



## Komputerowe wspomaganie zaawansowanych badań materiałoznawczych

K. Matus<sup>a</sup>, P. Boryło<sup>a</sup>, M. Skrzypczak<sup>a</sup>, A. Śliwa<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Studenci Politechniki Śląskiej, Wydział Mechaniczny Technologiczny,  
email: kaktusmwwr@gmail.com

<sup>b</sup> Politechnika Śląska, Wydział Mechaniczny Technologiczny, Instytut Materiałów  
Inżynierskich i Biomedycznych,  
email: agata.sliwa@polsl.pl

**Streszczenie:** W pracy przedstawiono możliwość wykorzystania wspomagania komputerowego w badaniach materiałoznawczych. Porównano wyniki rzeczywistych badań z wykonanymi symulacjami oraz przedstawiono zalety wykorzystywania komputerowego wspomagania w toku wykonywanych prac badawczych.

**Abstract:** The paper presents possibilities of using computer-aided research in materials science. Simulation results were compared with conducted research followed by presentation of advantages of using computer-aided research.

**Słowa kluczowe:** komputerowe wspomaganie, krystalografia, elektronowy mikroskop transmisyjny, dyfrakcja, Crystal Maker

### 1. WSTĘP

Nieustanny rozwój metod badawczych jest powiązany z rozwojem nauki i techniki, stymulując projektowanie nowych materiałów o coraz lepszych własnościach. Od początku istnienia mikroskopii elektronowej jest ona wykorzystywana do badań materiałów. W przypadku promieni rentgenowskich ich początkowe zastosowanie związane było z medycyną. Jednak prace Braggów pozwoliły na zastosowanie promieniowania rentgenowskiego do celów badania materiałów krystalicznych. Wykonywanie badań na dyfraktometrze rentgenowskim jest dużo prostsze niż w przypadku transmisyjnego mikroskopu elektronowego. Wynika to głównie z dużych trudności w przygotowaniu odpowiednich próbek dla TEM tzw. cienkich folii, oraz konieczności posiadania bardzo drogiego urządzenia pomiarowego jakim jest ten typ mikroskopu [1-4]. Dlatego też wraz z rozwojem mocy obliczeniowej komputerów i ich upowszechnienia, rozwijane było oprogramowanie które umożliwiało symulację wyników pomiarów zarówno na TEM jak i XRD [5-9]. Zastosowanie tego typu oprogramowania umożliwia uzyskanie wyników wzorcowych, które następnie można porównać z tymi uzyskanymi z urządzeń badawczych. Zastosowanie oprogramowania umożliwia również wykonanie szeregu symulacji, na dużej ilości materiałów i na podstawie uzyskanych wyników pozwala na wybranie próbek do badań konwencjonalnych. Umożliwia to często zmniejszenie kosztów wynikających z konieczności przygotowania dużej ilości próbek oraz ich badania [10-12].

## 2. OPROGRAMOWANIE

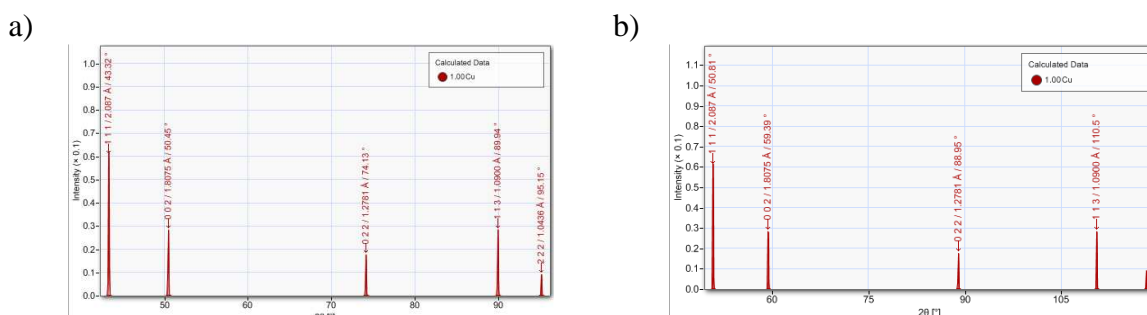
Do symulacji badań materiałoznawczych wykorzystano programy: Crystal Maker, Crystal Diffract oraz Single Crystal, które można pobrać w wersjach demonstracyjnych ze strony [4]. Crystal Maker (CM) jest to oprogramowanie służące do tworzenia komórek elementarnych i sieciowych pożądanych związków czy faz. Program ten jest niezwykle istotny, ponieważ programy Crystal Diffract (CD) oraz Single Crystal (SC) wymagają posiadania gotowych schematów komórek badanych materiałów. Komórki wielu materiałów zostały już opracowane w oprogramowaniu CM lub podobnym i można je pobrać z różnych baz danych np. bezpłatnej Crystallography Open Database. W przypadku braku opracowanego modelu, niezbędne staje się jego własnoręczne zasymulowanie - w tym celu niezbędna jest znajomość parametrów sieci oraz grupy przestrzennej symulowanego materiału. Informacje te są często dostępne w literaturze lub artykułach naukowych, jednak najlepszym źródłem informacji są kartoteki materiałów np. JCPDS. Program Crystal Diffract (CD) umożliwia symulację dyfrakcji promieni rentgenowskich na badanym materiale czyli umożliwia symulowanie wyników XRD, natomiast program Single Crystal (SC) umożliwia symulację dyfrakcji monokryształu w TEM [13-15].

