



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Elaboración: Instrumento de Cálculo
de Propiedades Cristalográficas de
Fronteras de Grano**

TESIS

Que para obtener el título de
Ingeniero en Computación

P R E S E N T A

Adrián Correa Ortíz

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Luis David F. Romeu Casajuana



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

En estas líneas expreso mi más sincero agradecimiento a todos aquellos familiares y amigos, que me han apoyado en ésta travesía que fue estudiar la Licenciatura en Ingeniería en Computación, en especial a mi tutor y amigo el Dr. Luis David Fernando Romeu Casajuana, que con su paciencia, entusiasmo y dedicación me ayudo a concluir ésta etapa de mi vida. Le doy gracias por orientarme de manera personal y académica, asegurándose siempre de que tomara el camino correcto.

Quiero dar las gracias a mi amigo el M. en C. Pedro Perdigón Lagunes, por siempre estar ahí asegurando que pueda tomar las mejores decisiones, guiarme y ayudarme a encontrar soluciones desde otros puntos de vista y nunca dejar que me rinda.

Agradezco al Dr. Raúl Herrera Becerra y su equipo de estudiantes, por su paciencia, apoyo, colaboración y confianza. Gracias por abrirme las puertas al Instituto de Física y permitirme colaborar en sus proyectos.

También quiero agradecer a mis compañeros y profesores de la Facultad de Ingeniería, por enseñarme a no rendirme, seguir aprendiendo y buscar la manera de resolver cada tarea desde todos los enfoques posibles.

Por último y no por ello menos importante, quiero agradecer a mis padres por su cariño, dedicación y apoyo económico en todas las etapas de mi vida.

A todos, muchas gracias por creer en mí.

Dedicatoria

Dedico con mucho cariño este trabajo a mis padres. Este trabajo es fruto de su esfuerzo, cariño y dedicación. A ustedes que dejaron de lado sus vidas para poder criarme y cuidarme de la mejor manera que pudieron. A ustedes que todo en sus posibilidades me dieron. A ustedes que siempre me protegieron dando siempre la cara por mí.

Adrián Correa Ortíz

Mesa de Jurado

Dr. Alfredo Gomez Rodriguez

Presidente

Dr. Luis David Fernando Romeu Casajuana

Vocal

Ing. Alberto Templos Carbajal

Secretario

Dr. Gabriel Eduardo Sandoval Romero

1er. Suplente

Dr. Ehecatl Luis David Paleo Gonzalez

2do. Suplente

Índice

Introducción	1
Capítulo I. Fronteras de Grano	3
1. Definición del problema	3
2. Objetivos de esta tesis	3
3. Dislocaciones	4
3.1. Dislocación de Borde	4
3.2. Dislocación de tornillo	4
4. Fronteras de grano	6
5. Red de coincidencia (CSL)	8
6. Red-O (O-Lattice)	8
6.1. Calculo de la O-Lattice	9
6.2. Limitaciones de la O-Lattice.	10
7. Estados preferenciales	11
7.1. Formulación matemática	12
7.2. Descomposición en interfaces singulares	12
7.3. Cálculo de la CSL	14
8. Cálculo del Campo de Desplazamientos	15
9. Generación de la interface	17
Capítulo II. Desarrollo del programa	19
1. Requisitos del programa	19
1.1. Requisitos generales	19
1.2. Requisitos específicos	19
1.3. Portabilidad y Velocidad	19
2. WPF	20
2.1. ¿Qué es WPF?	20
2.2. ¿Por qué WPF?	20
2.3. ¿Para qué se usa WPF?	20
2.4. ¿Cómo se usa WPF?	20
3. Descripción del programa	21

3.1. Pseudocódigo general del programa	21
3.2. Diagrama de bloques del programa	21
3.3. Diagrama de flujo y pseudocódigo del bloque de lectura.....	22
3.4. Diagrama de flujo y pseudocódigo del bloque de construcción	26
3.5. Diagrama de flujo y pseudocódigo del bloque de despliegue	30
Capítulo III. Resultados.....	33
1. Ventana Principal (Interface de Usuario)	33
1.1. Bloque Principal.....	34
1.2. Bloque de Despliegue.....	35
1.3. Bloque de Desplazamiento e Iteración	36
1.4. Bloque de Ejecución y Exportación	37
1.5. Bloques de estado y reporte	38
2. Ventana E ll	39
2.1. Menú Save.....	40
2.2. Menú Fill.....	41
2.3. Menú Sites.....	42
2.4. Menú Bonds	45
2.5. Menú Cells.....	48
2.6. Controles Extras	52
3. Ventana E l	53
3.1. Menú Save.....	53
3.2. Menú Fill.....	54
3.3. Menú Field.....	54
3.4. Controles Extras	54
4. Resultados del programa	55
4.1. Frontera Singular.....	55
4.2. Desplazamiento de una Frontera Singular	58
4.3. Fronteras de Segundo Orden	58
4.4. Fronteras de Tercer Orden	62
4.5. Fronteras de Cuarto Orden	64
5. Análisis de resultados.....	66
5.1. Análisis de N1 [3 3 3] 33.72° Σ1189.....	66

5.2. Tercer Orden	73
5.3. Transformaciones de Tercer Orden	73
5.4. Vectores base de Tercer Orden.....	74
Capítulo IV. Conclusiones	79
1. Conclusiones finales	79
Bibliografía	81

Lista de acrónimos y símbolos

FG	Frontera de Grano.
O	O-Lattice/Red-O.
C o CSL	Red de Sitios de Coincidencia/Coincidence Sites Lattice.
Ω	Número de sitios de la O-Lattice dentro de la celda unidad.
L_m	Red mediana/Red de referencia.
Σ	Número de celdas unidad de L_m en una celda unidad de C .
D o DSC	Displacement Shift Complete.
E^{\parallel}	Espacio Paralelo.
E^{\perp}	Espacio Perpendicular.
SO	Sistema Operativo.
WPF	Windows Presentation Foundation.
XAML	Extensible Application Markup Language.
HTML	HyperText Markup Language.
UI	Interface de Usuario/User Interface.
P	Partial O-Lattice/O-Lattice parcial.

Introducción

En esta tesis se explica brevemente lo que es una frontera de grano, sus atributos básicos y el modelo teórico con el cual las describimos. Estos conocimientos fueron la base para realizar un programa que tiene como propósito ser una herramienta de apoyo para la investigación de la estructura de interfaces cristalinas.

La aplicación consiste en un programa escrito en WPF, que calcula el campo de desplazamientos entre dos redes cristalinas en contacto con lo que se logra describir el contenido dislocativo total de las interfaces.

Para su realización, se hizo un análisis de los requerimientos del programa para determinar el lenguaje de programación y paradigma más conveniente para satisfacer dichos requerimientos.

El resultado es un programa que cumple con los requisitos de funcionamiento y entrega una simulación de fronteras de grano que permite estudiarlas en detalle y revisar los modelos matemáticos propuestos para así comprobar, complementar y/o expandir el modelo teórico en el que se basa su funcionamiento.

Capítulo I. Fronteras de Grano

I.1. Definición del problema

Los objetos sólidos como los metales, raramente están compuestos por un solo cristal (monocristal), existiendo casos como las gemas comerciales, que sí lo están. Casi todos los demás materiales contienen múltiples cristales (materiales policristalinos), hechos de un gran número de monocristales o granos, que pueden ser microscópicos, unidos por una interface llamada límite o frontera de grano (FG). El tamaño de los granos en un policristal puede variar desde nanómetros hasta milímetros. Las FGs en un material se originan durante el mecanismo de solidificación (cristalización), que ocurre cuando se forman cristales a partir de núcleos sólidos en diferentes regiones del líquido o gas. Aun teniendo la misma estructura cristalina, las orientaciones de los granos casi siempre son diferentes. La importancia tecnológica de las FGs es que afectan las propiedades mecánicas de un material, como su resistencia a deformarse. Uno de los objetivos más importantes en éste campo es encontrar una teoría capaz de relacionar las propiedades físicas con la estructura atómica en la FG.

Un problema notable ha sido la dificultad de encontrar una teoría general (independiente del sistema cristalino) capaz de proporcionar información acerca de la estructura de la FG en función de parámetros macroscópicos medibles, como la estructura cristalográfica y la orientación relativa de los granos que la forman.

Una de estas teorías que merece mención especial es la teoría de dislocaciones de Bollmann (ver referencia 1), conocida como “O-Lattice Theory”, que proporciona el contenido de dislocaciones en cualquier FG.

La teoría de Bollmann se deriva de primeros principios y está sostenida en una sólida fundamentación matemática. Su principal inconveniente es que no proporciona una imagen detallada del contenido de dislocaciones secundarias cuya existencia él mismo predijo.

I.2. Objetivos de esta tesis

El objetivo de esta tesis es desarrollar una herramienta de cómputo que permita mostrar gráficamente las consecuencias de un modelo matemático desarrollado por el director de esta tesis (ver referencia 2) con el propósito de eliminar esta limitación y proporcionar una imagen completa del contenido de dislocaciones de las FGs que contribuya a resolver el problema de relacionar la estructura con sus propiedades.

Es importante hacer notar que una FG no tiene existencia *per se*, sino que es algo que se crea en el momento de poner dos cristales rotados en contacto entre sí y que desaparece si éstos se separan. Por esta razón en este trabajo definiremos operacionalmente una FG como el campo de desplazamientos que ocurre en el plano de contacto entre estos cristales. Este campo, aunado a las fuerzas interatómicas que dependen de cada material determinan las posiciones que los

átomos ocuparán en una interface real. Lograr la visualización de este campo a través de la creación de una aplicación apropiada es uno de los objetivos puntuales de esta tesis.

A continuación se revisan algunos conceptos básicos requeridos para entender el problema de la estructura de las FGs.

I.3. Dislocaciones

Las dislocaciones son defectos lineales normalmente asociadas con cristales (ver Figura I.1) aunque también aparecen en FGs, siendo defectos lineales que separan áreas del material donde planos atómicos han sufrido un desplazamiento y que pueden moverse en respuesta a esfuerzos externos resultando en la deformación plástica del material (ver referencia 3). Las dislocaciones tienen asociado un vector de desplazamiento llamado vector de Burgers que determina la dirección y magnitud del desplazamiento asociado.

El vector de Burgers es normalmente un vector de la red, con excepción de las dislocaciones de FG llamadas dislocaciones secundarias. Ellas tienen vectores de Burgers más pequeños como se verá más adelante.

Existen dos tipos principales de dislocación: Las dislocaciones de borde y las de tornillo.

I.3.1. Dislocación de Borde

Este tipo de dislocación, también llamada de línea o de cuña, toma su nombre debido a que aparecen como consecuencia de planos atómicos incompletos (o planos extra) dejando al final un borde en la red cristalina como muestra la Figura I.1. El plano extra puede moverse en brincos del tamaño de un plano atómico es decir, de un vector de la red, como consecuencia de esfuerzos externos, generando la deformación del cristal. La magnitud y dirección de este brinco es de una distancia interatómica y se conoce como vector de Burgers. En las dislocaciones de borde, este vector es perpendicular a la línea de la dislocación.

I.3.2. Dislocación de tornillo

Las dislocaciones de tornillo, también llamadas helicoidales, consisten en un desplazamiento de un plano cristalino y su movimiento es perpendicular a la dirección del esfuerzo y a la estructura atómica. El vector de Burgers es paralelo a la línea de dislocación como se muestra en la Figura I.1.

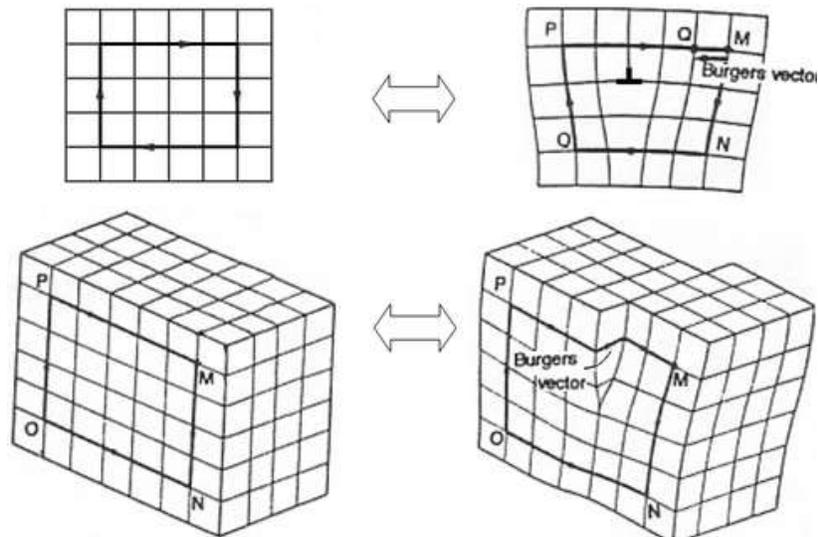


Figura I.1 Ejemplos de dislocaciones de borde y de tornillo. En la parte superior, contenido en las dislocaciones de borde, el vector de Burgers es paralelo al desplazamiento de los átomos, mientras que en la parte inferior las dislocaciones de tornillo contienen un vector de Burgers perpendicular al desplazamiento de los átomos.

Toda FG puede verse como una malla de dislocaciones como se muestra en la Figura I.2, que muestra dos planos atómicos rotados y superpuestos. Cuando se permite que los sitios se relajen para formar la interface real, aparece una malla de dislocaciones de tornillo. La malla ajusta las posiciones atómicas a ambos lados de la FG haciéndolas coincidir y concentrando el desajuste a lo largo de las líneas de dislocaciones de tornillo.

La Figura I.2 ilustra lo que ocurre cuando dos planos cristalinos se yuxtaponen al formar una interface.

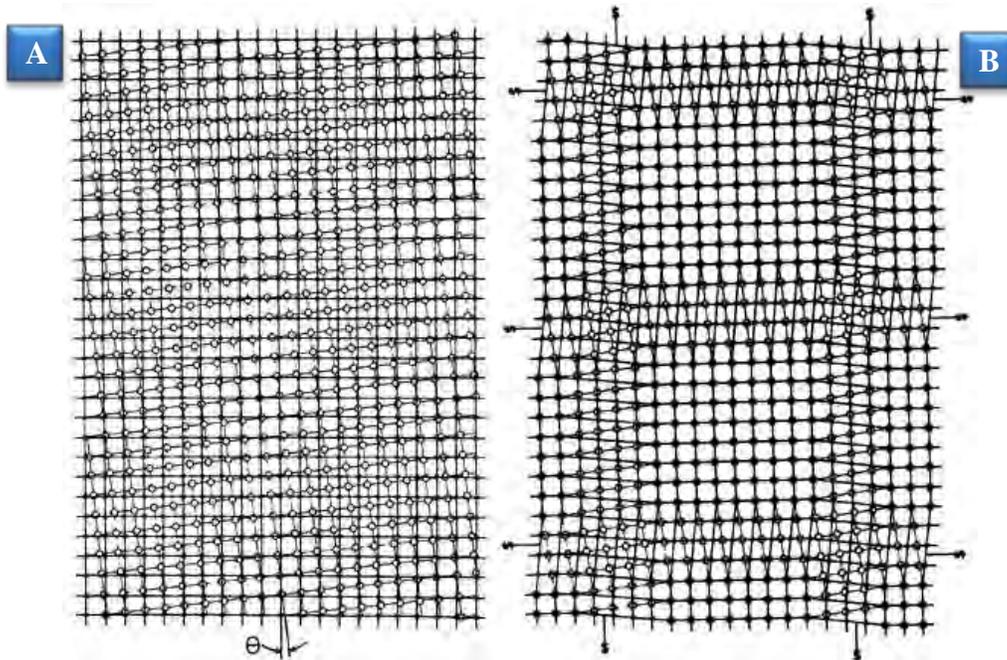


Figura 1.2 A muestra dos planos cristalinos rotados y superpuestos. B contiene los mismos planos donde los átomos se han relajado haciendo que las posiciones atómicas coincidan mediante la introducción de una malla de dislocaciones donde se concentra el desajuste entre los átomos, logrando así una disminución de la energía elástica de la interface.

I.4. Fronteras de grano

Como hemos visto, las FGs son interfaces entre dos planos cristalinos que separan regiones con diferente orientación dentro de un sólido policristalino. Las FGs contienen defectos de línea conocidos como dislocaciones de FG, que se encargan de acomodar los desplazamientos generados por el cambio de orientación.

Estos desplazamientos unen los sitios de un cristal con el sitio más cercano del cristal vecino. El conjunto de estos desplazamientos constituye el llamado campo de desplazamientos, que es una función del plano al plano (\mathbf{R}^2 a \mathbf{R}^2).

La Figura 1.3 muestra un ejemplo del campo de desplazamientos en la interface entre dos planos cristalinos separados una distancia Z (el ancho de la frontera). Note que todos los desplazamientos, incluyendo d_1 y d_2 , serán cero cuando el ángulo de rotación θ es de 0° , lo que constituye la que llamaremos "interface trivial". En ella, el campo de desplazamiento está dado por $d_i(X_i) = 0$ para todo sitio X_i . A medida que θ aumenta, el campo de desplazamiento $d_i(X_i)$ asume diferentes valores en cada punto X_i .

Una FG queda cristalográficamente definida por este campo de desplazamientos. En una interface real, los átomos en la interface se moverán de acuerdo a las fuerzas interatómicas resultantes del campo de desplazamientos y del tipo de átomos que componen ambos cristales. Aunque el acomodo final de los sitios depende de la composición química de los cristales, el campo de desplazamiento indica (dado un potencial atómico) las direcciones en las que se espera que los

sitios se muevan y por lo tanto se espera que la simetría de este campo determine la simetría de la FG real independientemente de la naturaleza de las fuerzas.

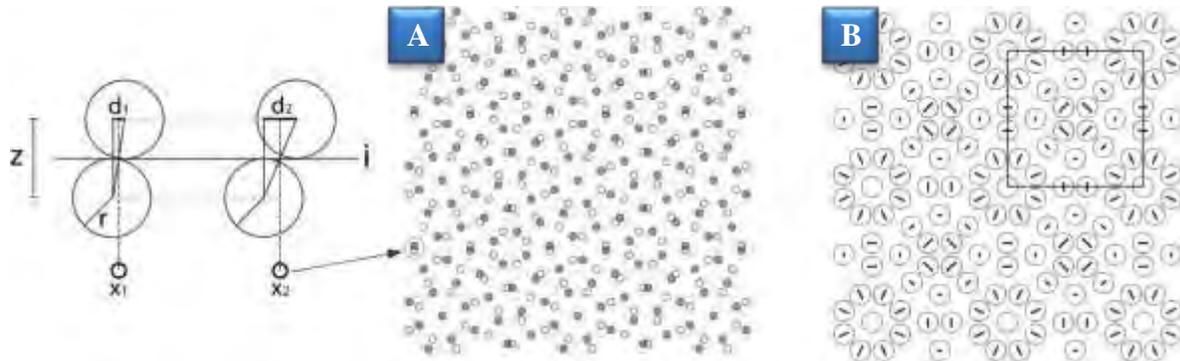


Figura 1.3 Campo de desplazamientos en una interface típica entre dos planos cristalinos de simetría cuadrada. Izquierda: dos sitios cristalinos x_1, x_2 mostrando sus respectivos desplazamientos d_1 y d_2 . A muestra una proyección de los sitios de ambos cristales en el plano de la frontera en lo que se conoce como el patrón dicromático y B muestra el conjunto de vectores de desplazamiento dentro de círculos centrados en cada sitio de la interface.

