

Determinación del espesor de aleaciones metálicas

Pablo Argañaras^{1,2}, Matías Farías^{1,2}, Miguel Mariguin³, and Renzo Iturra⁴

¹ CNEA, Centro Atómico Bariloche, Mecánica Computacional,
Av. Bustillo 9500, (8400) Bariloche, Río Negro, Argentina

{banda, fariasm}@cab.cnea.gov.ar
<http://www.cab.cnea.gov.ar/index.php>

² Universidad Fasta, Av. De los Pioneros 38,
(8400) Bariloche, Río Negro, Argentina

³ CNEA, Centro Atómico Bariloche, Gerencia de Área de Energía Nuclear,
Av. Bustillo 9500, (8400) Bariloche, Río Negro, Argentina
mariguin@cab.cnea.gov.ar

⁴ Invap SE, Av. Cmte. Luis Piedrabuena 4950,
(R8403CPV) Bariloche, Río Negro, Argentina

riturra@invap.com.ar

Abstract. La microscopía electrónica de transmisión (TEM) es una técnica a través de la cual se pueden obtener imágenes con gran aumento y figuras de difracción de un material cristalino utilizando un haz de electrones. El TEM permite visualizar y cuantificar la densidad de defectos en un material cristalino proporcionando información relevante para el estudio de propiedades de materiales. Las muestras preparadas para observar con esta técnica tienen variaciones de espesor local, por lo tanto, para la determinación de la densidad de defectos se debe encontrar el espesor local. Un método utilizado consiste en la comparación en forma visual, de una imagen experimental con imágenes simuladas para diferentes valores de espesor, dificultando la clasificación y selección. Por ello, se propone la automatización de la comparación de imágenes y el desarrollo de algoritmos de comparación de imágenes, que cuantifique el acuerdo entre imágenes, para acelerar y refinar la precisión del método de selección, ofreciendo una recomendación de un grupo reducido de imágenes seleccionables en pocos segundos.

Keywords: Algoritmos de comparación de imágenes, reconocimiento de imágenes, correlación cruzada, métodos estadísticos.

1 Introducción

La microscopía electrónica de transmisión (TEM, por su sigla en inglés) es una técnica a través de la cual se pueden obtener imágenes con gran aumento y figuras de difracción de un material cristalino utilizando un haz de electrones. El microscopio, como se puede apreciar en el esquema de la figura 1, consiste en una columna en cuyo extremo superior se halla un cañón de electrones, seguido de un primer juego de lentes (magnéticas, porque trabaja con electrones y no con luz) que concentran el haz sobre la muestra.

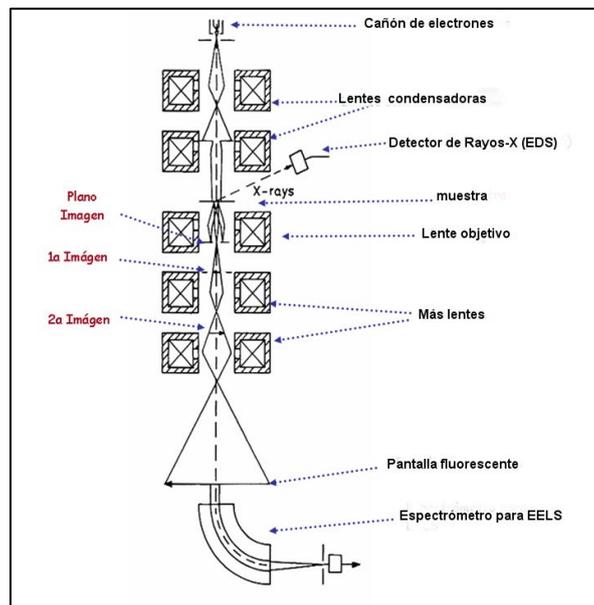


Fig. 1. – Esquema de un Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM)

Los electrones transmitidos y difractados por la muestra forman un figura de difracción en el plano focal de la lente objetivo y una imagen magnificada en el plano imagen de la misma. Otras lentes posteriores magnifican estas imágenes y las proyectan sobre la pantalla fluorescente. La ventaja principal de la microscopía de transmisión es que permite obtener imágenes con una resolución del orden de 0,2 nm, y brindar información cristalográfica y micro analítica de regiones muy pequeñas, del orden de los 10 nm. Una desventaja es la dificultad que significa tener una muestra lo suficientemente delgada para ser atravesada por el haz de electrones.