## 3. BADANIA I MATERIAŁY

W pracy porównano wyniki badań uzyskanych na urządzeniach TEM i XRD z wynikami symulacji w programach CD i SC. Wyniki uzyskane w XRD porównano z wynikami z programu Crystal Diffract, jako badane materiały wybrano aluminium, miedź i żelazo. Wyniki dyfrakcji monokryształów z TEM porównano z symulacją w programie Single Crystal, materiał badawczy to monokryształy miedzi, złota oraz platyny [7,8].

### 3.1. Porównanie wyników XRD i symulacji Crystal Diffract

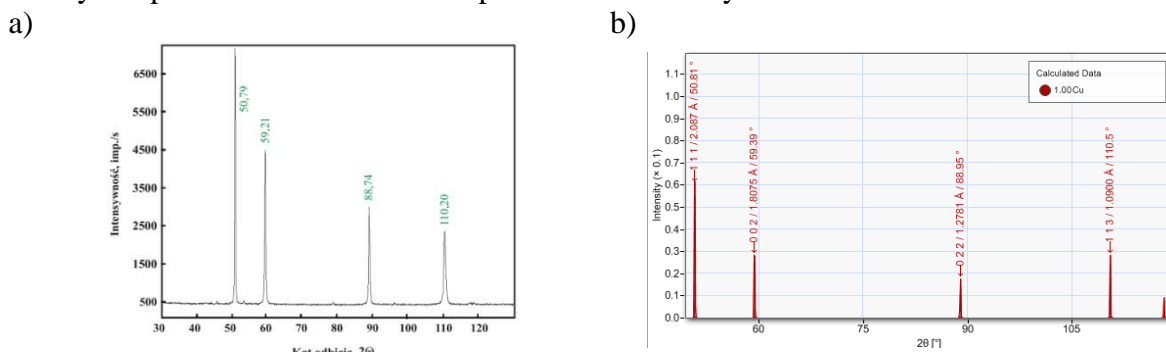
Jednym z najważniejszych parametrów o jakim należy pamiętać w czasie wykonywania symulacji jest konieczność podania długości fali promieniowania wykorzystywanego w badaniu na XRD. Do programu należy podać dokładną długość promieniowania, ponieważ w przypadku zastosowania innej wartości uzyskane refleksy będą przesunięte (rys.1). Co może skutkować wyciągnięciem błędnego wniosku na temat występujących w materiale naprężeń [7,8].



Rysunek 1. Symulacja dyfraktogramu próbki miedzianej a) lampa miedziana b) lampa kobaltowa [badania własne]