I.5. Red de coincidencia (CSL)

Cuando se proyectan los dos planos cristalinos que componen las FGs se obtiene el llamado patrón dicromático (ver Figura I.3.A). En él se pueden ver los puntos de cada plano en diferente color. Si la tangente del ángulo de rotación es un número racional, entonces habrá sitios donde los puntos de ambas redes coincidan. Los puntos de coincidencia forman una red denominada red de sitios de coincidencia o CSL por sus siglas en inglés (Coincidence Sites Lattice) (ver referencia 4). Los puntos de la CSL se muestran con círculos mayores en la figura I.4.

Esta red es importante pues determina el periodo de la interface. Mientras menor sea el periodo, mejor será el encaje entre los planos y menor la energía interfacial. El tamaño de la CSL se expresa mediante el llamado índice Σ , dado por el número de puntos de cada uno de los planos cristalinos que se encuentran en la celda unidad de la CSL. En la Figura I.4, puede verse que hay 17 puntos de cada red dentro de la celda, por lo que la FG de la figura se conoce como $\Sigma 17$.

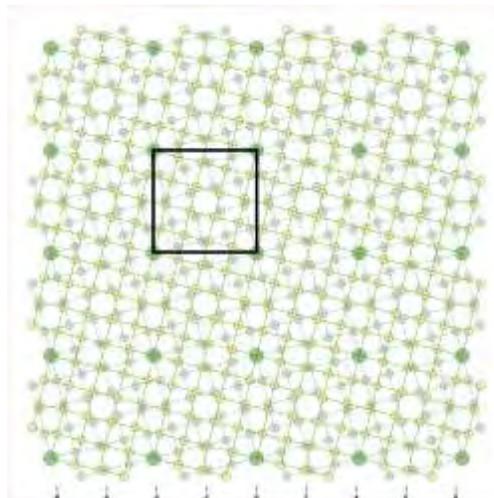


Figura I.4 Patrón dicromático $\Sigma 17$, formado por la yuxtaposición de dos planos cristalinos girados un ángulo de 28.07° mostrando los sitios de cada cristal con diferente color. Los círculos más grandes corresponden a la CSL cuya celda unidad se muestra como un cuadrado.

I.6. Red-O (O-Lattice)

Otra red importante es la O-Lattice (ver Figura I.5.B). La importancia de ésta red reside en el hecho de que determina el contenido de dislocaciones de las FGs y es por tanto la red de mayor importancia en este trabajo.

Por construcción, los puntos de la O-Lattice indican las posiciones donde el campo de desplazamiento es cero y los puntos intermedios indican las zonas de mayor desajuste que es donde aparece la malla de dislocaciones encargada de absorber el desajuste entre los planos cristalinos. La distancia entre puntos de la O-Lattice establece la distancia entre dislocaciones.

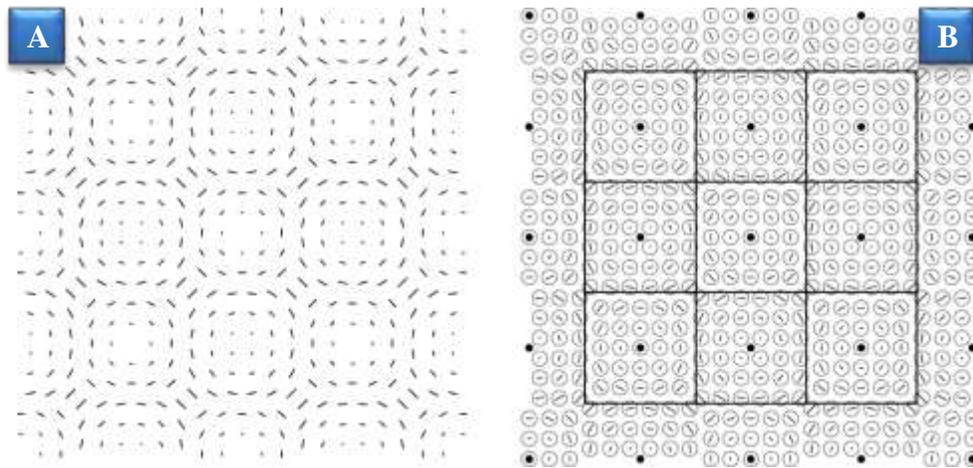


Figura I.5 A: Campo de desplazamientos de la interface $\Sigma 61$, $\theta = 10.39^\circ$. B: puntos de la O-Lattice que indican las posiciones de la interface donde el campo de desplazamientos es cero. La retícula cuadrada muestra la malla de dislocaciones (dual de la O-Lattice) que aparece a lo largo de las líneas de mayor desajuste. Los círculos alrededor de los vectores del campo son una ayuda visual para facilitar la apreciación de la simetría de la interface.

I.6.1. Cálculo de la O-Lattice.

Consideremos la FG entre dos planos cristalinos idénticos rotados por un ángulo θ . Estos planos se calculan a partir de una red de referencia, la cual se rota por los ángulos $\frac{\theta}{2}$ y $-\frac{\theta}{2}$ para generar las dos redes. Antes de rotar, las posiciones (X, Y) de los sitios de ambos planos coinciden (ver Figura I.6). Al ir incrementando el ángulo de rotación, el desplazamiento $\delta_i(P)$ en un punto P cualquiera, estará dado por el vector que une las posiciones resultantes de girar P por $\frac{\theta}{2}$ y $-\frac{\theta}{2}$ (ver Figura I.6), dónde:

$$\delta_i(P) = (R_+ - R_-)P. \quad (1)$$

donde R_+ y R_- representan las rotaciones por $\frac{\theta}{2}$ y $-\frac{\theta}{2}$ respectivamente. Cabe aclarar que los desplazamientos se consideran módulo vectores de la red, de tal manera que el desplazamiento es cero cuando δ_i es un vector de la red.

Ésta ecuación es conocida como la ecuación de Frank-Bilby (ver referencia 5) por lo que llamaremos transformación de Bilby a la siguiente transformación:

$$B = (R_+ - R_-). \quad (2)$$

Bollmann se preguntó cuáles puntos P_i dan origen a desplazamientos δ_i que son también vectores de la red cristalina pues en esos puntos donde el campo de desplazamientos es cero. Si llamamos a estos puntos O_i , entonces podemos escribir:

$$O_i = (R_+ - R_-)^{-1}P_i, \quad (3)$$

donde P_i representa cada vector de la red de referencia (antes de la rotación) que llamaremos red mediana L_m y O_i representa cada uno de los puntos donde el campo de desplazamientos es cero, lo que por definición constituye la O-Lattice.

A media distancia entre dos puntos de desplazamiento cero (Puntos O), existe una zona donde el desplazamiento es máximo y es allí donde el sistema introduce una dislocación (ver Figura I.5).

La transformación de Bollmann al aplicarse a los puntos de L_m , nos proporciona la O-Lattice de una FG de rotación y con ella el contenido aproximado (ver abajo) de dislocaciones de la frontera. Ésta transformación está dada por la siguiente ecuación:

$$T = (R_+ - R_-)^{-1}. \quad (4)$$

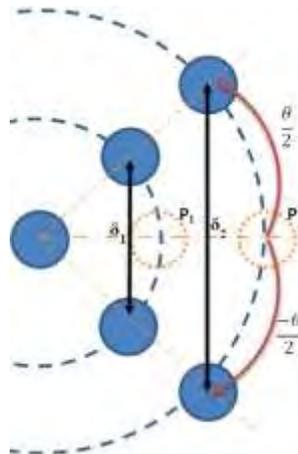


Figura I.6 Cálculo del campo de desplazamiento

I.6.2. Limitaciones de la O-Lattice.

Aunque la O-Lattice proporciona el contenido de dislocaciones de las FGs de rotación, no explica en detalle la estructura de la red de dislocaciones, en particular no proporciona el contenido de dislocaciones secundarias, cuya existencia fue propuesta por el mismo Bollmann.

Otra de sus limitaciones es que la transformación de Bollmann es una función continua y suave del ángulo que predice un cambio gradual en las propiedades de las FGs. Esto sin embargo está en contradicción con observaciones experimentales que señalan que hay FGs con propiedades **especiales** que han recibido varios nombres, entre ellos el de **Fronteras Singulares**. Entre estas propiedades destacan una menor energía y mayor resistencia al deslizamiento de los granos constituyentes, lo que las hace tener propiedades mecánicas especiales.

Se sabe por experiencia que las fronteras especiales son de periodo pequeño, es decir de Σ pequeña, pero no existe (hasta ahora) una definición matemática de singularidad.

I.7. Estados preferenciales

Para explicar el fenómeno de fronteras singulares, Bollmann postulo la existencia de **Estados Preferenciales**, dónde hay ángulos de rotación que dan lugar a fronteras de baja energía, que contienen dislocaciones cuyos vectores de desplazamiento (vectores de Burgers) son vectores de la red cristalina, tal como se supuso en la derivación de la ecuación de Bollmann. Estos estados preferenciales corresponden a las fronteras singulares. A las dislocaciones con vectores de desplazamiento pertenecientes a la red cristalina se les denominó dislocaciones primarias.

Como Bollmann no tenía una definición formal de estado preferencial, hizo la habitual vaga suposición de que eran orientaciones con un pequeño valor no especificado de Σ . Bollmann luego supuso que para pequeñas desviaciones angulares $\Delta\theta$ de un estado preferencial, la interfaz trataría de preservar en la mayor medida posible su configuración de baja energía concentrando el desajuste introducido por $\Delta\theta$ en dislocaciones secundarias que tendrían vectores de Burgers más pequeños que los de las dislocaciones primarias. Las dislocaciones secundarias tienen vectores de desplazamiento pertenecientes a la red denominada Displacement Shift Complete (DSC) (ver referencia 1 p. 208), que a pesar de su extraño nombre es simplemente la red generada por los vectores más pequeños del conjunto de vectores que unen los sitios de las redes giradas mostrados en la Figura I.5.

Bollmann postuló que los vectores de desplazamiento de las dislocaciones secundarias podrían calcularse a partir de una nueva interface formada por dos copias de la red DSC giradas entre sí por $\Delta\theta$. Nos referiremos a esta nueva frontera entre dos redes DSC, que es central a los resultados de este trabajo, cómo **Frontera Secundaria** o **Estado Secundario**. Esto significaba que debía existir una O-Lattice secundaria asociada a la malla de dislocaciones secundarias postuladas por Bollmann.

A pesar de que la observación experimental de dislocaciones secundarias (ver referencia 6) confirmó la conjetura de Bollmann, el problema que subsistía era que carecía de una definición rigurosa para los valores de los ángulos de rotación que daban lugar a estados preferenciales (que denominaremos rotaciones singulares), lo que le impidió formular su hipótesis de manera matemática.

En la siguiente sección introduciremos la definición precisa de rotación singular y veremos cómo ésta nos permitirá describir completamente el contenido dislocativo de cualquier interface entre dos redes rotadas; también veremos que además de los estados secundarios predichos por Bollmann, existen también estados terciarios, cuaternarios, etc.

I.7.1. Formulación matemática

Como hemos dicho Bollmann (ver referencia 1) no contaba con una expresión matemática para los ángulos de rotación singulares dados por los valores de la ecuación (5) para ξ entero (ver referencia 7):

$$\theta_{\xi} = 2 \tan^{-1} \frac{\sqrt{N}}{\xi}, \quad (5)$$

donde N es un número que refleja la simetría puntual (ver referencia 8) de los planos cristalinos que forman la frontera y ξ es un número real. Por ejemplo, N=1 para redes cuadradas y N=3 para redes hexagonales aunque N puede calcularse sin problema para cualquier simetría (ver referencia 9). En este trabajo usaremos fundamentalmente ejemplos de redes cuadradas, por lo que usaremos N=1.

De acuerdo a esta parametrización, la FG resultante es singular cuando ξ es un entero x, por lo que los ángulos que dan lugar a FGs singulares para redes cuadradas, esta dados por la simple relación:

$$\theta_x = 2 \tan^{-1} \frac{1}{x}. \quad (6)$$

Las dos interfaces mostradas en los ejemplos de arriba ($\Sigma 17$ y $\Sigma 61$) son ambas singulares y poseen dislocaciones con vectores de desplazamiento pertenecientes a la red cristalinas.

I.7.2. Descomposición en interfaces singulares

El razonamiento de Bollmann era que, así como al ir aumentando el ángulo de rotación a partir de cero, la FG (trivial) trataba de preservar la estructura de la red cristalina introduciendo dislocaciones primarias para absorber los desplazamientos, así, una FG en un estado singular trataría de preservar la estructura de este estado introduciendo dislocaciones secundarias.

Considerando un ángulo arbitrario θ' dado por:

$$\theta' = \theta_x + \Delta\theta, \quad (7)$$

dónde θ_x es la rotación singular más próxima dada por la ecuación (6), y siguiendo el razonamiento de Bollmann, resulta plausible pensar que $\Delta\theta$ debería ser también un ángulo de rotación singular dado por:

$$\Delta\theta = 2 \tan^{-1} \frac{1}{x'} \quad (8)$$

con x' entero.

De esta manera, dado cualquier ángulo de rotación, el razonamiento de Bollmann puede extenderse considerando que el sistema trataría de aproximarse a él mediante rotaciones singulares sucesivas (ver Figura I.7 y Tabla 1), haciendo que una FG con un ángulo arbitrario se descomponga en una serie de rotaciones singulares. El estado en θ_3 sería un estado terciario que

de acuerdo con Bollmann contendría la estructura del estado secundario θ_2 (con dislocaciones terciarias acomodando los desajustes producidos por la rotación a través de $\Delta\theta_3$) que a su vez contendría la estructura del estado primario θ_1 (con dislocaciones secundarias que acomodarían los desajustes ocasionados por $\Delta\theta_2$).

Es importante recalcar que el estado secundario resulta de rotar por $\Delta\theta_2$ la red DSC del estado primario y que el estado terciario resulta de rotar por $\Delta\theta_3$ la red DSC del estado secundario. Se puede demostrar que la red DSC está dada por la ecuación:

$$D = \frac{1}{\xi} C, \quad (9)$$

donde D y C son matrices de estructura cuyas columnas tienen los vectores base que generan las redes DSC y CSL.

$\Delta\theta_1 = 2\tan^{-1} \frac{1}{x_1}$	$\theta_1 = \Delta\theta_1 = 2\tan^{-1} \frac{1}{\xi_1}$	$\xi_1 = x_1$
$\Delta\theta_2 = 2\tan^{-1} \frac{1}{x_2}$	$\theta_2 = \Delta\theta_1 + \Delta\theta_2 = 2\tan^{-1} \frac{1}{\xi_2}$	$\xi_2 = x_1 + \frac{1}{x_2}$
$\Delta\theta_3 = 2\tan^{-1} \frac{1}{x_3}$	$\theta_3 = \Delta\theta_1 + \Delta\theta_2 + \Delta\theta_3 = 2\tan^{-1} \frac{1}{\xi_3}$	$\xi_3 = x_1 + \frac{1}{x_2 + \frac{1}{x_3}}$

Tabla 1 Ángulos involucrados en la descomposición singular de una interface con ángulo de rotación θ_3

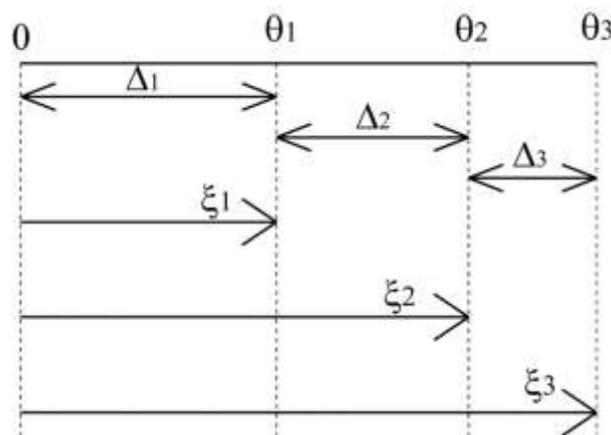


Figura 1.7 Descomposición en rotaciones singulares de una FG con ángulo de rotación arbitrario θ_3

Como ya se ha dicho, Bollmann no podía generar una expresión general para la estructura de los estados tanto primarios como secundarios porque carecía de una definición de singularidad y sin ésta, resultaba imposible también calcular la CSL y por lo tanto la DSC de FGs arbitrarias. Aunque

es posible calcular la O-Lattice para cualquier ángulo de rotación (ecuación 3) es imposible calcular Σ a partir del ángulo (sin la definición de singularidad de la ecuación 6) debido a que Σ es una función discontinua del ángulo para todo valor de éste.

I.7.3. Cálculo de la CSL

En el caso de interfaces singulares, Σ puede calcularse con exactitud debido a que cuando el ángulo de rotación θ obedece la ecuación (6), las O-Lattices y CSL se relacionan de una manera muy simple como muestra la Figura I.8 para redes cuadradas (ver Figura I.9 para redes hexagonales).

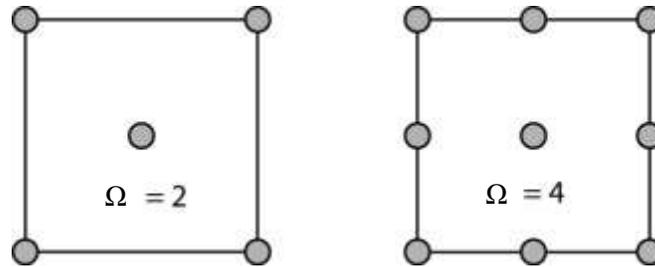


Figura I.8 Relación entre la celda unidad de la CSL mostrada como un cuadrado y los puntos de la O-lattice para interfaces singulares entre redes cuadradas dependiendo de la paridad de x en la ecuación 4. Izquierda: x es non. Derecha: x es par. Ω indica la densidad de puntos O en la celda unidad de la CSL.

