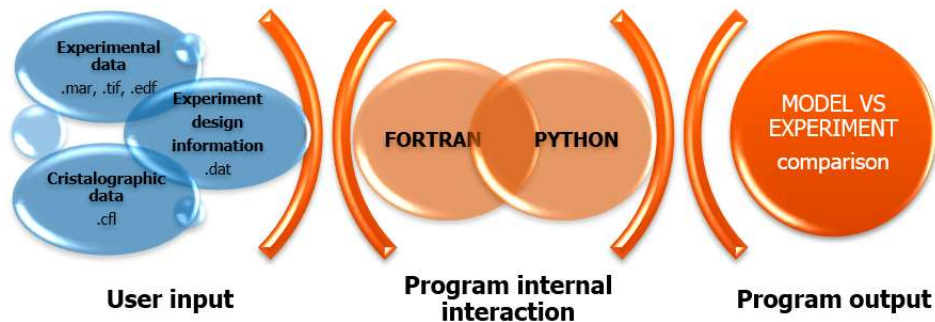


Figura 1.- Proceso de trabajo interno del programa ANAELU 2.0.