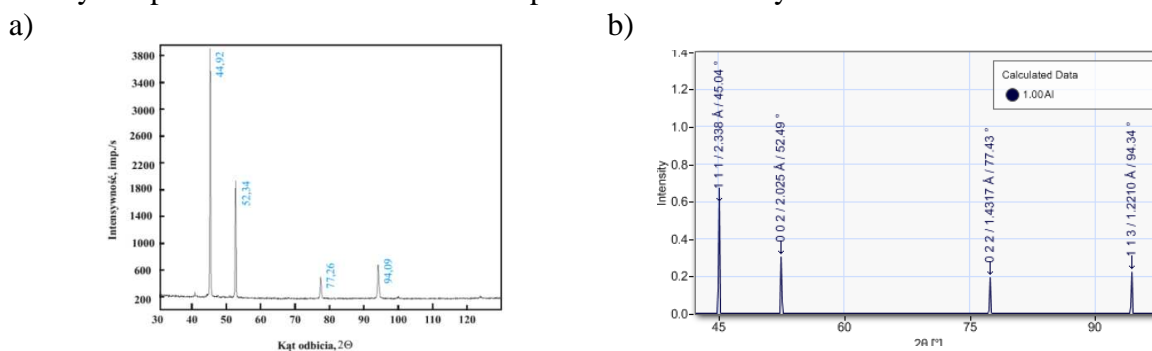
Figure 1. Simulation of diffraction pattern for copper sample a) copper lamp b) cobalt lamp [own research]

Wyniki porównawcze dla miedzi przedstawiono na rysunku 2.



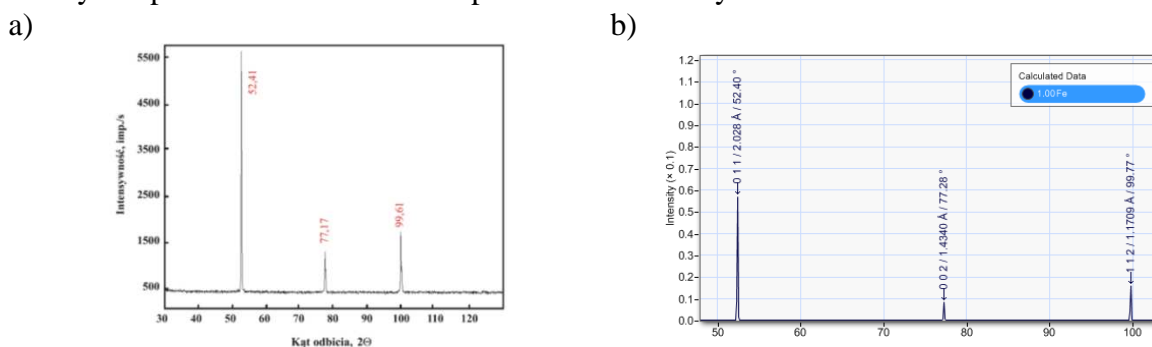
Rysunek 2. Porównanie wyników próbki miedzianej a) wynik badania XRD b) symulacja w programie Crystal Diffract, badania z wykorzystaniem lampy kobaltowej [badania własne] *Figure 2. Results comparison for copper sample a) XRD test result b) simulation in Crystal Diffract, studies using cobalt lamp [own research]*

Wyniki porównawcze dla aluminium przedstawiono na rysunku 3.



Rysunek 3. Porównanie wyników próbki aluminium a) wynik badania XRD b) symulacja w programie Crystal Diffract, badania z wykorzystaniem lampy kobaltowej [badania własne] *Figure 3. Results comparison of the aluminum sample a) XRD test result b) simulation in Crystal Diffract, studies using cobalt lamp [own research]*

Wyniki porównawcze dla żelaza przedstawiono na rysunku 4.

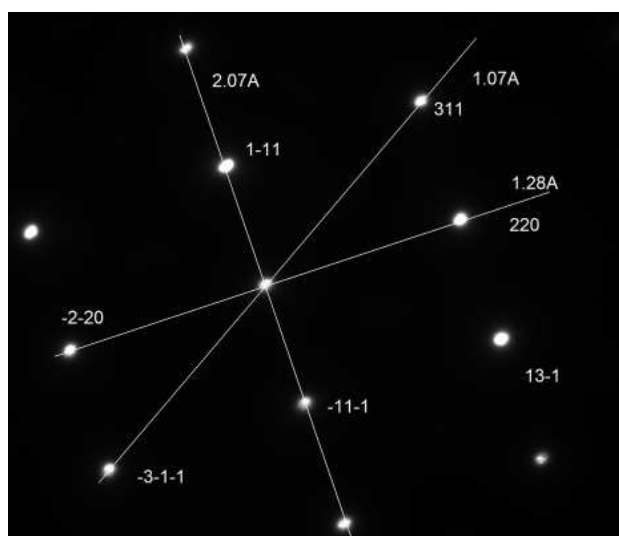


Rysunek 4. Porównanie wyników próbki żelaza a) wynik badania XRD b) symulacja w programie Crystal Diffract, badania z wykorzystaniem lampy kobaltowej [badania własne] *Figure 4. Results comparison for iron sample a) XRD test result b) simulation in Crystal Diffract, studies using cobalt lamp [own research]*