El número de puntos O por celda unidad de la CSL está dada por la ecuación empírica:

$$\Omega = \frac{4N}{MCD(N+x^2, 4N)} \quad (10)$$

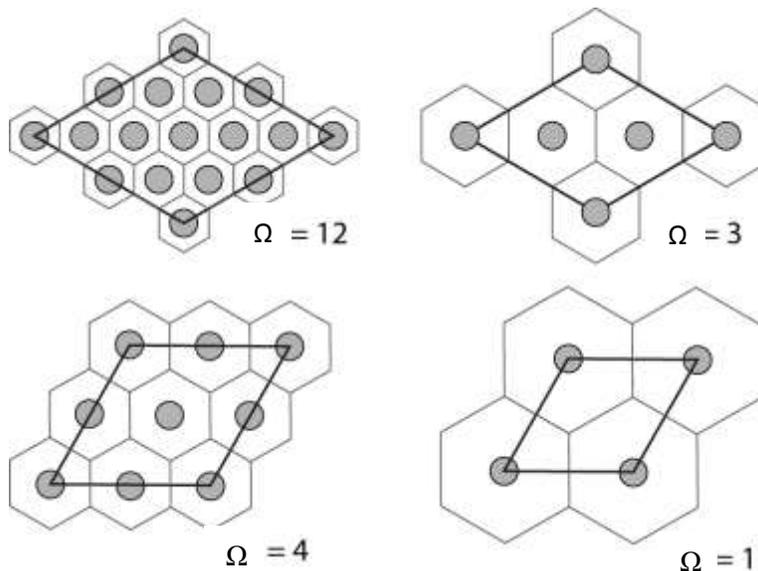


Figura I.9 Relación entre la celda unidad de la CSL mostrada como un rombo y los puntos de la O-Lattice para interfaces singulares entre redes hexagonales mostrando que hay cuatro posibles densidades de puntos O.

Dónde $MCD(N+x^2, 4N)$ denota el máximo común divisor entre los enteros $N+x^2$ y $4N$. Ésta ecuación funciona para $N=1, 2$ y 3 .

Esto quiere decir que existe un relación simple entre las matrices de estructura C y O cuando el ángulo de rotación es singular. En particular, para $N=1$ la relación es:

$$C = OG. \quad (11)$$

Donde G una matriz entera determinada empíricamente calculando manualmente las matrices de estructura O, G usando los ángulos dados por la ecuación (5) para una serie de valores enteros de ξ .

$$G = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Cuando x es par y

$$G = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (13)$$

Cuando x es non.

La ecuación (11) permite calcular la CSL para cada rotación singular en la expansión en fronteras singulares descrita arriba y también la DSC a través de la ecuación (9).

I.8. Cálculo del Campo de Desplazamientos

Como hemos visto, simularemos una interface vía el campo de desplazamientos que es el conjunto de vectores que llevan a una red en coincidencia con la otra, siendo los vectores que unen los sitios de las redes L_1 y L_2 que se encuentren más cercanos. La manera más eficiente de realizar este cálculo es usar el método de corte y proyección aplicado a FGs desarrollado en la referencia 7. La ventaja de este método es que evita el cálculo de distancias entre los puntos de ambas redes.

Para cualquier punto x en el plano de la FG, se toman las coordenadas de las redes L_1 y L_2 , formando el hiper-punto en 4 dimensiones $X = (x^{(1)}, x^{(2)})$, donde $x^{(1)}$ y $x^{(2)}$ son puntos vecinos en el patrón dicromático pertenecientes a L_1 y L_2 respectivamente.

El campo de desplazamiento está dado por el conjunto $(x^{\parallel}, x^{\perp})$ donde

$$x^{\perp} = \frac{x^{(1)} - x^{(2)}}{2} \quad (14)$$

es el vector de desplazamiento perteneciente a la red DSC que se asocia al punto

$$x^{\parallel} = \frac{x^{(1)} + x^{(2)}}{2}. \quad (15)$$

El conjunto de puntos x^\perp constituye el llamado espacio perpendicular E^\perp mientras que el espacio conocido como espacio paralelo (E^\parallel) está constituido por los puntos x^\parallel y el campo de desplazamiento está dado por el conjunto de puntos en cuatro dimensiones (x^\parallel, x^\perp).

I.9. Generación de la interface

Con lo expuesto anteriormente es posible ahora determinar el contenido dislocativo completo de cualquier interface. El proceso consiste en calcular todos los órdenes de O-lattices que resultan de la descomposición en interfaces singulares (ver referencia 2). Este cálculo requiere del uso de otras redes, a saber:

L_m	La red mediana o red de referencia que es simplemente el plano cristalino inicial antes de rotar.
O	La O-Lattice (ver ecuación 2).
C	La CSL (ver ecuación 9).
D	La DSC (ver ecuación 7).

y consiste en la aplicación recursiva de las siguientes ecuaciones:

En primer lugar, calculamos el parámetro ξ del ángulo de rotación general (θ_3 en la Figura I.7) dado por:

$$\xi = \frac{1}{2 \tan \frac{\theta}{2}} \quad (16)$$

con lo que podemos calcular la matriz de estructura de Bollmann O_ξ de la O-Lattice, que da los ceros en el campo de desplazamientos

$$O_\xi = T(\xi) L_m \quad (17)$$

Si θ es singular, entonces ξ es un entero y solo hay dislocaciones primarias (vectores de Burgers de L_m) espaciadas por los vectores de O_ξ . En caso contrario expandimos ξ en fracciones continuas q veces hasta lograr aproximar ξ con la precisión deseada:

$$\xi_q = |x_1| + \frac{s_2}{|x_2| + \dots + \frac{s_q}{|x_q|}} \quad (18)$$

donde s_i es el signo del entero x_i . Este proceso define una sucesión de ángulos singulares

$$\theta_q = 2 \tan^{-1} \frac{\sqrt{N}}{s_q x_q} \quad (19)$$

Cada ángulo singular tiene asociada una O-lattice singular con matriz de estructura

$$O_q = T_q D_{q-1} \quad (20)$$

(con $D_0 = L_m$) donde

$$T_q = \left(R \frac{\Delta_q}{2} - R \frac{\Delta_q}{2} \right)^{-1} \quad (21)$$

es la transformación de Bollmann. D_q es la matriz de estructura dela DSC

$$D_q = \frac{1}{\Sigma_q} C_q \quad (22)$$

y Δ_q , que es un entero por construcción está dado por

$$\Delta_q = \frac{N + \xi_{q-1} \xi_q}{\xi_{q-1} - \xi_q} \quad (23)$$

y finalmente obtenemos la matriz de estructura de la CSL de orden q

$$C_q = O_q G(\Delta_q) \quad (24)$$

El resultado de estos cálculos solo puede visualizarse a través de un programa de cómputo que permita analizar los resultados de esta teoría y compararlos con las observaciones experimentales tal como se describe en los siguientes capítulos, siendo ésta la razón de ser de esta tesis.

Capítulo II. Desarrollo del programa

A lo largo de los años, para las actividades científicas, el uso de Sistemas Operativos (SO) ha estado más orientado hacia UNIX, Mac y Linux (ver referencia 10). Dado que desde su salida Windows se ha ido adueñando del mercado de computadoras caseras y quitándoles a otros SOs el ámbito laboral o empresarial, siendo más fácil encontrar computadoras personales con éste SO. Sin embargo por lo mismo ha descuidado el ámbito científico, aun cuando hay instrumentos que sean compatibles con él. También con el tiempo y actualizaciones que ha tenido Windows, han ido dejando obsoletas aplicaciones de uso esencial en la investigación, forzando a los usuarios a no actualizar los SOs (ver referencia 11). Es por ello que en esta tesis se realizó un programa que fuera compatible con todas las versiones modernas de Windows, utilizando un lenguaje de programación nativo de Microsoft y contenido en Visual Studio. El programa es compatible desde Windows XP hasta Windows 10 (ver referencia 12).

II.1. Requisitos del programa

El programa a desarrollar requiere de componentes importantes que se pueden separar en rubros generales y específicos, donde requisitos generales son aquellos que pueden compartir con cualquier otro programa y los específicos se refieren solo a las funciones únicas del mismo. A continuación se desglosan cada uno de los rubros y se explicarán más a detalle los más importantes.

II.1.1. Requisitos generales

- Portabilidad.
- Alta velocidad de procesamiento.
- Interface gráfica.
- Gráficos exportables.
- Gráficos vectoriales.
- Tamaño variable de ventanas.
- Tamaño variable del gráfico.

II.1.2. Requisitos específicos

- Solicitar un ángulo / una cadena de enteros que representa un ángulo.
- Solicitar la simetría del cristal.
- Descomponer un ángulo racional en una cadena de enteros.
- Solicitar el tamaño del gráfico.
- Solicitar el tamaño de la ventana.
- Generar a partir del ángulo / cadena de enteros y de la simetría del cristal una matriz.
- A partir de la matriz, generar cada punto de la red cristalina.
- Calcular el desplazamiento de cada punto de la red.
- Graficar cada punto de la red cristalina.
- Graficar los desplazamientos en la red cristalina.

II.1.3. Portabilidad y Velocidad

Éste programa en sus versiones anteriores, escritas en Matlab permitían operaciones sencillas que lo hacía único en su momento. El programa estaba limitado solamente por la capacidad de

memoria que le permitía el intérprete. Al realizar cálculos su límite estaba en el tamaño del gráfico, si se hacía muy grande, la memoria no era suficiente para procesarlo. De la misma manera, hacer simulaciones de las FGs de ángulos muy grandes o con un tamaño relativamente grande tardaba horas en realizarse es por ello que se requirió de un cambio radical, reescribir el programa para hacerlo independiente.

II.2. WPF

Se contemplaron varias opciones en cuanto a lenguajes de programación para reescribir el programa, desde: Visual Basic, JAVA, C++, entre otros. Ninguno de ellos cumplía con los requisitos principales, la portabilidad sin aumentar el complejo grado de dificultad que tiene el programa, ni la posibilidad de generar gráficos vectoriales. Bajo mayor estudio se encontró la plataforma .Net, que contiene WPF.

II.2.1. ¿Qué es WPF?

Windows Presentation Foundation (WPF) es un sistema de presentación, que permite crear aplicaciones de Windows independientes. Tiene como núcleo un motor de representación basado en vectores independientes de la resolución. Utiliza la plataforma .Net que contiene C# y Extensible Application Markup Language (XAML), que se utilizan en el programa realizado, entre otros lenguajes y herramientas. Debido a su paradigma, la programación de WPF es orientada a eventos (ver referencia 13).

II.2.2. ¿Por qué WPF?

WPF permite una alta compatibilidad en los SOs de Windows modernos y lo mejor de todo, en caso de querer convertir el programa a un ambiente móvil para celulares y tabletas éste se podría realizar sin tanto problema. Al generar ambientes visuales, cubre una de las ventajas que daba Matlab y con la facilidad que proporciona para cálculos matemáticos, permite realizar operaciones a mayor velocidad, con un mejor manejo de recursos de hardware.

II.2.3. ¿Para qué se usa WPF?

Debido a que queremos que el programa sea utilizado sin importar la versión de Windows que se use, WPF nos permite enfocarnos al comportamiento que queremos que tenga. La parte visual independientemente de si usamos una pantalla chica, mediana o grande, será manejada directamente con el motor de representación que tiene WPF.

II.2.4. ¿Cómo se usa WPF?

Para poder trabajar con WPF, debemos tener en cuenta dos cosas: lo visual y el comportamiento.

La parte visual en WPF se maneja directamente con XAML, que tiene un comportamiento similar a HTML, en el cual programamos directamente los componentes que queremos generar en una vista.

Al generar una ventana se debe especificar todos los elementos que contiene dicha ventana, desde un cuadro de texto, hasta un botón y las acciones a las que debe responder.

Teniendo nuestra parte visual, debemos programar el comportamiento que necesita tener cada uno de los elementos generados anteriormente, utilizando C#. En esta parte debemos decirle al programa que es lo que debe realizar en cada acción.

Al estar utilizando C#, podemos utilizar objetos y de ésta manera separar cada parte de nuestro programa en clases que engloben la funcionalidad, propiedades y métodos que necesitamos en nuestro programa.

II.3. Descripción del programa

La herramienta desarrollada consiste en un programa escrito en WPF, que calcula el campo de desplazamientos entre dos cristales en contacto con lo que se logra describir el contenido dislocativo completo de las interfaces, como se menciona en el capítulo I. Ésta herramienta despliega todas las redes involucradas en una FG y le da al usuario opciones de visualización de los resultados obtenidos.

II.3.1. Pseudocódigo general del programa

1. Inicio del programa.
2. Ejecuta bloque de lectura.
3. Ejecuta bloque de cálculo.
4. Ejecuta bloque de despliegue.
5. Fin del programa

II.3.2. Diagrama de bloques del programa

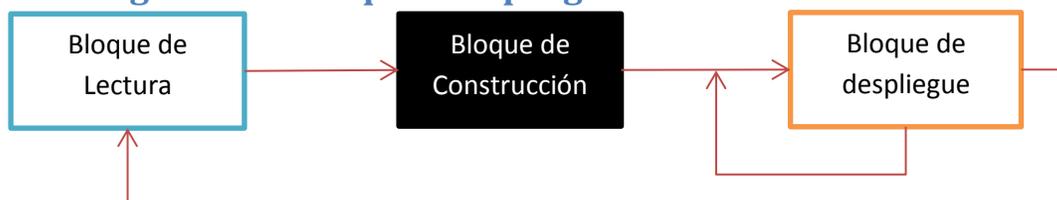


Figura II.1 Diagrama de bloques del programa

El programa primero despliega la UI y espera a que el usuario ingrese datos de entrada e inicie el cálculo de la FG. El bloque de cálculo lee las variables ingresadas por el usuario, modifica los valores por defecto e inicia el constructor de interfaces (I.B.). Finalmente el I.B. arroja los resultados de la simulación. Los resultados se pueden corroborar con la experimentación. Por las operaciones matemáticas realizadas, podemos asegurar que el programa tiene una precisión muy alta dado que podemos utilizar más allá de milésimas de grado y puesto que la microscopía actual no permite mediciones de ángulos con precisión de micras de grado, podemos adelantarnos con la

simulación y entender de mejor manera resultados que de otra manera no podrían estudiarse, haciendo indispensable éste programa para mayor investigación.

II.3.3. Diagrama de flujo y pseudocódigo del bloque de lectura

En ésta sección se describe brevemente el funcionamiento del bloque de lectura generado con la interacción entre el usuario y la UI, describiendo las acciones que puede tomar el usuario.

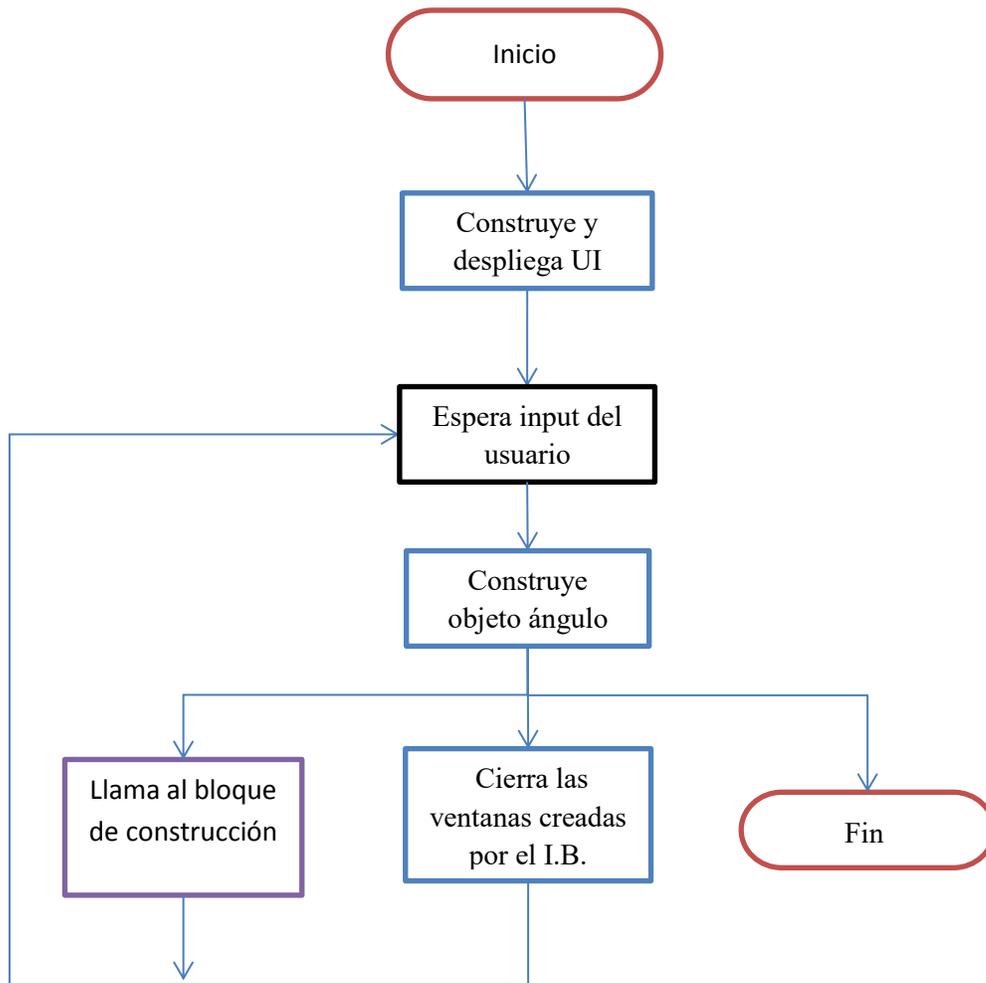


Figura II.2 Diagrama de flujo del bloque de lectura.

1. Inicio del bloque de lectura.
2. Se construye y despliega la UI
3. Se espera la introducción de datos del usuario.
4. Construye el objeto ángulo.
5. El usuario tiene tres opciones:
 - a. Construir las redes con los datos ingresados (llama al bloque de construcción) e ir al punto 3.

- b. Cerrar las ventanas de resultados en caso de haber usado previamente el programa e ir al punto 3.
- c. Fin del bloque de lectura.

El programa tiene como ventaja que puede generar de manera independiente cada ventana. Las operaciones realizadas en ellas se realizan sin mezclar la información. Cada vez que sea llamado el constructor, se crea un objeto diferente aun cuando tenga los mismos valores con una red anterior.

II.3.3.1. Diagrama de flujo y pseudocódigo de la construcción del objeto ángulo

La construcción del objeto ángulo tiene la finalidad de expresar un ángulo como un número racional y descomponer el ángulo en rotaciones singulares. Dicho número racional se expande en fracciones continuas obteniendo una lista de enteros que forman el conjunto de rotaciones singulares.

