

## ACTUALIZACIÓN DE SOFTWARE PARA SIMULACIÓN DE IMÁGENES TEM DE DISLOCACIONES

Adriano E. Geraci (1), Adriana M. Condó (1,2).

(1) Centro Atómico Bariloche (CNEA), San Carlos de Bariloche, Argentina. (2) Instituto Balseiro (UNCuyo) y Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), San Carlos de Bariloche, Argentina.  
E-mail: [adriano.geraci@cab.cnea.gov.ar](mailto:adriano.geraci@cab.cnea.gov.ar)

Las dislocaciones son defectos cristalinos lineales que producen un campo de deformación elástico en el material que se encuentra a su alrededor. Esta deformación genera contraste en las imágenes de microscopía electrónica de transmisión (TEM) cuyo análisis permite identificar los defectos. Una técnica de análisis consiste en comparar la imagen experimental, obtenida en condición de dos haces (haz transmitido y haz difractado  $\mathbf{g}$ ), con imágenes simuladas con diferentes parámetros. Del mejor ajuste se obtiene la línea y el vector de Burgers de la dislocación. El método es particularmente útil en materiales elásticamente anisótropos en los cuales el criterio de extinción deja de cumplirse. Para simular las imágenes existe un software escrito en FORTRAN desarrollado por Head *et al.* [1] que incluso considera dislocaciones parciales con fallas de apilamiento. En su versión original, el software consideraba sistemas cristalinos cúbicos e imprimía la imagen utilizando caracteres como píxeles. Luego fue actualizado para graficar la imagen en escala de grises y modificado para incluir sistemas ortorrómbicos [2]. En el presente trabajo, el mismo programa fue escrito en java de modo de poder tener las imágenes en formatos estándar (bmp) y tener acceso al código en un lenguaje más accesible. En su versión actual, el programa en java puede simular imágenes de una o dos dislocaciones paralelas que atraviesan una lámina de espesor constante. La figura 1 muestra los parámetros que el programa necesita para simular la imagen. Entre ellos figuran las constantes elásticas en unidades arbitrarias (u.a.); las distancias medidas en longitudes de extinción ( $\xi_g$ ) como el espesor, la separación entre las dislocaciones y los límites de integración (que determinan el ancho de la imagen); los índices de los vectores que indican la dirección del haz ( $\mathbf{B}$ ), el vector de difracción ( $\mathbf{g}$ ), la normal a la muestra ( $\mathbf{n}$ ), la línea de las dislocaciones ( $\mathbf{u}$ ) y los vectores de Burgers ( $\mathbf{b}$ ) de ambas dislocaciones; los parámetros de red, la absorción anómala ( $a_n$ ) y la desviación de la condición exacta de Bragg ( $w$ ). Se muestran parámetros adicionales como planos y vectores de fallas de apilamiento que se incluirán próximamente. El software original calculaba imágenes de campo claro de 60 x 129 píxeles por cuestiones del método de impresión. Actualmente se pueden simular imágenes de hasta 2048 x 2048 píxeles, lo cual brinda mayor detalle de la simulación, y se incluye además la opción de simular la imagen de campo oscuro. El soft utiliza la aproximación de la columna y resuelve para cada píxel las ecuaciones de Howie-Whelan teniendo en cuenta el campo de desplazamientos originado por la/las dislocaciones. Este campo también lo calcula el soft, despreciando efectos de superficie. Para verificar el correcto funcionamiento del programa, se simuló una imagen de referencia que provee el programa original. Comparando la simulación con la referencia (figura 2) puede observarse que más allá de la diferente resolución las imágenes coinciden. Estas imágenes corresponden a una dislocación en la fase  $\beta$  de Cu-Zn (cúbica) observada en campo claro. Los parámetros correspondientes se muestran en la figura 1:  $\mathbf{b} = [111]$ ,  $\mathbf{u} = [\bar{3}55]$ ,  $\mathbf{g} = \bar{1}21$ ,  $\mathbf{B} = [113]$ ,  $\mathbf{n} = [013]$ , espesor de  $3 \xi_g$ ,  $w = 0.7$  y  $a_n = 0.09$ . La posición de la dislocación, que siempre es horizontal, se indica por píxeles negros a los costados de la imagen. Se está trabajando en la inclusión de la escala en la simulación. En la figura 3 se muestra la diferencia en el contraste de una misma dislocación en campo claro y campo oscuro para un mismo vector de difracción. La comparación de imágenes de campo claro y campo oscuro permite determinar la inclinación de los defectos respecto a la superficie de la muestra. Dada la geometría del encuadre del programa, la dislocación intercepta la superficie inferior (superficie de salida del haz de electrones, B) en su extremo izquierdo e intercepta la superficie superior (T) en el extremo derecho. Por este motivo, el contraste en ambas imágenes es similar en el extremo derecho de la dislocación e invertido en el extremo izquierdo. La dislocación de la figura 3a corresponde a una dislocación de hélice en la fase  $\beta$  de Cu-Zn-Al [3]. Si bien en esa imagen se cumple  $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ , la dislocación es visible debido a que el material es elásticamente anisótropo. Próximamente el programa estará disponible para ser utilizado en trabajos científicos o con fines académicos.