Uzyskane wyniki pomiarów i odpowiadających im symulacji wskazują, że przy wykonywaniu badań dla niekrytycznych próbek można posłużyć się wynikami symulacji komputerowych zamiast rzeczywistymi wynikami.

### 3.2. Porównanie wyników TEM i symulacji Single Crystal

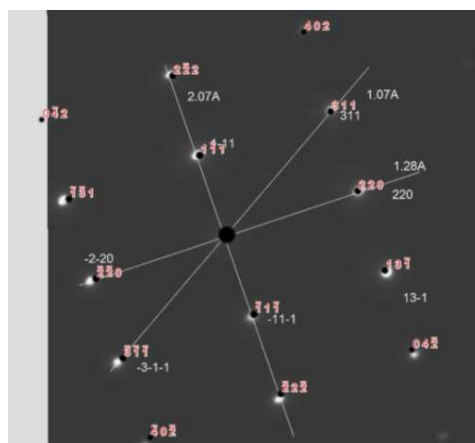
Program Single Crystal umożliwia symulowanie wyników dyfrakcji elektronów i obserwowanie uzyskanego obrazu, z praktycznie dowolnego kierunku krystalograficznego. Umożliwia również potwierdzenie poprawności wyliczonej dyfrakcji z TEM. Poprawnie rozwiązana dyfrakcja elektronowa zawiera przyporządkowanie płaszczyzn krystalograficznych do wiązek ugiętych oraz wskazanie kierunku padania wiązki elektronów na kryształ. Poprawnie rozwiązana dyfrakcja została przedstawiona na rysunku 5 [7,8].



Rysunek 5. Przykład poprawnie rozwiązanej dyfrakcji. Kierunek padania wiązki elektronów to  $[\bar{1}12]$  [badania własne]

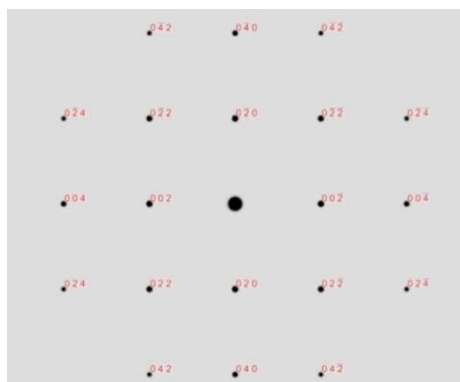
*Figure 5. Example properly solved diffraction. The direction of electron beam is  $[\bar{1}12]$  [own research]*

Nałożenie obrazu (rys. 6) uzyskanego z TEM na obraz wysymulowany z CS, potwierdza ich zgodność. Oprogramowanie opisało refleksy w ten sam sposób co użytkownik TEM dla próbki rzeczywistej. Program CS pozwala ponadto na symulacje dyfrakcji dla różnych orientacji krystalograficznej materiału (rys. 7). Na rysunkach 8-11 przedstawiono rozwiązania zarejestrowanych obrazów dyfrakcyjnych oraz uzyskane wyniki symulacji.



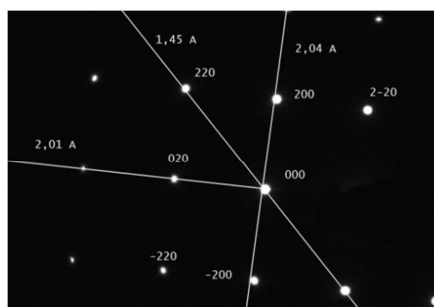
Rysunek 6. Nałożenie obrazu dyfrakcji z TEM i wyniku symulacji z Single Crystal. Próbką miedziana. Kierunek padania wiązki elektronów to [ ] [badania własne]

*Figure 6. Image over lay of TEM diffraction pattern and Single Crystal simulation result for copper sample. The direction of electron beam is [ ] [own research]*