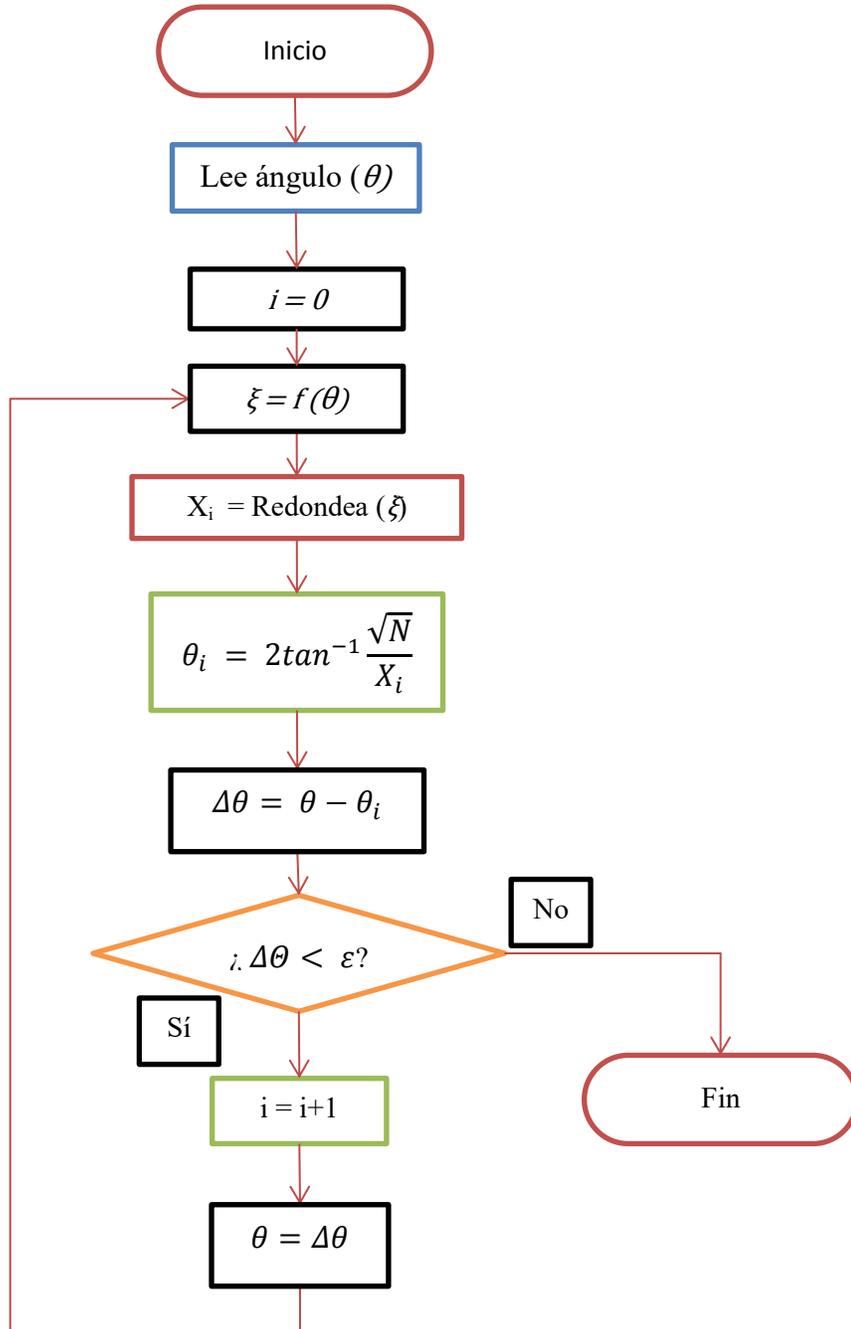


Figura II.3 Diagrama de flujo del sub bloque de construcción del objeto ángulo

1. Inicio del sub bloque de construcción del objeto ángulo
2. Lee el ángulo y lo almacena como ángulo base.
3. Convierte el ángulo base a un número racional.
4. Se redondea el número racional a un número entero.
5. Se convierte el entero a un ángulo en función de la simetría de la FG
6. Se compara el ángulo obtenido en el punto 5 con el ángulo base.
7. Si el resultado del punto 6 es menor a la tolerancia preestablecida, realiza los siguientes pasos:
 - a. Almacena el valor del ángulo obtenido en el punto 5 y el entero obtenido en el punto 4.
 - b. Establece el ángulo del punto 5 como el nuevo ángulo base.
 - c. Repetir desde el punto 4.
8. Fin del sub bloque de construcción del objeto ángulo

II.3.4. Diagrama de flujo y pseudocódigo del bloque de construcción

Esta sección del programa tiene como finalidad tomar todos los parámetros necesarios para generar una FG y mostrar los resultados obtenidos fácil y rápido.

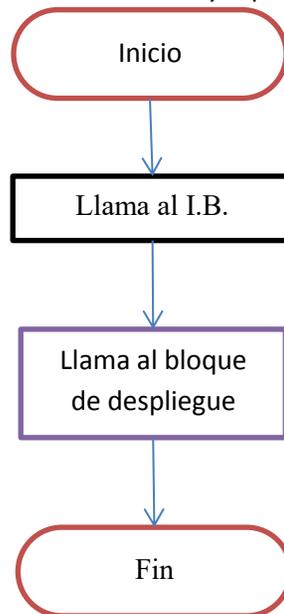


Figura II.4 Diagrama de flujo del bloque de construcción.

1. Inicio del bloque de construcción
2. Se llama al I.B.
3. El bloque de despliegue es llamado.
4. Fin del bloque de construcción.

Este bloque almacena la nueva información de las redes tomada desde la UI Llama al I.B. para procesar toda la información que se le brinda, para posteriormente llamar al bloque de despliegue.

II.3.4.1. Diagrama de flujo y pseudocódigo del proceso de creación de FG

El bloque de despliegue tiene la finalidad de hacer los cálculos finales necesarios y distribuir la información en las ventanas solicitadas para visualizar los resultados. En el despliegue se generan la ventana del Espacio Paralelo, que contiene las redes L_1 y L_2 , las O-Lattices, CSL y las P-Lattices y la ventana del Espacio Perpendicular, que contiene la DSC.

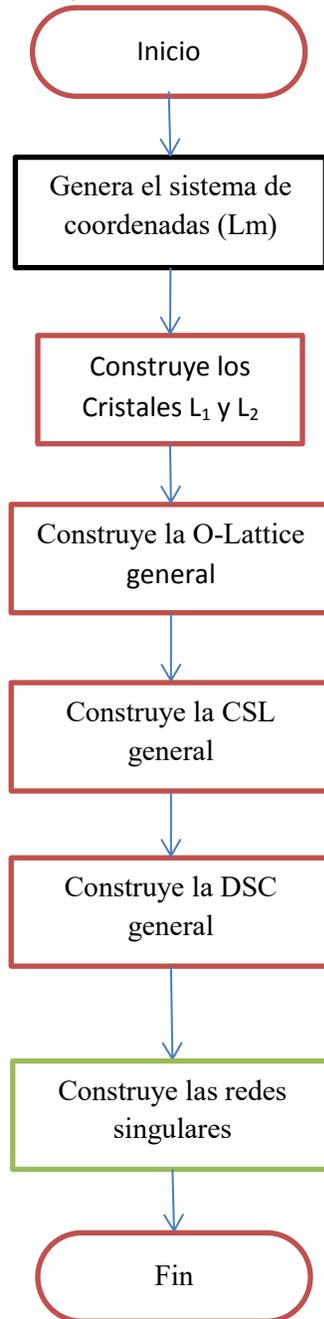


Figura II.5 Diagrama de flujo del proceso de creación de FG

1. Inicio de la construcción de la FG
2. Se construye el ángulo.
3. Generamos un elemento de control $i = 0$.
4. Se construye la red de coordenadas (L_m).
5. Se construyen las redes L_1 y L_2 .
6. Se construye la O-Lattice general (Bollmann).
7. Se construye CSL general si existe.
8. Se construye DSC general.
9. Se construyen las redes singulares.
10. Fin del bloque de construcción de la FG

Éste proceso es el núcleo del programa pues al generar la cadena de enteros permite al programa hacer todos los cálculos necesarios para crear y desplegar las FGs. Cuando una cadena contiene más de un elemento, el programa crea las redes de cada uno de los elementos.

II.3.4.1.1. Diagrama de flujo y pseudocódigo de la construcción de redes singulares

En conjunto con la generación de un ángulo como una cadena de enteros, las redes singulares forman parte de la singularidad del programa. El sub bloque de construcción de redes singulares genera por cada elemento de una cadena de enteros, las redes de la FG específicas para cada valor almacenado.

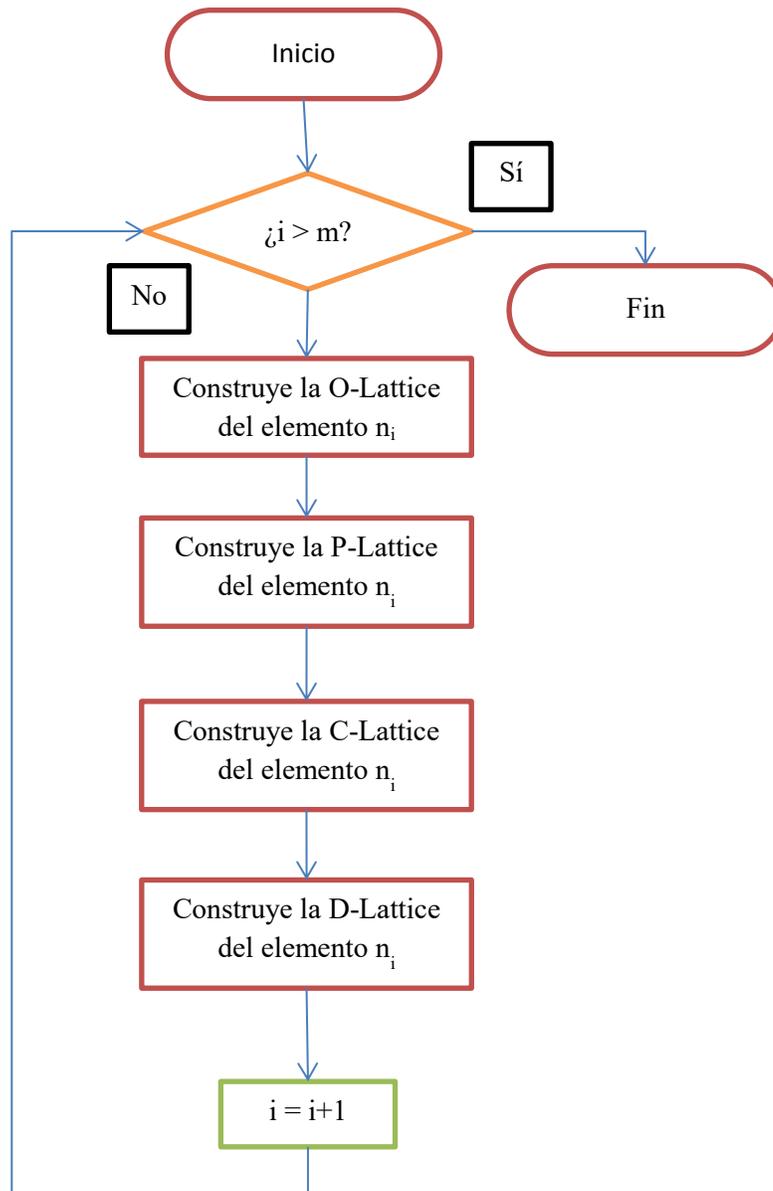


Figura II.6 Diagrama de flujo del sub bloque de construcción de redes singulares.

1. Inicio del sub bloque de construcción de redes singulares.
2. Si la cadena generada por la construcción del ángulo generó m elementos y el elemento de control $i > m$, se generan los siguientes pasos:
 - a. Se genera la O-Lattice del elemento i .
 - b. Se genera la CSL del elemento i .
 - c. Se genera la DSC lattice del elemento i .
 - d. Se genera la P-Lattice del elemento i .
 - e. Incrementamos en 1 el elemento de control.
 - f. Repetimos el punto 2.
3. Fin del sub bloque de construcción de redes singulares.

II.3.5. Diagrama de flujo y pseudocódigo del bloque de despliegue

En el bloque de despliegue existen dos procesos. El primer proceso construye las ventanas. El segundo despliega en las ventanas el contenido de cada una de las redes de la FG, dándole el control al usuario de los elementos que desea ver.

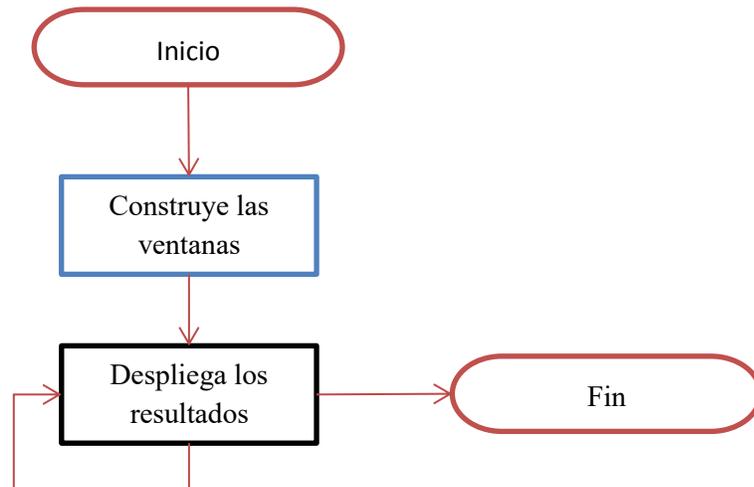


Figura II.7 Diagrama de flujo del bloque de despliegue.

1. Inicio del bloque de despliegue.
2. Se construyen las ventanas.
3. Si se solicitó en la UI, se muestra la ventana con los resultados básicos del espacio paralelo y la celda básica.
4. Si se solicitó en la UI, se muestra la ventana con los resultados del espacio perpendicular y la celda básica.
5. Despliegue de resultados con respecto a las peticiones del usuario
6. Fin del bloque de despliegue.

II.3.5.1. Pseudocódigo del proceso de despliegue de resultados

1. Inicio de la creación de ventanas de resultados.
2. Se espera interacción con el usuario dónde las opciones disponibles para el espacio paralelo son:
 - a. Borrar los datos de la ventana.
 - b. Graficar sitios de las redes L_1 y L_2 .
 - c. Graficar sitios de la FG
 - d. Graficar sitios de O-Lattice de Bollmann.
 - e. Graficar sitios de P-Lattice.
 - f. Graficar sitios de CSL general si existe.
 - g. Graficar la distancia entre puntos de L_1 y L_2 .
 - h. Graficar los enlaces entre sitios de L_1 y L_2 .
 - i. Graficar enlaces de la FG
 - j. Graficar enlaces de la O-Lattice.
 - k. Graficar enlaces de la P-Lattice.
 - l. Graficar enlaces de la CSL.
 - m. Graficar la celda básica.
 - n. Graficar enlaces de O-Lattice de orden i.
 - o. Graficar enlaces de P-Lattice de orden i.
 - p. Graficar enlaces de CSL de orden i.
 - q. Graficar celdas de la O-Lattice.
 - r. Graficar celdas de la P-Lattice.
 - s. Cambiar el color de los sitios de la O-Lattice por región.
 - t. Cambiar el color de los sitios de la P-Lattice por región.
3. Repetir el punto 2 tantas veces como requiera el usuario.
4. Fin de la creación de ventanas de resultados.

El módulo de creación de ventanas genera un objeto ventana con la información correspondiente al Espacio Paralelo y/o Perpendicular, dependiendo de si el usuario lo solicitó al ejecutar el bloque de construcción. Una vez generada la ventana, el usuario puede interactuar las veces que requiera para observar los resultados de la manera que lo solicite. Por ejemplo podría solicitar tanto las redes L_1 y L_2 , como la FG y los desplazamientos entre las redes L_1 y L_2 .

Capítulo III. Resultados

En este capítulo se describen los resultados de utilizar C# y XAML en la creación de la herramienta para la simulación de las FGs que denominaremos **GBLab**. Recordemos que **GBLab** ha sido creado con el objetivo de ayudar en la visualización de la estructura de las FGs. Dado que el formalismo propuesto en el capítulo I es un proceso recursivo, esta herramienta es necesaria para estudiar la evolución del modelo. Como veremos más adelante, esto permite la descripción de la estructura de las FGs con una precisión que antes no podía darse.

A continuación se describen las características básicas del programa y cada uno de los módulos que componen la aplicación, así como el tipo de resultados que arroja. Dado que se espera publicar este programa junto con los resultados que ha proporcionado, la interface del usuario se ha escrito en inglés.

III.1. Ventana Principal (Interface de Usuario)

La ventana principal consta de seis bloques funcionales (ver Figura III.1), siendo de izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, descritos a continuación.

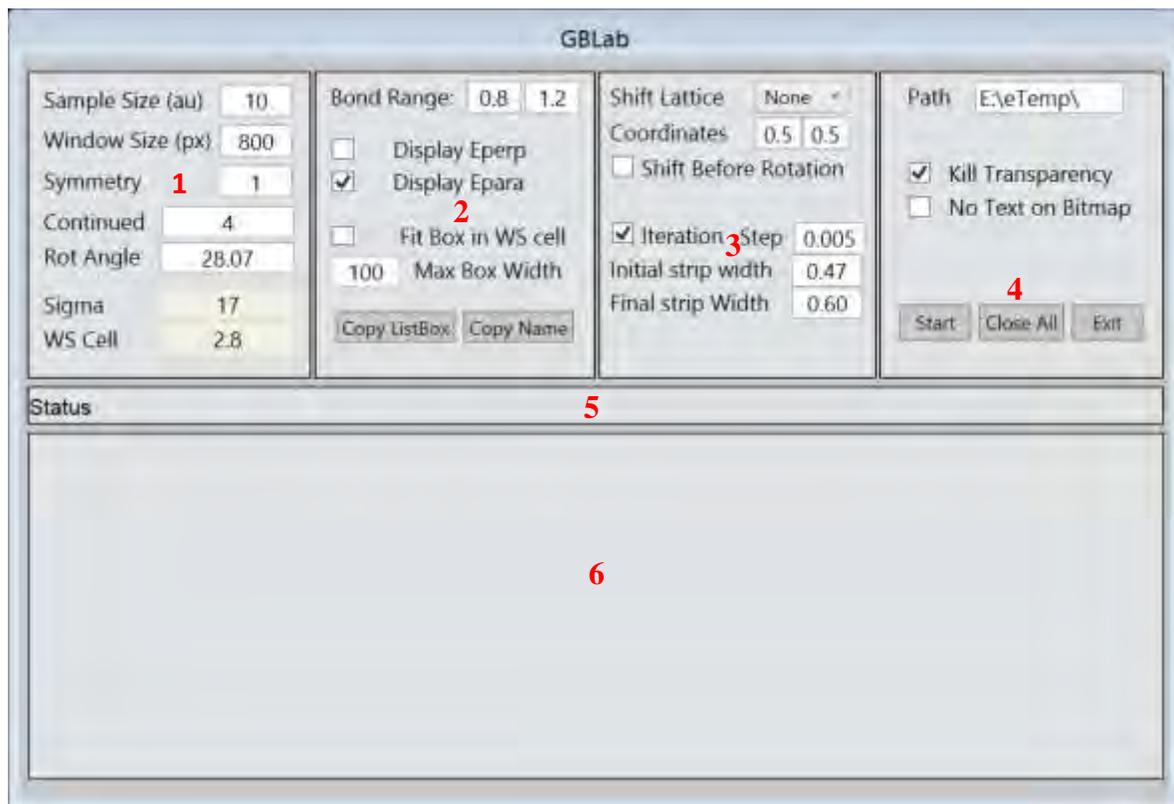


Figura III.1 Ventana principal de la herramienta GBLab.

