

1st National Congress of the Mexican Society of Synchrotron Light & 1st International Congress of Synchrotron Light Techniques



Contribution ID : 36

Type : **Poster**

Sistema de métodos y programas para caracterización de texturas axiales por difracción de luz sincrotrón y electrones

Wednesday, 23 June 2021 14:30 (0:10)

Abstract

Para dar una caracterización cuantitativa de la textura cristalográfica (caso de simetría axial) mediante la difracción de rayos X y electrones, el grupo de cristalografía de CIMAV desarrolló un sistema de métodos y algoritmos. El procedimiento que siguen los algoritmos consiste en dos líneas: Tipo método de Rietveld y tipo método de Bunge. Los inspirados en el método de Rietveld son ANAELU (ANalytical Emulator Laue Utility) y GRAZING. En éstos, se modelan y refinan computacionalmente los patrones DRX partiendo de estructuras cristalinas y figuras inversas de polos (FIP) propuestas por el usuario. DIANNE (Difracción ANalysis of Nanostructures with Electrons), el programa tipo método Bunge, se enfoca en el análisis de textura mediante la difracción de electrones y luz sincrotrón de alta energía. En el método seguido por DIANNE, se toman las figuras directas de polos (FDP) del experimento y se procesan con bases funcionales, obteniendo las figuras inversas de polos.

ANAELU representa una aproximación a un Rietveld bidimensional. Requiere un modelo estructura-textura inicial y conduce, mediante un ajuste entre los difractogramas bidimensionales (DRX-2D) calculado y observado, a una caracterización completa del policristal considerado.

En GRAZING la modelación de textura es sistematizada para obtener los DRX-1D para las geometrías Bragg-Brentano e incidencia rasante. Se aplica el modelo de textura al proponer una figura inversa de polos. Se compara el efecto de la textura en ambas geometrías.

DIANNE consiste en expresar los diferentes descriptores (FDP, FIP) en bases funcionales y relacionar los coeficientes de los desarrollos. La metodología consiste en ir de varias FP (unidimensionales) a la FIP (bidimensional) del eje de simetría de la muestra. DIANNE determina los coeficientes del desarrollo de las FDP en sus representaciones mediante series de polinomios de Legendre. Las FIP se consideran desarrollos en armónicos esféricos simetrizados. DIANNE calcula los coeficientes de la FIP a partir de los de las FP.

About

Primary author(s) : Dr. CAMPOS RODRÍGUEZ, Alejandro (Advanced Materials Research Center, 31136 Chihuahua, Mexico); Dr. FUENTES-MONTERO, Luis (Diamond Light Source Ltd); Dr. FUENTES-COBAS, Luis (Advanced Materials Research Center); Dr. NARVÁEZ MONROY, Juan (Advanced Materials Research Center)

Presenter(s) : Dr. CAMPOS RODRÍGUEZ, Alejandro (Advanced Materials Research Center, 31136 Chihuahua, Mexico)

Session Classification : Poster Session