2 Figuras de difracción

En las figuras de difracción tradicionales, los haces de electrones inciden paralelos sobre la muestra y se difractan formando un patrón como el de la figura 2. De este modo, los haces que forman el patrón fueron difractados en una región de la muestra cuyo ancho está aproximadamente entre 1 y 10 mm.

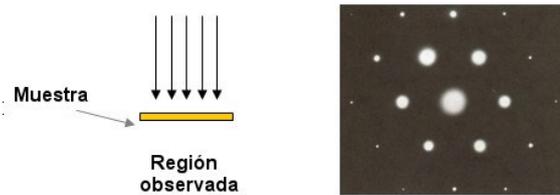


Fig. 2. – Figura de difracción de haz paralelo

Por otra parte, las figuras de difracción de haz convergente son el resultado de producir la difracción con haces que llegan a la muestra en distintos ángulos, es decir, con una mayor convergencia. Es por esto que los patrones presentan discos en lugar de puntos (figura 3) otorgando la ventaja de mostrar una región muy pequeña de la muestra (entre 10 y 100 Nm) que permite, por ejemplo, hacer micro difracción sobre algún defecto. Además, las franjas que aparecen dentro de los discos otorgan información adicional sobre la estructura y el espesor. Este patrón está tomado en “condición de eje de zona”, aplicable solo para muestras cristalinas.

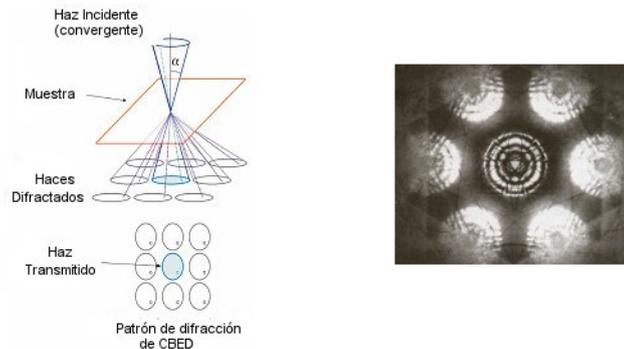


Fig. 3. – Formación de figuras de difracción de haz convergente

Otra condición de interés para diversas técnicas utilizadas en microscopía de transmisión es la “condición de dos haces”, en la cual hay solamente una familia de planos cristalinos en condición de difracción (Figura 4).

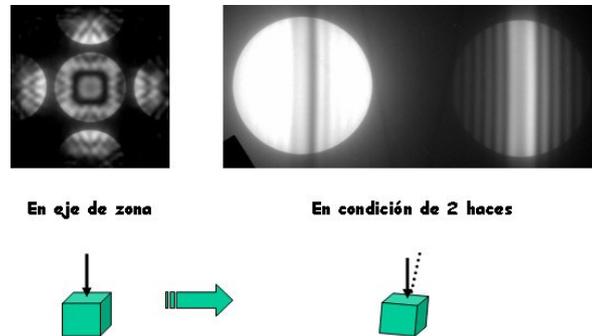


Fig. 4. Patrones de CBED en condición de eje de zona (izq.) y de 2 haces (der.)