III.1.1. Bloque Principal

El bloque principal (ver Figura III.2) contiene los parámetros que determinan el tipo de interface a simular que pueden ser modificadas por el usuario, así como parámetros informativos que son de utilidad para la elección un tamaño de ventana y/o muestra adecuados.

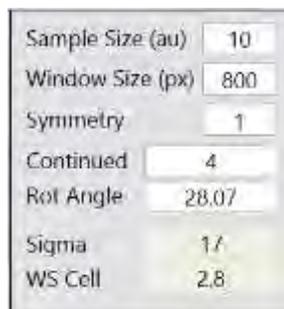


Figura III.2 Bloque principal de GBLab donde el usuario especifica lo parámetros de la interface que desea simular

Sample Size establece el tamaño de la interface en unidades atómicas (el programa asume una distancia interatómica unitaria) que se va a desplegar en pantalla. Un valor de 10 implica que una muestra simulada tiene un área de 10 x 10 distancias interatómicas. El valor por defecto en éste campo se estableció en 10.

Window Size establece el tamaño de la ventana (cuadrada) de despliegue en pixeles, aunque se pueden utilizar tamaños superiores, no es recomendado por la limitante física de los monitores actuales. El valor por defecto de éste campo fue establecido en 800 pixeles.

Symmetry establece la simetría con la que se va a simular la muestra. Un valor de 1 genera redes con simetría cuadrada mientras que un valor de 3 permite simular redes hexagonales (ver referencia 7).

Continued indica el valor de la cadena de enteros de la fracción continua usada para expresar el ángulo de rotación. Éste campo sólo permite enteros. El número de elementos ingresados indican el orden de aproximación al ángulo de la FG. Ingresar un solo entero, simularía una red singular. Al ingresar dos enteros, simularía una FG de segundo orden y así sucesivamente hasta llegar a cinco dígitos que es el máximo (modificable en el código) admitido por el programa que permite un precisión de milésimas de grado. El valor por defecto en éste campo es el número 4. Al ingresar cualquier valor, automáticamente se actualiza el valor de **Rot Angle** cuando el campo pierde el foco.

Rot Angle es el valor del ángulo de la FG que queremos simular. Debido a que técnicamente **Continued** y **Rot Angle** representan el mismo objeto, modificar uno actualiza el otro. Éste campo acepta valores de ángulos con decimales, con o sin signo. El valor por defecto establecido es 28.07.

Sigma es el número de celdas unidad de la red de referencia (L_m) que caben en la celda unidad de la red de sitios de coincidencia CSL (ver capítulo I). Sigma (Σ) es un valor informativo, por lo que el usuario no tiene acceso a modificarlo.

WS Cell es el tamaño en unidades atómicas de la celda unidad de la CSL que determina el período de la muestra. El programa dibuja la celda de Wigner Seitz de la CSL cuando **Sample Size** es mayor o igual a este valor. Éste tampoco es un valor que pueda modificar el usuario.

III.1.2. Bloque de Despliegue

En el bloque de despliegue (ver Figura III.3) se encuentran las siguientes opciones:



Figura III.3 Bloque de Despliegue de GBLab.

Bond Range: establece el rango de distancias en unidades atómicas que los sitios de E^{\parallel} deben tener para ser unidos mediante una línea recta y formar así la figura de alambre de la interface (ver Figura III.19).

Display Eperp activa el despliegue de la ventana del Espacio Perpendicular (E^{\perp}). Éste espacio contiene el conjunto de desplazamientos diferentes que hay en el campo de desplazamientos.

Display Epara activa el despliegue de la ventana del Espacio Paralelo (E^{\parallel}). Éste espacio contiene a las redes: L_1 , L_2 , L_m , E^{\parallel} , O-Lattice, P-Lattice y CSL.

Fit Box in WS cell es una opción que asigna automáticamente a **Sample Size** el valor del campo **WS Cell** bloque principal.

Max Box Width contiene el valor máximo que puede tomar el tamaño de la muestra, también depende del resultado obtenido en la **WS Cell** del bloque principal. Si el valor del campo **WScell** es mayor que el valor en esta casilla, el cálculo se suspende. Esto tiene por objeto impedir el cálculo de interfaces demasiado grandes, que podrían tener tiempos de ejecución de horas.

Copy ListBox es un botón que copia al portapapeles los resultados de la simulación, que se despliegan en el bloque de reporte (ver Figura III.8).

Copy Name es un botón que copia el nombre de la ventana E^{\parallel} y coloca esa información en el portapapeles.

III.1.3. Bloque de Desplazamiento e Iteración

El bloque de desplazamiento e iteración contiene los parámetros necesarios para desplazar las redes L_1, L_2 antes o después de rotarlas. Esto permite estudiar el efecto de trasladar una red respecto a la otra en la simetría del campo de desplazamientos (ver Figura III.4).

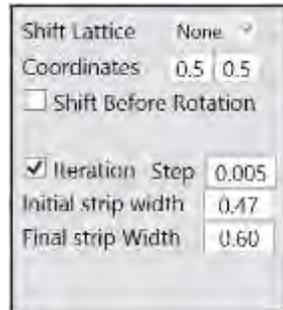


Figura III.4 Bloque de desplazamiento e iteración de GBLab.

Shift Lattice presenta las opciones para desplazar las redes proporcionando vectores base de las redes DSC, O-Lattice y L_m (ver Figura III.5).

Coordinates modifica el valor de las coordenadas a aplicar a la base seleccionada en el punto anterior.

Shift Before Rotation Si está seleccionado desplaza las redes antes de rotar. En caso contrario primero las rota y después las desplaza.

Iteration activa el proceso de proyección recursivo consistente en incrementar gradualmente el tamaño de la ventana (ver **Capítulo I**).

Step es el tamaño del incremento de la ventana iniciando con **Initial strip width**, y terminando en **Final strip width**.

El desplazamiento en las redes es importante debido que algunos desplazamientos en las redes L_1 y L_2 producen un cambio de simetría. Como se verá más adelante, este cambio de simetría se observa en las redes cuadradas de segundo orden y resulta fundamental para la comprensión de la estructura de las FGs.

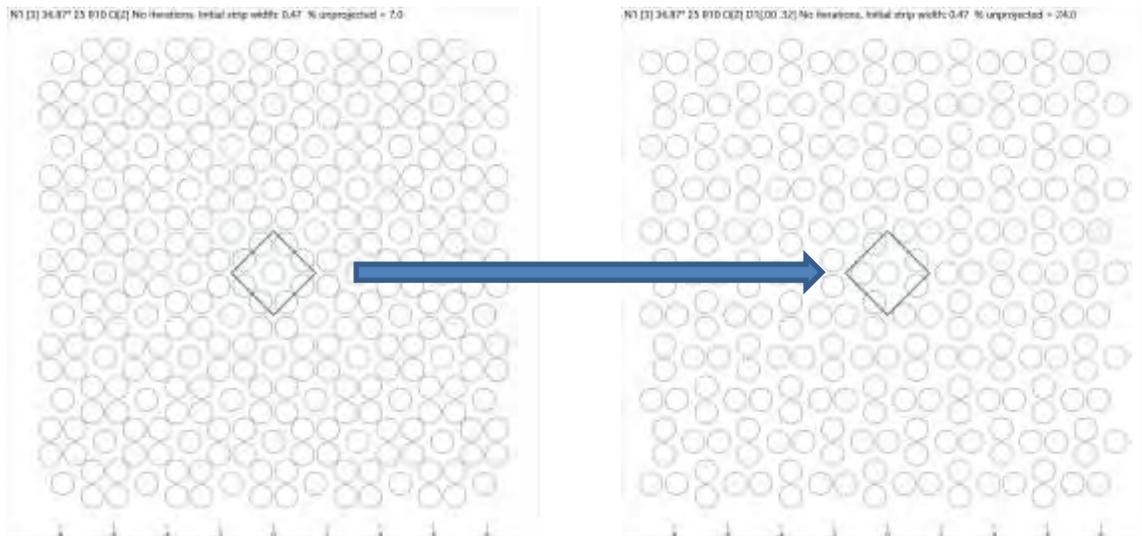


Figura III.5 Ejemplo de Desplazamiento usando la FG [3]. El desplazamiento de la figura está dado por 0.5 en X, 0.5 en Y.

III.1.4. Bloque de Ejecución y Exportación

El bloque de ejecución y exportación contiene todos los parámetros necesarios para poder exportar los resultados a un archivo de imagen en el directorio seleccionado, también incluye los botones necesarios para ejecutar la simulación, cerrar las ventanas generadas y salir de la aplicación.

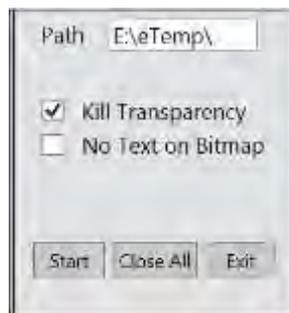


Figura III.6 Bloque de Ejecución y Exportación de GBLab.

Path contiene la ruta al directorio donde queremos guardar las imágenes, resultado de hacer la simulación.

Kill Transparency elimina el fondo transparente de las imágenes png para poder manipularlas en un futuro mediante un programa que procese imágenes.

No Text on Bitmap elimina el encabezado del resultado de la simulación.

Start es el botón que permite iniciar la simulación con los parámetros introducidos de los bloques 1 al 4 de la interface de usuario.

Close All es el botón que cierra todas las ventanas generadas a partir de la simulación.

Exit es el botón que permite salir de la aplicación.

III.1.5. Bloques de estado y reporte

El bloque de estado se tiene la funcionalidad de permitir al usuario ver que la aplicación está corriendo. Nos permite ver el tiempo que le toma al programa procesar toda la información introducida por el usuario hasta la generación de ventanas.



Figura III.7 Bloque de Estado de GBLab.

En el bloque de reporte se contiene toda la información del proceso de las FGs, desde la densidad de sitios en la celda unidad, hasta las iteraciones que se realizaron y cada uno de los resultados paso a paso durante la simulación.



Figura III.8 Bloque de Reporte de GBLab.

III.2. Ventana E^{\parallel}

Ésta ventana contiene los resultados del cálculo de la simulación de la FG. Despliega las redes: E^{\parallel} , L_1 , L_2 , O-Lattice, P-Lattice, CSL, L_m . Cada una con diferentes opciones que se verán más adelante. El título de la ventana refleja: “{Tipo de ventana} N {valor de **Symmetry**} [{valor de **Continued**}] {valor de **Rot Angle**}° Σ{valor de **Sigma**}” (ver Figura III.9). Para las siguientes figuras, se tomó un ángulo expresado en fracciones continuas [3].

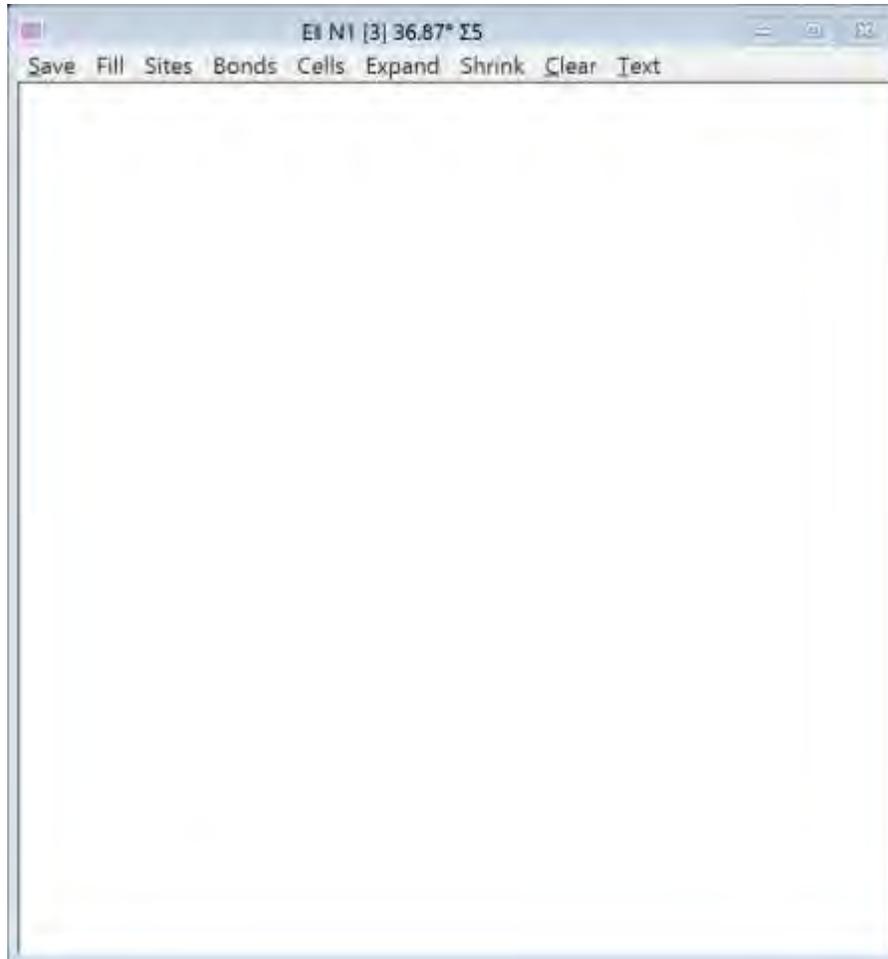


Figura III.9 Ventana de resultados E^{\parallel} .

III.2.1. Menú Save

El Menú Save (ver Figura III.10) contiene todas las opciones de exportar los resultados obtenidos en diversos formatos de imagen y también guarda un archivo de texto con toda la información de la simulación en curso (ver Figura III.11). El nombre de los archivos que se guardan por medio de éste menú se forma de: "N {valor de **Symmetry**} [{valor de **Continued**}] {valor de **Rot Angle**}° Σ{valor de **Sigma**} B{valor de **Sample Size**} Ω[{valor de omega}]i {ventana que realiza la petición}."



Figura III.10 Menú Save de E^{\parallel} .

Log File almacena un archivo de texto con la información arrojada en el bloque de reporte.

Xaml permite la exportación de los resultados de la simulación en un formato Xaml, compatible con el navegador de internet y diversos programas de procesamiento de imágenes.

Png exporta directamente el resultado de la simulación a un archivo de imagen png, con la calidad más alta y con los elementos completamente disponibles para su manipulación con un procesador de imágenes.

Jpg almacena el resultado de la simulación en una sólida imagen comprimida para que ocupe el menor espacio posible.

Epar|Eperp almacena el resultado de la simulación tanto de la ventana de E^{\parallel} , como de E^{\perp} en una sola imagen png

Nombre	Tipo
N1 [3] 36.87° 15 B10 Q(2)ll	Documento de texto
N1 [3] 36.87° 15 B10 Q(2)ll	Archivo de marcado de Windows
N1 [3] 36.87° 15 B10 Q(2)ll	Archivo PNG
N1 [3] 36.87° 15 B10 Q(2)ll	Archivo JPG
N1 [3] 36.87° 15 B10 Q(2)ll	Archivo PNG

Figura III.11 Ejemplo de archivos exportados por el Menú Save de E^{\parallel} .

III.2.2. Menú Fill

El Menú Fill (ver Figura III.12) contiene los modificadores de color para los resultados de la simulación de E^{\parallel} (ver Figura III.13).

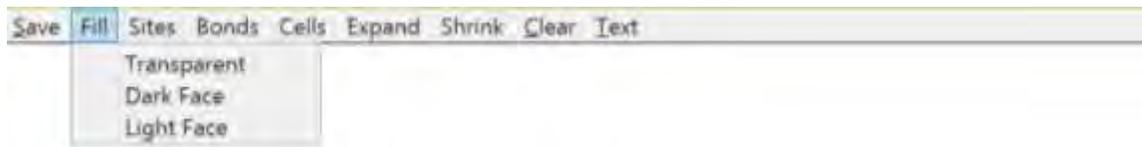


Figura III.12 Menú Fill de E^{\parallel}

Transparent quita el relleno de los sitios de E^{\parallel} en el despliegue de la simulación.

Dark Face llena los sitios de E^{\parallel} de un color verde oscuro, para el despliegue de resultados.

Light Face colorea los sitios de E^{\parallel} de un color rosa claro, para la visualización de resultados.

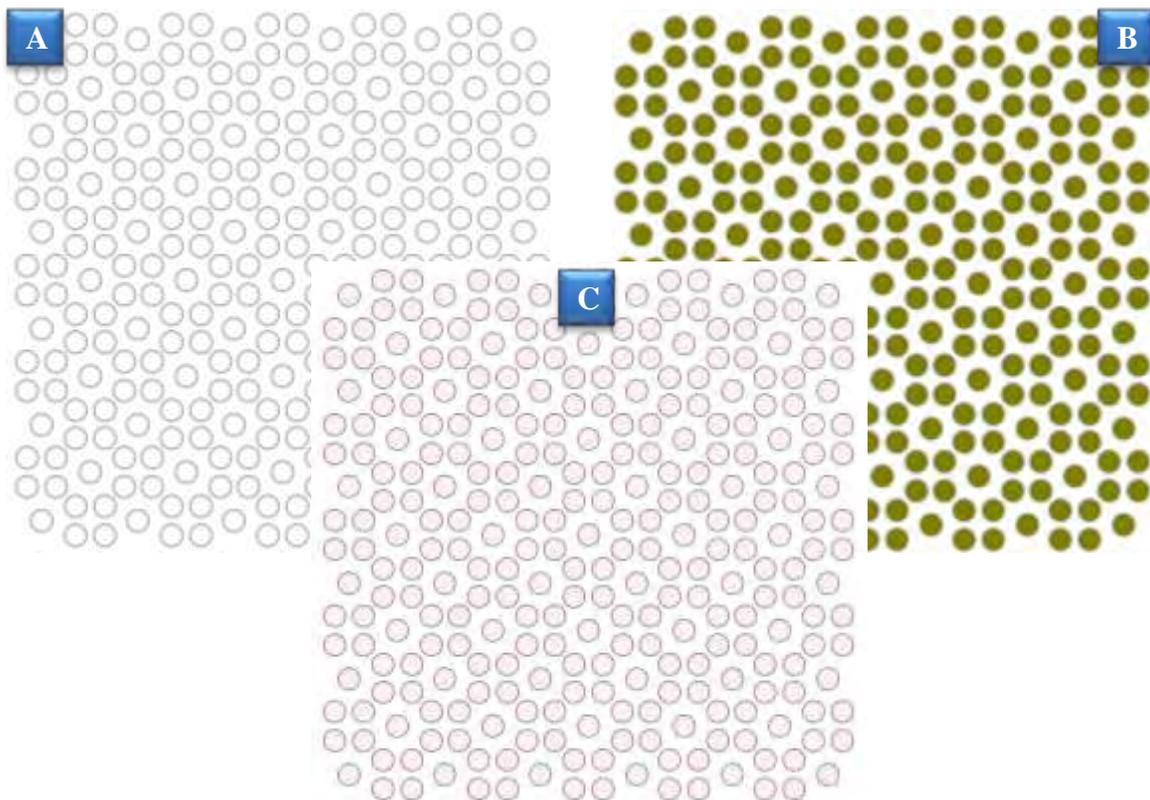


Figura III.13 Efecto de los modificadores del Menú Fill en E^{\parallel} . A demostrada el modificador Transparent, B muestra modificador Dark Face y C en color rosa claro aplica el modificador Light Face.