## 4° Congreso de la Asociación Argentina de Microscopía (SAMIC 2016)

## REFERENCIAS

- [1] Head A.K., Humble P., Clarebrough L.M., Morton A.J., Forwood C.T., (1973) "Computed electron micrographs and defect identification" in Defects in crystalline solids, Vol. 17, North-Holland.
- [2] Rodríguez, P.L., Lovey F.C., comunicación privada; Condó A.M., Lovey F.C., (2004) "Measurement of lattice displacements at planar defects in 2H and 18R martensites" *Microsc. Microanal.* 10:236-246.
- [3] Sade M., Uribarri A., Lovey F., (1987) "An electron-microscopy study of dislocation structures in fatigued Cu-Zn-Al shape-memory alloys" *Philosophical Magazine A* 55:445-461.

## AGRADECIMIENTOS

A Francisco C. Lovey por las fructíferas discusiones. A la ANPCyT PICT 2012-0884 y a la U.N. Cuyo por la financiación.

Figura 1. Pantalla de ingreso de datos para la simulación de las imágenes de dislocaciones. Se muestran los parámetros utilizados para obtener la imagen de la figura 2a.

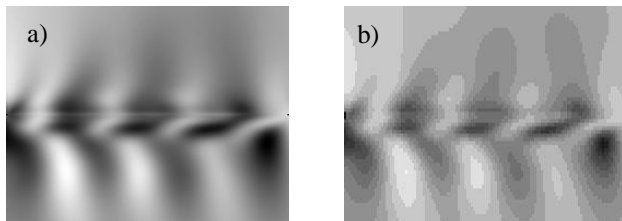


Figura 2. Simulación de la imagen de una dislocación mixta en la fase  $\beta$  (cúbica) de Cu-Zn utilizada como test del programa. La simulación obtenida en el presente trabajo (a) coincide con la simulación obtenida por el programa original (b). El espesor de la muestra es de 3 longitudes de extinción.

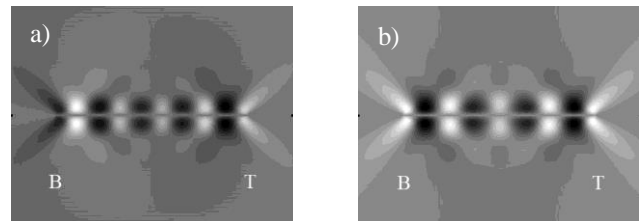


Figura 3. Simulación de la imagen de una dislocación en la fase  $\beta$  de Cu-Zn-Al en campo claro (a) y campo oscuro (b). Parámetros:  $\mathbf{b} = \mathbf{u} = [111]$ ,  $\mathbf{g} = \bar{1}10$ ,  $\mathbf{B} = \mathbf{n} = [001]$ . Se indican los puntos de intersección de la línea del defecto con la superficie superior (T) e inferior (B) de la lámina. El espesor de la muestra es de 4.25 longitudes de extinción.