3 Métodos de Determinación del Espesor

Los métodos utilizados para la determinación del espesor de un compuesto metálico son:

3.1 Método de Kelly: permite determinar el espesor de una muestra haciendo uso de la teoría dinámica en condición de dos haces.

$$s_i = \left(\frac{x_i}{x_D} \right) \left(\frac{\lambda}{d^2} \right)$$

Donde:

λ es la longitud de onda de los electrones incidentes.

d es la distancia interplanar en la dirección cristalográfica.

x_i son las distancias entre planos.

x_D es la distancia desde el borde del haz transmitido hasta el borde del haz difractado.

s_i se relacionan con el espesor (t).

Es un método confiable, altamente aceptado y utilizado, pero es un método que insu-me mucho tiempo de cálculo, además, para espesores muy delgados, deja de ser pre-ciso.

3.2 Método Nuevo (“zone axis CBED”):

Es el propuesto por J.M Zuo and Y. F. Shi [1] e implementado en aleaciones de alu-minio por M. V. Castro Riglos y A. Tolley [2] en el Centro Atómico Bariloche (CAB). En este, el espesor se determina verificando la coincidencia entre el figura de difracción de haz convergente en eje de zona (CBED en eje de zona), obtenido expe-rientalmente, con aquellos obtenidos mediante simulaciones. Este método puede ser implementado en la mayor parte de los microscopios de transmisión y es aplicable dentro de un amplio rango de espesores de la muestra. Las simulaciones realizadas en el CAB de los patrones de CBED en eje de zona se llevan a cabo utilizando el pro-grama cb3 del paquete de software EMS [3] en una unidad de trabajo Silicon

Graphics. El programa está basado en el formalismo de ondas de Bloch que utiliza los factores de scattering de electrones obtenidos por Doyle y Turner [4].

4 Métodos de Comparación de Imágenes

4.1 Fuerza Bruta

Este método realiza una comparación pixel a pixel entre la imagen tomada por el microscopio y las imágenes simuladas. Exige que las imágenes tengan la misma dimensión. El resultado de aplicar este método es el valor de “distancia” entre imágenes donde los valores más cercanos a cero podrían indicar cierta similitud entre imágenes. Para ello se crea una matriz de error que consta de las diferencias entre las dos imágenes a comparar. Finalmente se calcula una norma matricial de la matriz de error. La función para realizar la comparación es la siguiente:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{\sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2}{\sqrt{\sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2}} & \text{si } \sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2 \neq 0 \\ 0 & \text{si } \sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2 = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Donde:

$f(x)$ función comparación.

x valor del pixel en la imagen simulada.

ε diferencia entre el pixel de la imagen simulada y la imagen de microscopio.

n es la dimensión de la imagen.

4.2 Correlación Cruzada

Es un método que se basa en la comparación de los histogramas de dos imágenes que se desean comparar.

$$f(d) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu_x)(y_{(i-d)} - \mu_y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu_x)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_{(i-d)} - \mu_y)^2}} \quad (2)$$

Donde:

$f(d)$ función correlación cruzada.

x_i histograma de imagen simulada.

y_i histograma de imagen del microscopio.

μ media de cada imagen.

d retraso.

n cantidad de colores que se pueden encontrar en la imagen.

4.3 Método de Filtrado Estadístico

El siguiente método es el propuesto para realizar la comparación entre las imágenes simuladas y la obtenida por el microscopio.

El método utiliza dos filtros para realizar la comparación, en el primer filtro se comparan los histogramas de las imágenes simuladas con el histograma de la tomada por

el microscopio y de esta forma, se logra una separación rápida de imágenes que no tiene un grado de similitud totalmente aceptable. Dicho proceso se realiza mediante la implementación de la siguiente ecuación:

$$f(x) = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}}{n} \quad (3)$$

Donde:

$f(x)$ función de primer filtro

x_i histograma de imagen simulada

y_i histograma de imagen del microscopio

n cantidad de colores que se pueden encontrar en la imagen.

En el segundo filtro se obtiene la varianza de cada una de las imágenes que pasaron favorablemente el primer filtro, y se toman las más cercanas a la varianza de la imagen del microscopio.