III.2.3. Menú Sites

El Menú Sites (ver Figura III.14), contiene los modificadores de despliegue de las FG para visualizar los sitios de las redes de la FG que se requieran observar. Las redes se encuentran agrupadas por el orden de la FG. Basic Lattices contiene la red mediana (L_m) y las redes L_1 y L_2 , O-Lattice contiene todas las O-Lattices, Phason Lattice contiene las P lattices y CSL contiene todas las CSL.

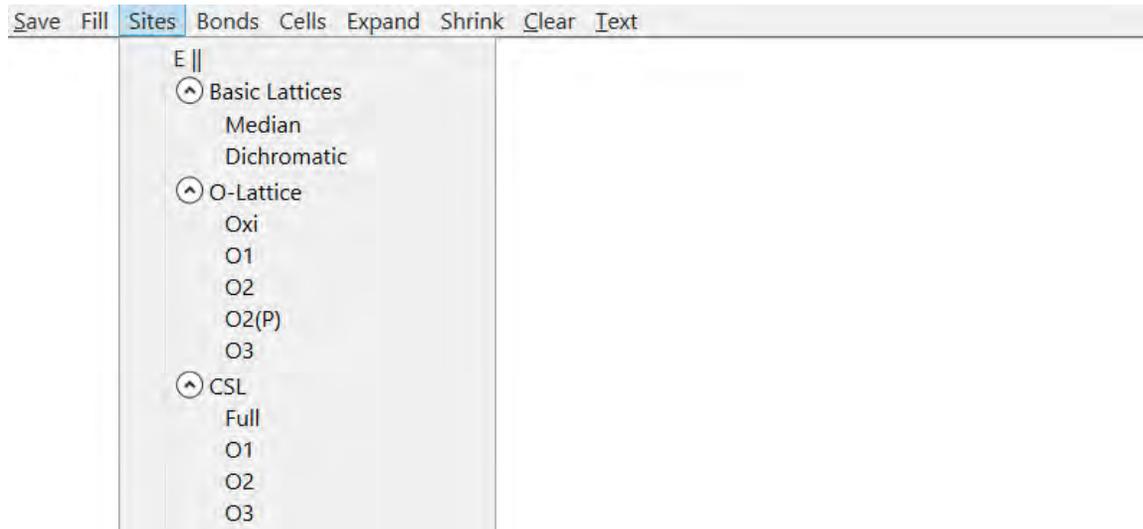


Figura III.14 Menú Sites en E^{\parallel} .

E^{\parallel} despliega los sitios de la red E^{\parallel} en la ventana (ver Figura III.15.C).

Median en **Basic Lattices** despliega los sitios de la red L_m en pantalla (ver Figura III.15.A).

Dichromatic en **Basic Lattices** imprime en pantalla los sitios de las redes L_1 y L_2 (ver Figura III.15.B).

Oxi en **O-Lattice** despliega en pantalla los sitios de la O-Lattice calculados con la ecuación (15) (ver Figura III.15.D).

O₁ en **O-Lattice** despliega los sitios de la O-Lattice de orden 1.

O₂(P) en **O-Lattice** despliega los sitios de la P-Lattice de orden 2.

O₃ en **O-Lattice** despliega los sitios de la O-Lattice de orden 3.

O₁ en **CSL** despliega los sitios de la CSL de orden 1 (ver Figura III.15.F).

O₂ en **CSL** despliega los sitios de la CSL de orden 2.

O₃ en **CSL** despliega los sitios de la CSL de orden 3.

Full en CSL despliega los sitios de la CSL calculados con la ecuaciones (15) y(11).

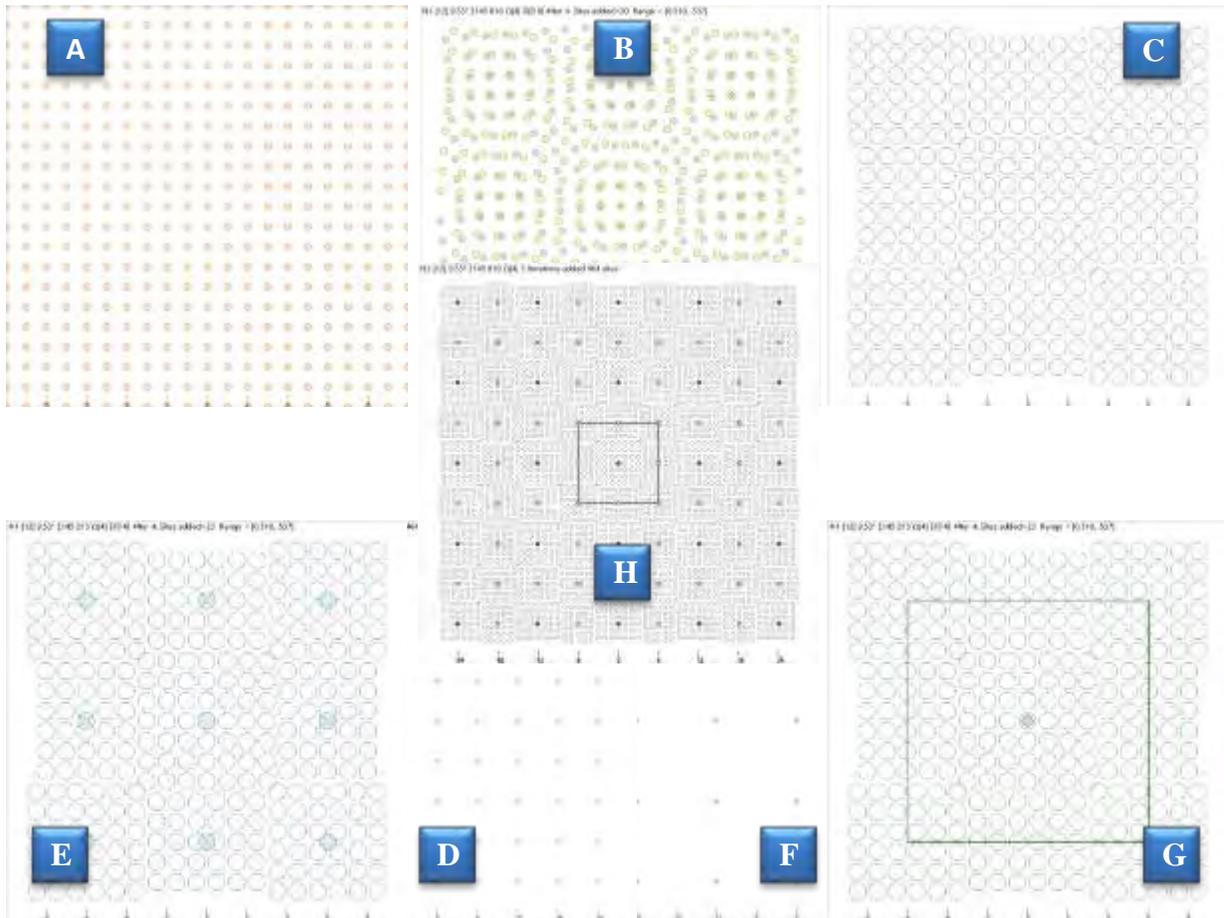


Figura III.15 Ejemplos Menú Sites en E^{\parallel} usando la FG [12]. A corresponde a la red mediana (L_m), mostrada por la opción Median en Sites. B corresponde a los sitios de las redes L_1 y L_2 , desplegadas por la opción Dichromatic en Sites. D muestra los sitios de la O-Lattice impresa en pantalla por la opción Bollman's en la pestaña O-Lattice. E muestra las opciones E^{\parallel} y Bollman's impresas en pantalla. F despliega la CSL obedeciendo a la petición de la opción Order 1 en la pestaña CSL. Las figuras mostradas corresponden a una FG [12], el tamaño de la muestra para los casos A, B, C, E y G es 10. Para los casos D, F y H se usó una muestra de tamaño 30.

Cuando una red tiene un orden mayor a uno, van cambiando los puntos de las redes O-Lattice y CSL conforme a la cercanía con el ángulo que se quiere simular. Se obtienen diferentes puntos de las redes mencionadas. Según el orden de FG, serán las etapas que tenga el cálculo y con ello diferentes redes de O-Lattice (ver Figura III.15 y Figura III.16) y CSL. Debido a éste cálculo, se obtienen O-Lattices y CSL de orden 2, orden 3, etc.

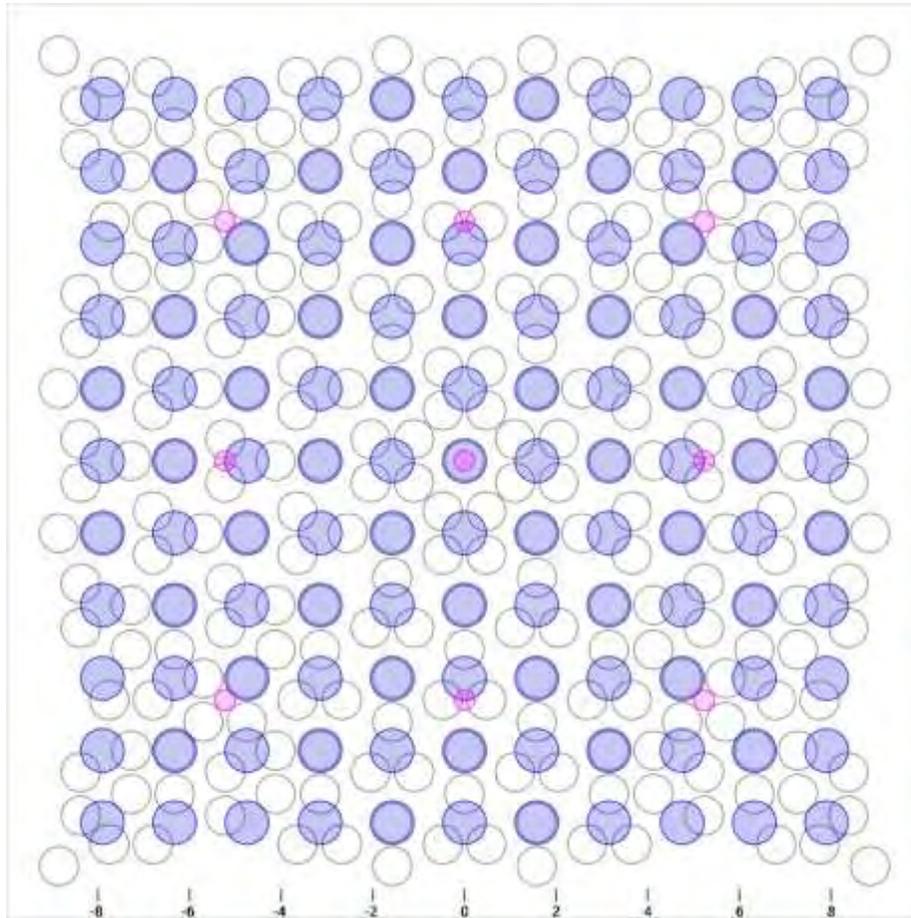


Figura III.1 Ejemplo Menú Sites usando la FG [12]. En rosa se muestra la O-Lattice parcial de segundo orden $O_2(P)$ y en azul, la O-Lattice de primer orden O_1 .

III.2.4. Menú Bonds

En el Menú Bonds se almacenan los modificadores que despliegan los enlaces entre los sitios de cada una de las redes en una FG. Contenidos también encontramos el conjunto de desplazamientos efectuados en cada sitio de la FG (ver Figura III.17).

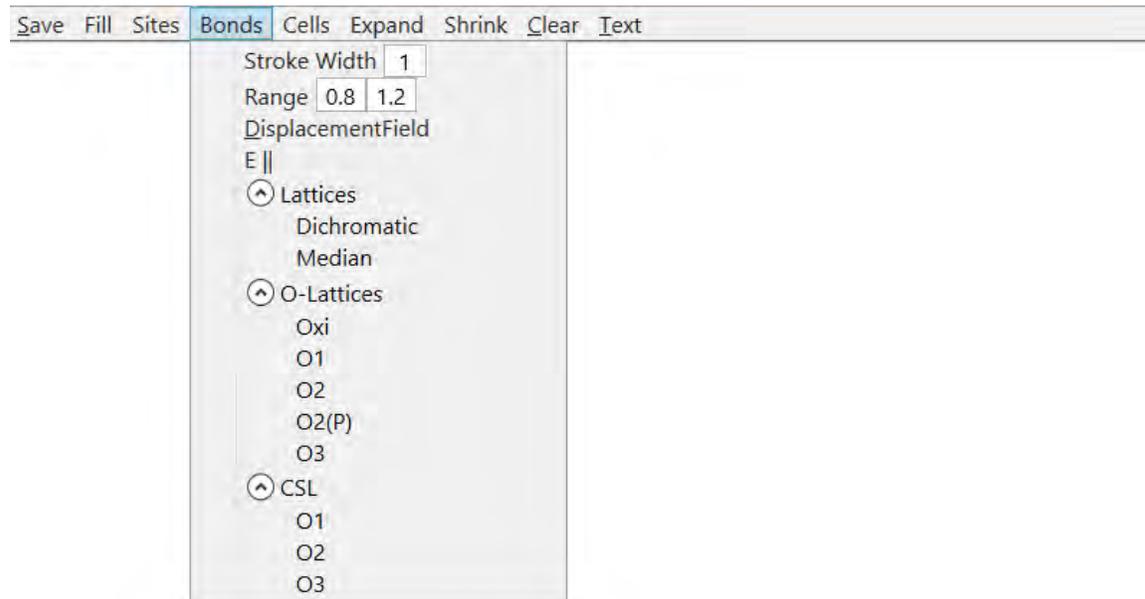


Figura III.17 Menú Bonds en E^{\parallel} .

Stroke Width modifica el ancho de la línea de los enlaces a desplegar.

Range altera la sensibilidad del cálculo de enlaces cercanos, el primer número representa la distancia mínima a tomar en cuenta y el segundo número representa la distancia máxima a considerar. Éste modificador también se encuentra en la **UI**, en el **Bloque de Despliegue**.

Displacement Field despliega el campo de desplazamientos, es decir, el conjunto de vectores que unen sitios de las redes L_1 y L_2 (ver Figura III.18.A).

E^{\parallel} despliega la figura de alambre de la red E^{\parallel} , mostrando los enlaces entre los sitios de esta red (ver Figura III.19).

Dichromatic en **Lattices** despliega las redes L_1 y L_2 en figura de alambre (ver Figura III.18.D).

Median en **Lattices** imprime en pantalla todos los enlaces entre los sitios de la red mediana L_m (ver Figura III.18.C).

Oxi en **O-Lattice** despliega en pantalla los enlaces de los sitios de la O-Lattice calculados con la ecuación (15) (ver Figura III.18.E).

O_1 en **O-Lattice** despliega los enlaces de los sitios de la O-Lattice de orden 1.

$O_2(P)$ en **O-Lattice** despliega los enlaces de los sitios de la P-Lattice de orden 2.

O_3 en **O-Lattice** despliega los enlaces de los sitios de la O-Lattice de orden 3.

O_1 en **CSL** despliega los enlaces de los sitios de la CSL de orden 1 (ver Figura III.18.G).

O_2 en **CSL** despliega los enlaces de los sitios de la CSL de orden 2.

O_3 en **CSL** despliega los enlaces de los sitios de la CSL de orden 3.

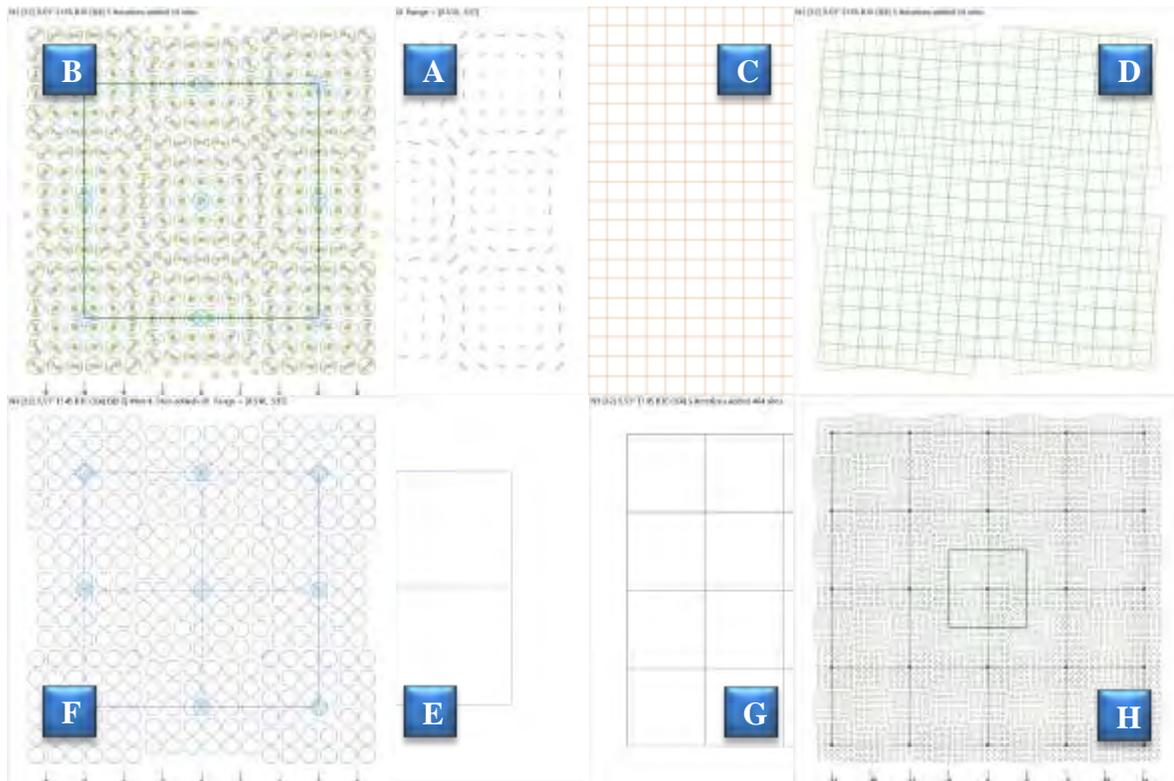


Figura III.18 Ejemplos Menú Bonds en E^{II} usando la FG [12]. A corresponde al campo de desplazamientos desplegado por Displacement Field. B muestra Displacement Field en conjunto con los sitios de E^{II} , los sitios de L_1 y L_2 . C muestra la figura de alambre generada por L_m dada por la opción Median en Lattices. D corresponde al despliegue de las redes L_1 y L_2 generado por Dichromatic en Lattices. E es la O-Lattice desplegada por la opción Oxi en O-Lattice. F muestra la O-Lattice en conjunto con los sitios de E^{II} . G corresponde a la CSL desplegada por Order 1 en CSL. H es el resultado de mostrar la CSL en conjunto con los sitios de E^{II} . En los casos de A hasta E, el tamaño de muestra usado es 10 y en G y H, se usa un tamaño de muestra 30.