Rysunek 7. Wynik symulacji z Single Crystal. Próbką miedziana. Kierunek padania wiązki elektronów to [100] [badania własne]

*Figure 7. Single Crystal simulation result, copper sample. The direction of electron beam is [100] [own research]*



Rysunek 8. Rozwiązana dyfrakcja monokryształu złota. Kierunek padania wiązki elektronów to [ ] [badania własne]

*Figure 8. Solved diffraction of gold monocystal. The direction of electron beam is [ ] [own research]*



W przypadku oprogramowania Single Crystal, może ono być stosowane zarówno do symulacji dyfrakcji monokryształów praktycznie dowolnego materiału jak i sprawdzenia poprawności rozwiązania dyfrakcji rzeczywistej, które w przypadku bardziej złożonych związków bywają niezwykle skomplikowane. Możliwość łatwej weryfikacji wyników badań pozwala na oszczędność czasu i minimalizuje możliwość błędu w czasie wykonywania badań.

#### 4. PODSUMOWANIE

Dzięki wykorzystaniu symulacji komputerowych można w łatwy sposób zmniejszyć ilość wykonywanych badań. Jak również możliwa staje się weryfikacja poprawności proponowanych rozwiązań oraz możliwość porównania uzyskanych wyników dla próbek rzeczywistych z wynikami dla materiałów teoretycznych. Takie podejście umożliwia wyciągnięcie wniosków na temat naprężeń czy tekstury występujących w materiale. Wykorzystanie programów Crystal Maker, Crystal Diffract oraz Single Crystal w dużym stopniu może ułatwić prace badawcze zaawansowanym użytkownikom TEM i XRD. W przypadku osób niedoświadczonych w obsłudze ww. urządzeń badawczych, oprogramowanie to umożliwi łatwe symulowanie wyników w szerokiej gamie ustawień co znacznie ułatwia zrozumienie ich wpływu na uzyskiwane wyniki.

#### LITERATURA:

1. K. Przybyłowicz, Metody badania tworzyw metalicznych, Kielce: Samodzielna Sekcja Wydawnictwo Politechniki Świętokrzyskiej, 2011.
2. A. Barbacki, Mikroskopia elektronowa, Poznań: Wydawnictwo Politechniki Poznańskiej, 2005.
3. D.B. Williams, C.B. Carter, Transmission electron microscopy: a textbook for materials science, New York [u. a.]: Plenum Press, 2009.
4. A.D. Dobrzańska-Danikiewicz, J. Trzaska, A. Jagiełło, E. Jonda, K. Labisz, Neural networks aided future events scenarios presented on the example of laser surface treatment, Archives of Materials Science and Engineering 51/2 (2011) 69-96.
5. A. Śliwa, L.A. Dobrzański, W. Kwaśny, W. Sitek, The computer simulation of internal stresses on the PVD coatings, Archives of Computational Materials Science and Surface Engineering 1/3 (2009) 183-188.
6. K. Labisz, Microstructure and mechanical properties of HPDL laser treated cast aluminium alloys, Materials Science and Engineering Technology 2013.
7. K. Labisz, T. Tański, L.A. Dobrzański, D. Janicki, K. Korcina, HPDL laser alloying of
8. Al-Si-Cu alloy with Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> powder, Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering, 63/1 (2013) 36-45.
9. M. Krupińska, Z. Rdzawski, K. Labisz, Crystallisation kinetics of the Zn-Al alloys modified with lanthanum and cerium, Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering, 46/2, (2011), pp.154-160.
10. M. Pawlyta, Transmission electron microscope studies on carbon nanostructured materials, Materials Science and Engineering 63/2 (2013): 58-67.
11. K. Labisz, Z. Rdzawski, M. Pawlyta, Microstructure evaluation of long-term aged binary Ag-Cu alloy, Archives of Materials Science, 49/1, (2011), 15-24.

12. M. Krupiński, K. Labisz, Z. Rdzawski, M. Pawlyta, Cooling rate and chemical composition influence on structure of Al-Si-Cu alloys. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, 45/1, (2011) 13-22.
13. Z. Bojarski, *Krystalografia*. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN, 2007.
14. [www.crystalmaker.com](http://www.crystalmaker.com).
15. <http://www.crystallography.net/>.