5 Implementación

Se aplicó la metodología de desarrollo Iterativa y la solución propuesta contempla la comunicación entre los módulos Riamet_gui.exe, Riamet_lib.py y la Biblioteca de imágenes (Figura 5). La interfaz gráfica desarrollada usando QT Creator, permite configurar los métodos y visualizar los resultados, mientras que la biblioteca desarrollada en Python, permite ejecutar los métodos de comparación y almacenar los resultados.

El software RIAMET (Reconocedor de Imágenes Aplicado a Microscopía Electrónica de Transmisión) consta de una interfaz de usuario con componentes que permiten mostrar: la imagen original, el directorio de imágenes simuladas, el histograma de la imagen original, el histograma de la imagen simulada seleccionada, los resultados de las comparaciones, las imágenes con mayor verosimilitud luego de aplicado un método de comparación.

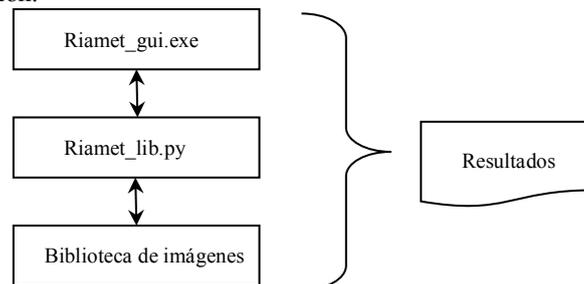


Fig. 5. Modelo lógico de la solución propuesta

El software deberá reconocer los formatos de imagen TIF, GIF, JPG, PNG, BMP 16, BMP 24 y BMP 256. El sistema operativo seleccionado para la ejecución es Windows

XP y el hardware mínimo requerido es CPU Core 2 Duo, 2 Gb de RAM, y 50 Gb de disco duro.

6 Resultados

Los tiempos de ejecución al aplicar cada uno de los métodos de comparación de imágenes, se midieron en base a una imagen de 972x959 píxeles obtenida con el microscopio y a un conjunto de 48 imágenes simuladas de 401x397 píxeles provistas por los investigadores de la división Metales. Y la ejecución de la aplicación se hizo sobre un sistema informático con SO Windows 7 con 2 GB de RAM y procesador Core i7.

Los resultados muestran que el Método de Filtrado Estadístico (MFE) propuesto, obtiene el resultado correcto en el menor tiempo medido en segundos, en comparación con los tiempos de los métodos de fuerza bruta y de correlación cruzada (Fig 6). Una vista de la interfaz de usuario y de sus componentes se muestra en la Figura 7.

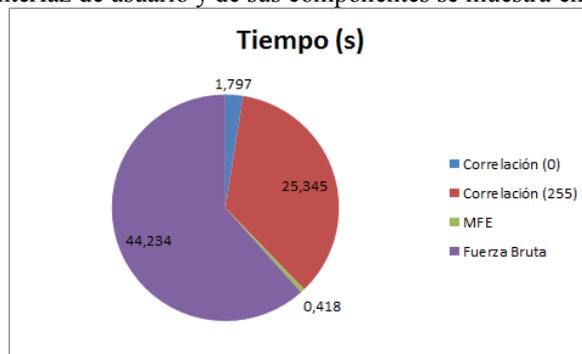


Fig. 6. Tiempos de Ejecución de los Métodos de Comparación de Imágenes

7 Conclusiones

El método de filtrado estadístico (MFE) para comparación de imágenes propuesto por los autores, satisfizo a los investigadores que implementaron el Método Nuevo en aleaciones metálicas, al reducir el tiempo de comparación y recomendación de imágenes simuladas que mejor acuerdan con la imagen obtenida por la aleación real en el microscopio óptico de transmisión. La aplicación de software que se desarrolló está disponible para su uso en la División Física de Metales del Centro Atómico Bariloche. Como líneas de trabajo futuras están contempladas: la implementación de una solución basada en técnicas de IA para reconocimiento de patrones con el fin de comparar su eficiencia contra el método MFE; y la implementación del módulo del MFE desarrollado en Pycuda (Cuda Python) para ejecutar aprovechando la potencia de

procesamiento de las GPU, de modo que permita comparar grandes volúmenes de imágenes.