El campo de desplazamientos de la FG, puede verse explícitamente mediante la función DisplacementField, dónde los puntos con un desplazamiento cero dan lugar a un O-Point y esto genera la O-Lattice. La O-Lattice a su vez nos ayuda a encontrar la CSL y con ello encontrar todas las propiedades de una FG.

Las opciones del Menú Bonds nos muestran las estructuras que van formando los enlaces entre los sitios de las redes y los desplazamientos de las FGs.

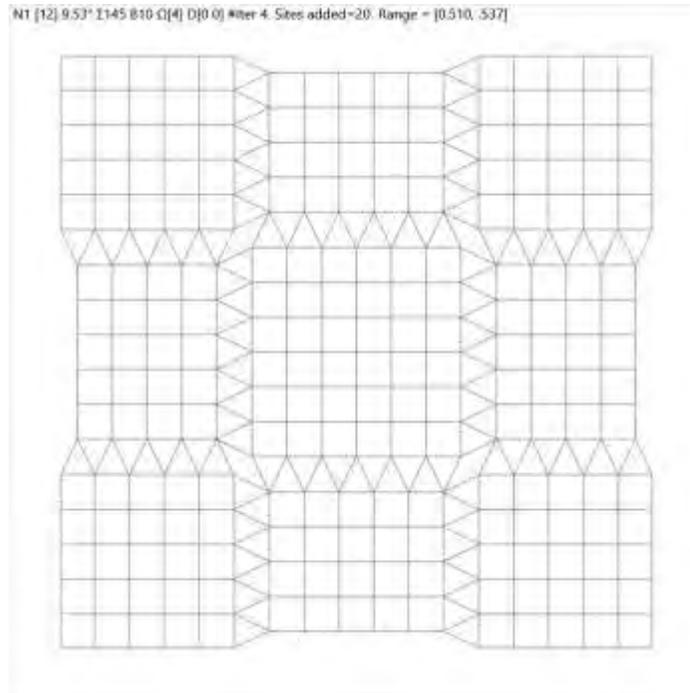


Figura III.19 Ejemplo Menú Bonds de E^{\parallel} usando la FG [12] - Figura de alambre de E^{\parallel} .

III.2.5. Menú Cells

En el Menú Cells se encuentran los modificadores que despliegan celdas de las O-Lattices, P-Lattices y CSLs. Además de lo anterior, cuenta con una opción para mostrar la celda unidad de la FG. Las celdas intercambian los centros por vértices (ver Figura III.20).

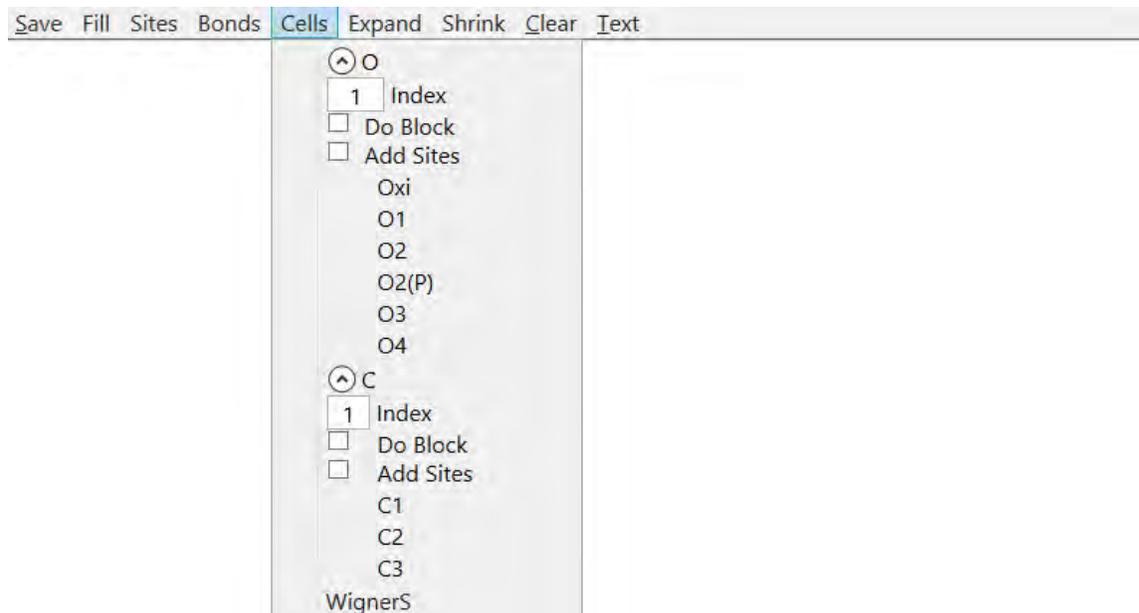


Figura III.20 Menú Cells de E^H .

Index de **O**, indica la cantidad de bloques adicionales de celdas de O-Lattice se van a desplegar en pantalla.

Do Block de **O** activa el despliegue de bloques de las celdas de la O-Lattice.

Add Sites cambia el color de los sitios, según el bloque en el que se encuentren.

Oxi de **O** despliega la celda de la O-Lattice calculada con la ecuación (15). Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la O-Lattice.

O₁ de **O** despliega la celda de la O-Lattice de orden 1. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la O-Lattice de primer orden.

O₂ de **O** despliega la celda de la O-Lattice de orden 2. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la O-Lattice de segundo orden.

O₂(P) de **O** despliega la celda de la P-Lattice de orden 2. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la O-Lattice de segundo orden.

O₃ de **O** despliega la celda de la O-Lattice de orden 3. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la O-Lattice de tercer orden.

O₄ de **O** despliega la celda de la O-Lattice de orden 4. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la O-Lattice de cuarto orden.

Index de **C**, indica la cantidad de bloques adicionales de celdas de CSL se van a desplegar en pantalla.

Do Block de **C** activa el despliegue de bloques de las celdas de la CSL.

Add Sites cambia el color de los sitios, según el bloque en el que se encuentren.

C₁ de **C** despliega la celda de la CSL de orden 1. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la CSL de primer orden.

C₂ de **C** despliega la celda de la CSL de orden 2. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la CSL de segundo orden.

C₃ de **C** despliega la celda de la CSL de orden 3. Si la opción **Do Block** se encuentra activada, realiza el despliegue de los bloques de celdas de la CSL de tercer orden.

Wigner S imprime la celda unidad de la FG.



Figura III.21 Ejemplos Menú Cells de E^{\parallel} usando la FG [12]. A corresponde a la celdas principales de la O-Lattice desplegadas por Oxi en la pestaña O. B es ejemplo de celdas de O-Lattice en contraste a la O-Lattice. C es ejemplo de celdas de O-Lattice en contraste a la O-Lattice. Y los sitios de E^{\parallel} . D corresponde a las celdas de la O-Lattice con los sitios de E^{\parallel} . E muestra las celdas de la O-Lattice con la opción Add Sites, que cambia el color de los sitios de E^{\parallel} dependiendo de la región donde se encuentren.

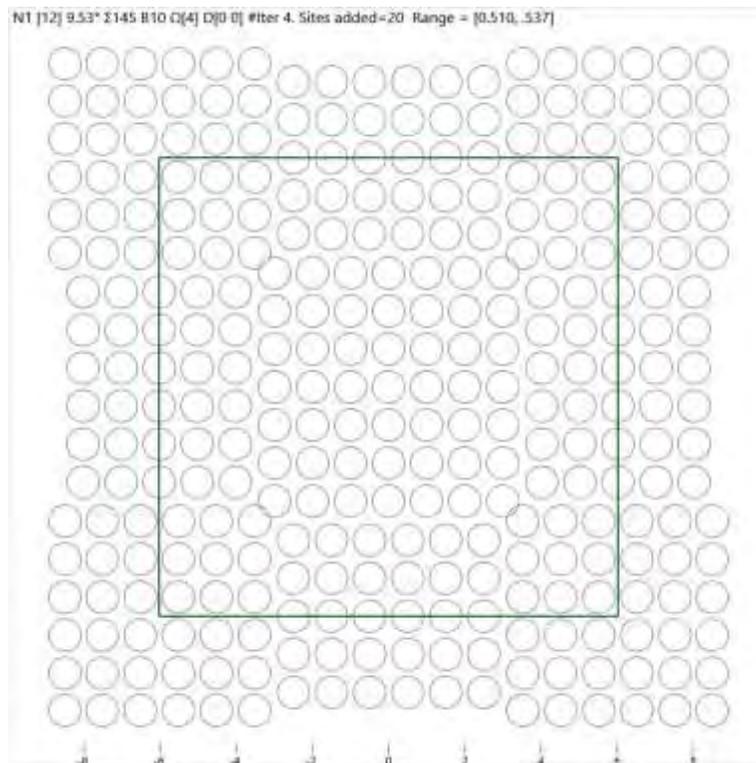


Figura III.22 Ejemplo Menú Cells de E^h usando la FG [12] - Celda de Wigner Seitz.

Las celdas de una O-Lattice muestran la ubicación de las dislocaciones en la FG. Mientras mayor sea el orden de una FG, mayor será el número de dislocaciones que se encuentren en ella. Es por ello que calcular las celdas es una de las herramientas más importantes de éste programa.

Graficar las celdas de la CSL, despliega la celda unidad de una FG y con ello muestra el cambio entre el acomodo de los sitios en la red y el orden de la FG simulamos.

III.2.6. Controles Extras

Los controles restantes en la Barra de Menú dentro de la ventana de E^{\parallel} sirven para alterar la presentación de los sitios de las redes de la FG, limpiar la pantalla e incluso agregar el texto descriptivo en la parte superior de la misma (ver Figura III.23).

Expand Shrink Clear Text

Figura III.23 Controles Extras en E^{\parallel} .

Expand aumenta el radio de las circunferencias que representan los sitios de la FG (ver Figura III.24).

Shrink disminuye el radio de las circunferencias representando los sitios de la FG (ver Figura III.24).

Clear limpia la pantalla.

Text activa el texto descriptivo en la parte superior de la simulación.

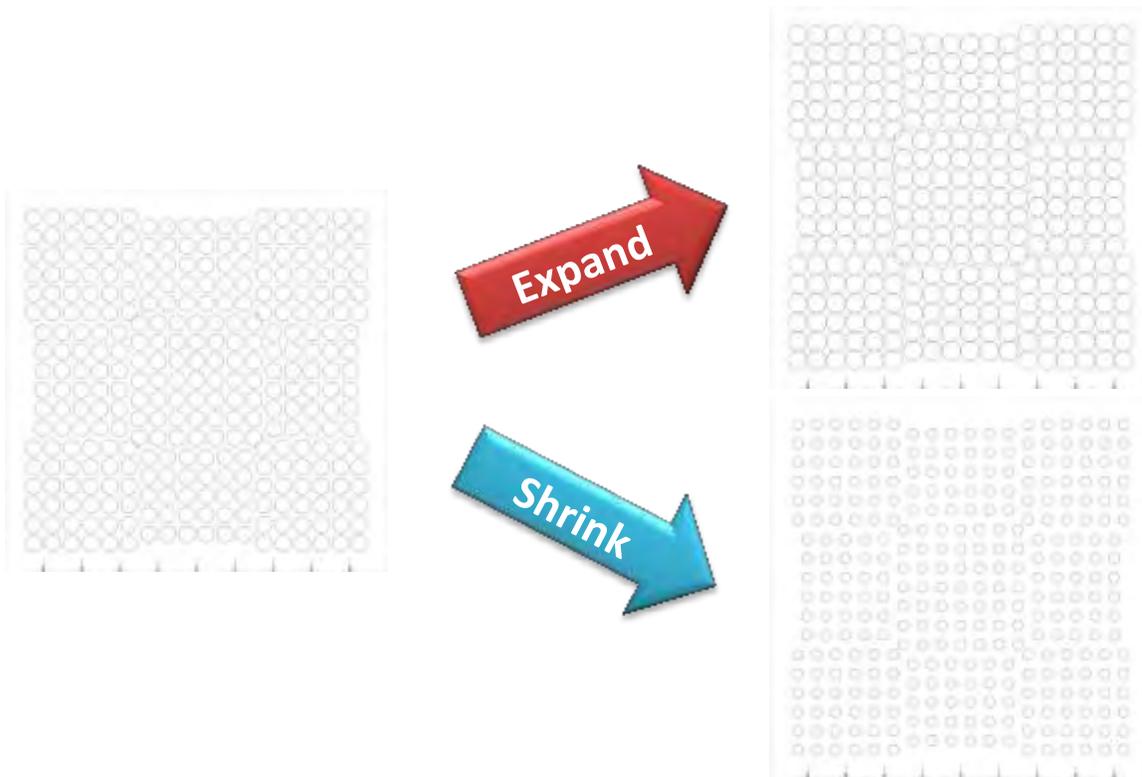


Figura III.2 Ejemplos Controles Extra en E^{\parallel} usando la FG [12]. En la parte superior derecha, E^{\parallel} aplicando el botón Expand. En la parte inferior derecha, E^{\parallel} apretando el botón Shrink.

III.3. Ventana E^\perp

Esta ventana contiene los resultados del cálculo de la simulación de la FG. Despliega la red E^\perp . El título de la ventana refleja: “{Tipo de ventana} N {valor de **Symmetry**} [{valor de **Continued**}] {valor de **Rot Angle**}° Σ{valor de **Sigma**}” (ver Figura III.25).

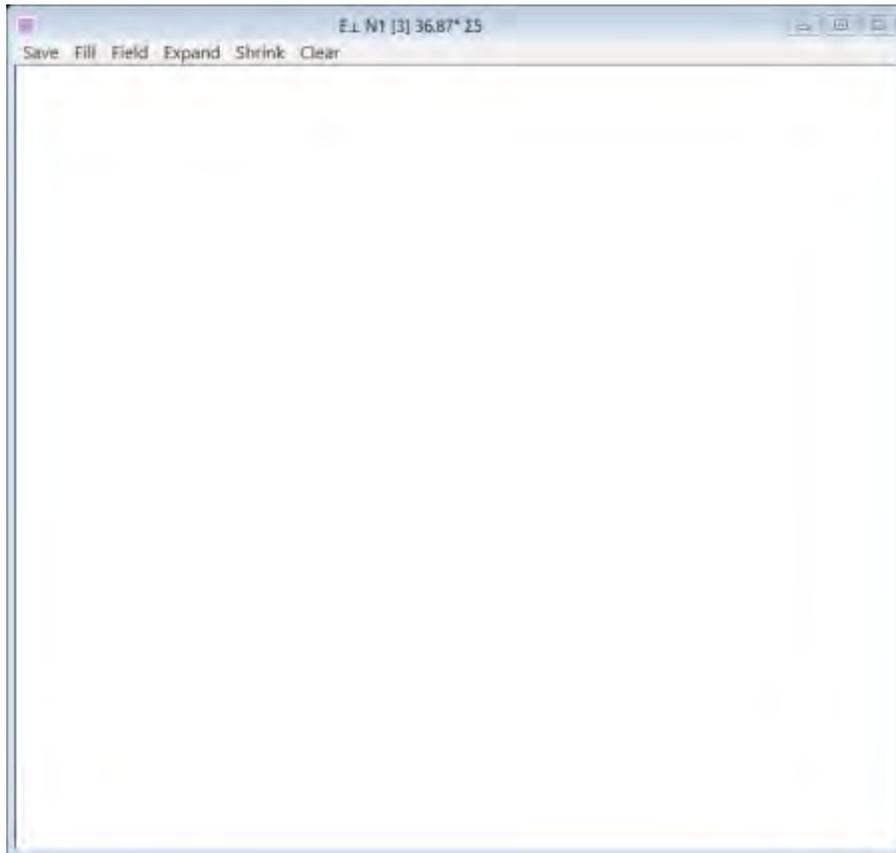


Figura III.25 Ventana de resultados E^\perp .

III.3.1. Menú Save

El Menú Save (ver Figura III.26) contiene las mismas opciones que la ventana de E^\perp . Este menú al guardar los datos de la simulación, estará guardando la información de la DSC.

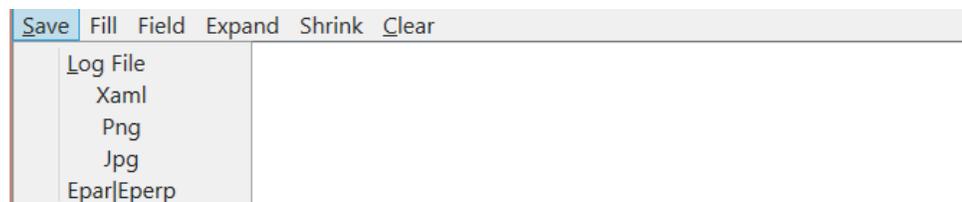


Figura III.26 Menú Save de E^\perp .

III.3.2. Menú Fill

El Menú Fill (ver Figura III.27) contiene los mismos modificadores de color que resultados de la simulación de E^{\parallel} .



Figura III.27 Menú Fill de E^{\perp} .

III.3.3. Menú Field

El Menú Field cuenta con la opción Redraw, que vuelve a desplegar el resultado de calcular la red DSC (ver Figura III.28).



Figura III.28 Menú Field de E^{\perp} .

III.3.4. Controles Extras

Los controles restantes en la Barra de Menú dentro de la ventana de E^{\perp} sirven para alterar la presentación de los sitios de las redes de la FG, limpiar la pantalla al igual que en la ventana de E^{\parallel} (ver Figura III.29).

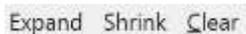


Figura III.29 Controles Extras en E^{\parallel} .

III.4. Resultados del programa

Teniendo una familia de FGs con base en la Frontera Singular [3], se analizó cada uno de los resultados que nos arroja el programa, como veremos a continuación.

III.4.1. Frontera Singular

La **frontera singular** con parámetro de rotación [3] ésta dada por un **ángulo** de **36.87°**, la simetría, dada por **N=1** es cuadrada; el número índice Σ , o lo que es lo mismo, el número de celdas unidad de la red mediana L_m que hay dentro de una celda de la CSL (celda unidad) es **5** y el número de O-Points dentro de esta (que llamaremos Ω) es **2**. El tamaño de la muestra elegida fue de **3** celdas unidad L_m para poder ver a detalle nuestra FG.