8 Referencias

- [1] J. M. Zuo, Y.F. Shi, Microsc. Microanal. 7 (Suppl. 2) (2001) 224-225.
- [2] P. M. Kelly, A. Jostsons, R. G. Blake, J. G. Napier, Phys. Stat. Solidi (a) 31 (1975) 771-780.
- [3] P. A. Stadelmann, Ultramicroscopy 21 (1987) 131-146.
A. Doyle, P. S. Turner, Acta Cryst. A24 (1968) 390-397.
- [4] M.V. Castro Riglos, A. Tolley, Applied Surface Science, Volume 254, Issue 1, 31 October 2007, pp 420-424.
- [5] M.F. Zanuy, Tratamiento Digital de Voz e Imagen y Aplicación a la Multimedia. Ed. Alfaomega Grupo Editor, S.A. de C.V., México (2001).
- [6] R.H. Shumway, D.S. Stoffer, Time Series Analysis and Its Applications With R Examples. ISBN: 978-1-4419-7864-6 (Print) 978-1-4419-7865-3 (Online) Springer New York (2011).

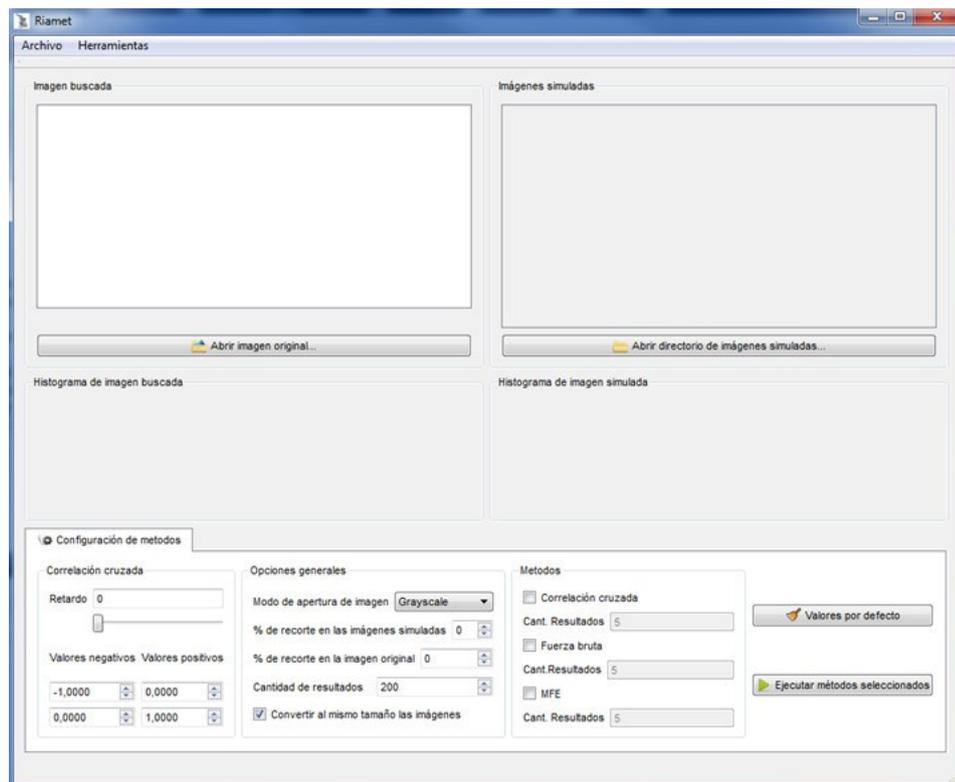


Fig. 7. Interfaz de Usuario