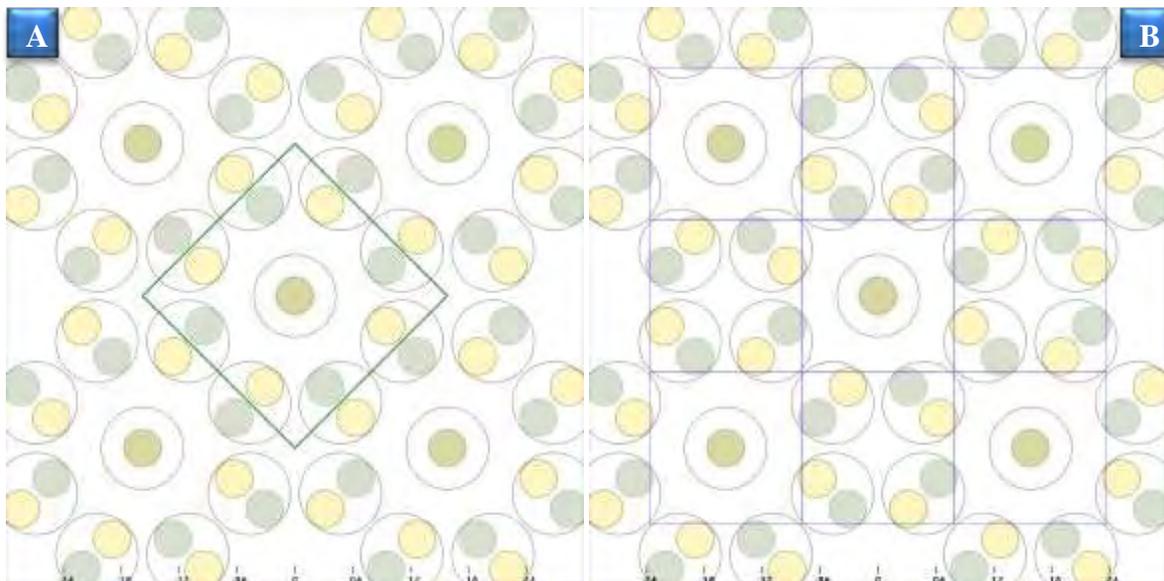


Figura III.30 Caso de Estudio FG [3]. A muestra el patrón dicromático de la FG, la red E^{\parallel} , junto con su celda unidad. B despliega las celdas de la O-Lattice indicando las dislocaciones que se encuentran en la FG.

En la Figura III.30, podemos observar a los sitios de E^{\parallel} separados por dislocaciones y estas se encuentran en un punto medio entre los O-Points, como se puede ver en la Figura III.31.

Los puntos de la CSL claramente pueden verse en las celdas de la O-Lattice con un solo sitio demostrando que algunos sitios pueden ser simultáneamente O-Points y puntos de la CSL como se ve en la Figura III.31.

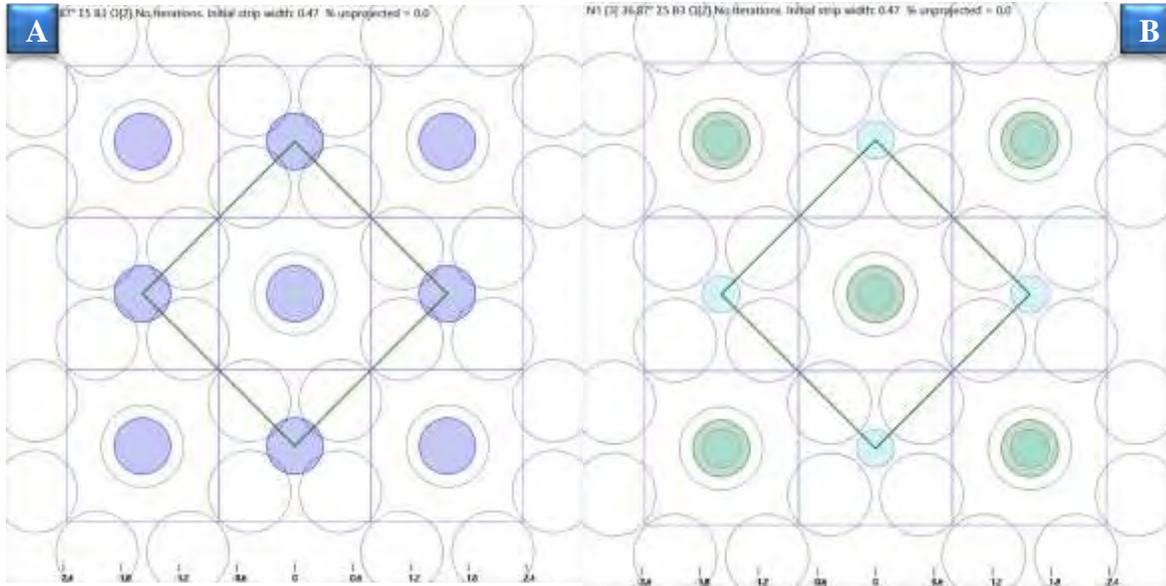


Figura III.31 Caso de Estudio FG [3] - O-Points y puntos de CSL. A muestra la celda de la O-Lattice, junto con la celda de la CSL y solamente los puntos de la O-Lattice en conjunto con los sitios de E^{\parallel} . B muestra la celda de la O-Lattice, junto con la celda de la CSL y los puntos de la O-Lattice y CSL, en conjunto con los sitios de E^{\parallel} . Los sitios de la O-Lattice pueden verse en color azul, mientras que los de la CSL son de color verde y de mayor tamaño en la figura.

El campo de desplazamientos fácilmente podemos observarlos con Displacement field, que para nuestra frontera singular [3] no es muy relevante, debido a que los desplazamientos tienen las mismas magnitudes entre los sitios como se puede ver en la Figura III.32.

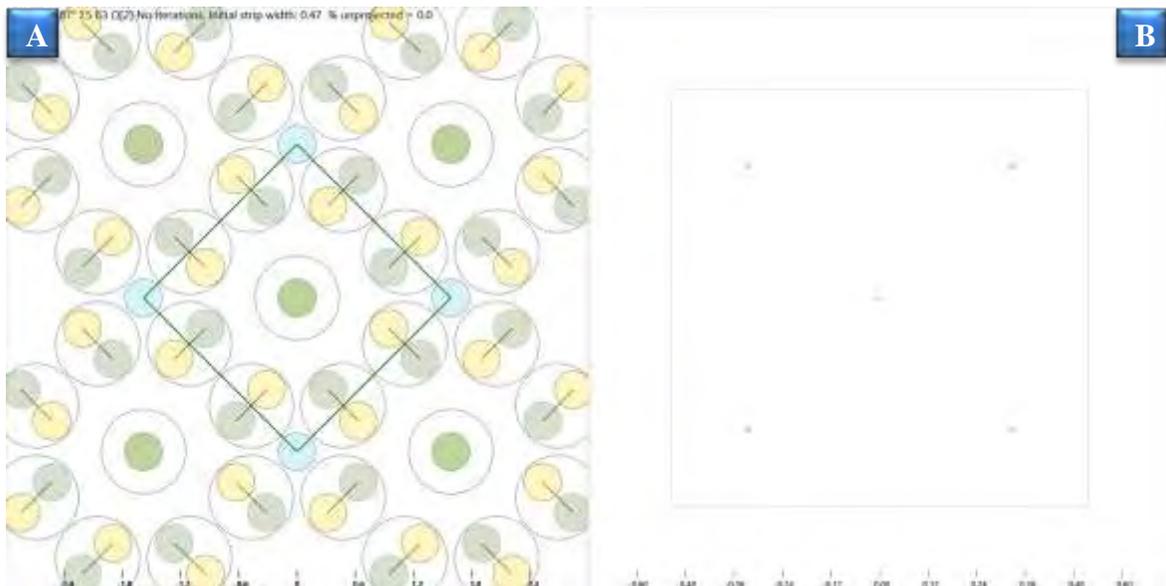


Figura III.32 Caso de Estudio FG [3] – Displacement field y DSC. En A, encontramos el patrón dicromático dado por las redes L_1 y L_2 , formando un conjunto de desplazamientos. En B identificamos los desplazamientos únicos formando la red DSC.

En la Figura III.33 podemos ver que, uniendo los sitios de E^{\parallel} , formamos patrones singulares fácilmente identificables, que en las fronteras singulares se repiten una y otra vez sin tener algún cambio.

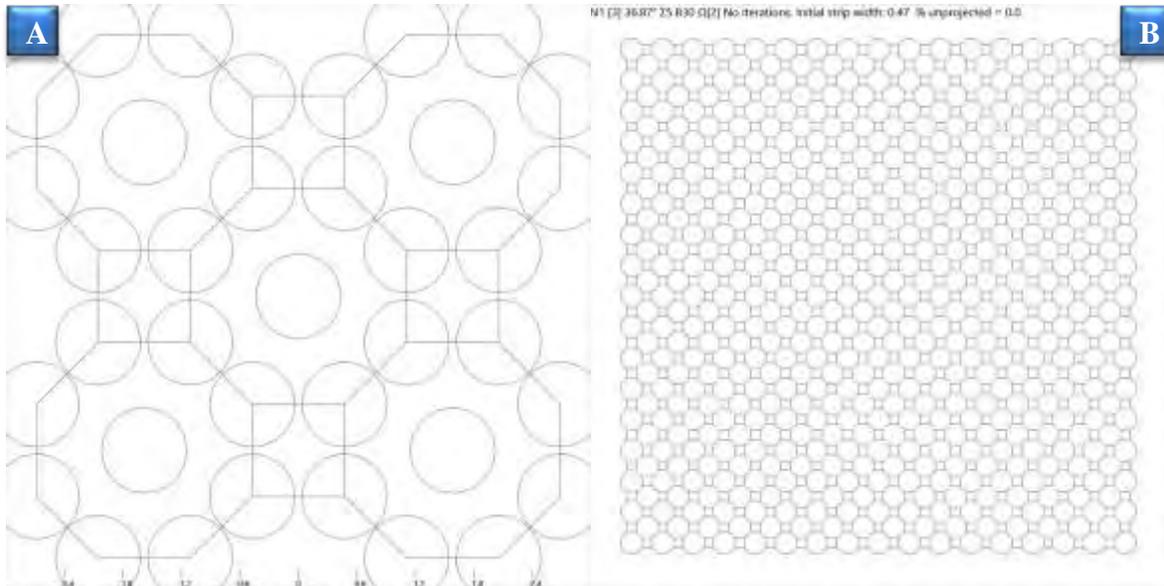


Figura III.33 Caso de Estudio FG [3] - Figura de alambre. A se simuló con un tamaño de la muestra es 3. En B el tamaño de la muestra es 30.

De la misma manera uniendo los sitios de las redes O-Lattice y CSL, podemos observar como el acomodo de los sitios se realiza en la FG [3], como muestra la Figura III.34.

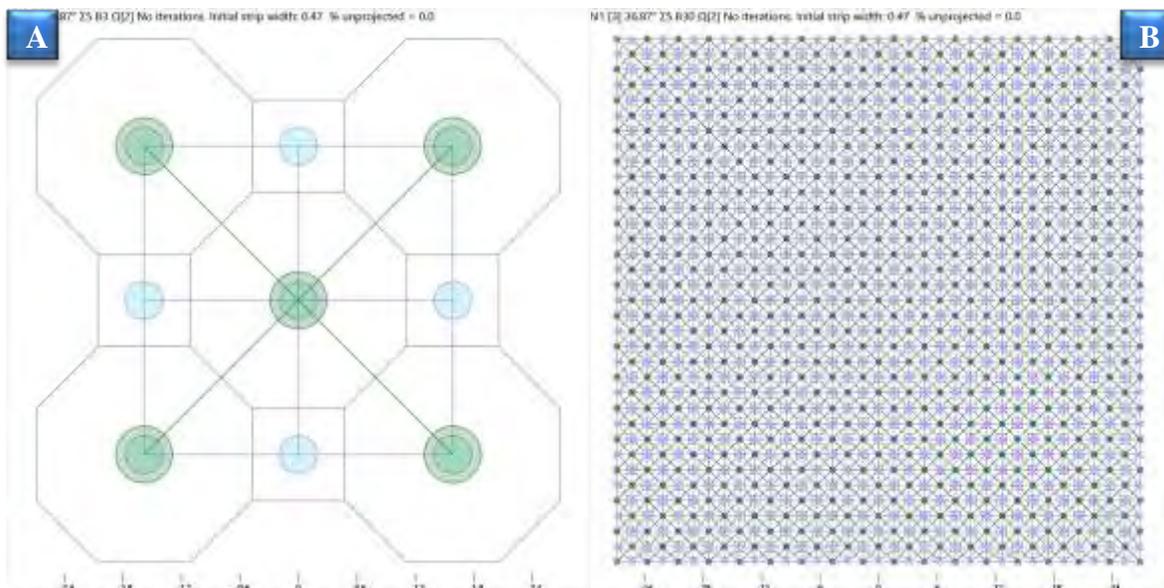


Figura III.34 Caso de Estudio FG [3]. - Figura de alambre de O-Lattice y CSL. A contiene un tamaño de la muestra de 3. En B el tamaño de la muestra es 30.

Con esto último vimos todo lo que se puede observar de la frontera singular [3], pero no con ello podemos ver directamente las FGs de segundo orden. Existe un paso intermedio importante para poder entender a profundidad las FGs de segundo orden y ese es el desplazamiento.

III.4.2. Desplazamiento de una Frontera Singular

Al hablar de FGs, debemos recordar que Bollmann aseguraba que había fronteras especiales, que ahora sabemos son las fronteras singulares. Al pasar de una frontera singular a una de segundo orden, aparecen dominios con diferente simetría. Éste cambio está dado cuando el desplazamiento es de medio vector de la red DSC.

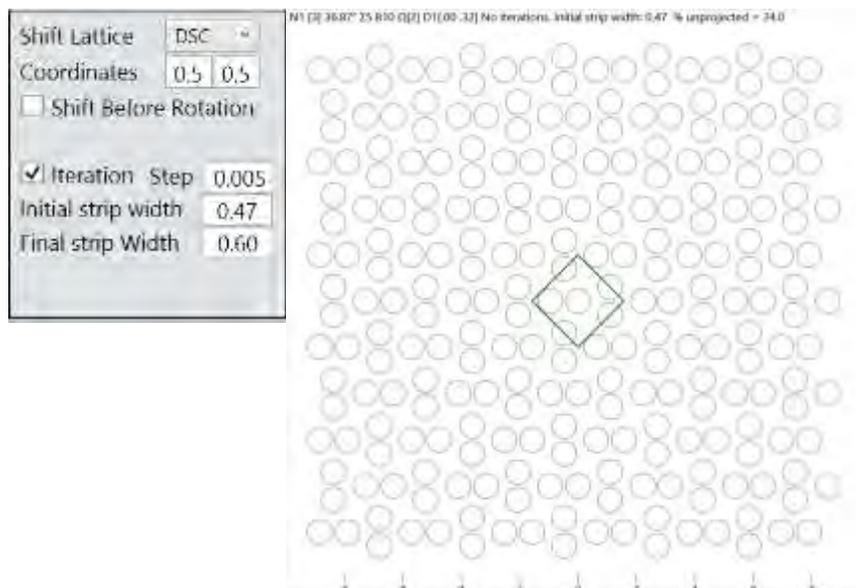


Figura III.35 Caso de Estudio FG [3] - Simetría de la FG cuando las redes se desplazan por la mitad de un vector base de la DSC.

Podemos observar en la Figura III.35 que la simetría de la figura de alambre cambia cuando, además de rotarse, los planos de la red se desplazan por el vector de la red DSC $\frac{1}{2}(1,1)$. Los sitios que formaban figuras hexagonales y cuadradas en la frontera singular (Figura III.34), ahora forman un patrón de líneas verticales y horizontales

Con esta información y este proceso especial, podremos entender con mayor facilidad las fronteras de segundo orden.

III.4.3. Fronteras de Segundo Orden

Como mencionamos en el Capítulo I, una frontera de segundo orden, está dado por un ángulo que descompuesto en fracciones continuas nos da dos enteros. Debido a que estamos analizando la familia de la frontera singular [3], las fronteras de segundo orden de esta familia tomarán la forma $[3 X_2]$, donde X_2 es cualquier número entero positivo o negativo.

Para iniciar el análisis de las fronteras de segundo orden, es necesario entender que existe un cambio en la simetría de las redes, aunque se intenta conservar la estructura de mínimo desplazamiento, que es la frontera singular, obteniendo regiones donde la simetría es la de la frontera singular y regiones donde la frontera es desplazada, como se muestra en la Figura III.36.

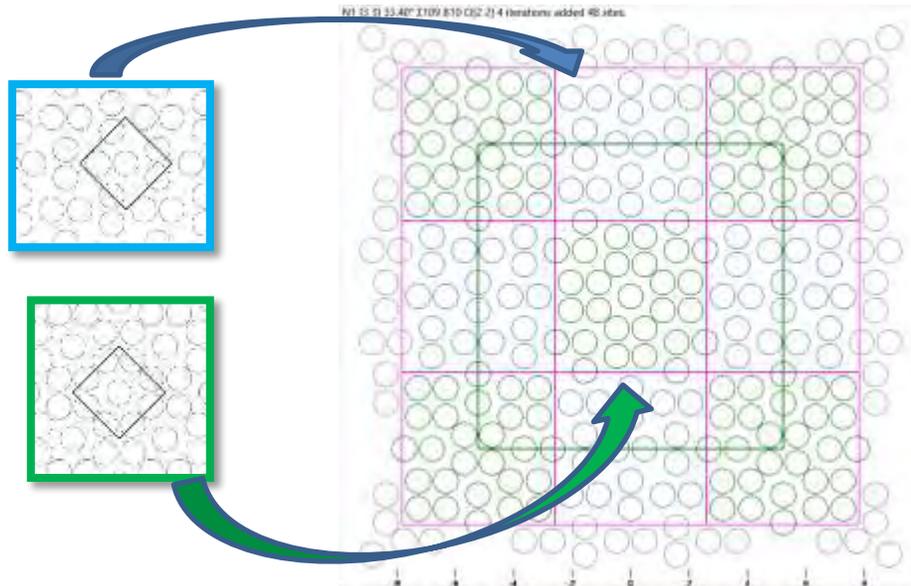


Figura III.36 Caso de Estudio FG [3 3] - Simetría en el segundo orden. En el lado superior izquierdo encontramos la frontera singular [3] desplazada. Del lado inferior izquierdo encontramos la frontera singular sin desplazar. Del lado derecho se puede observar cómo se acomodan las tanto la celda unidad de la frontera singular cómo la frontera singular desplazada. Las líneas de color fucsia representan dislocaciones secundarias cuyo vector de Burgers es precisamente el vector $\frac{1}{2}(1, 1)$ en coordenadas de la red DSC.

Los sitios de la red puede que no sean suficientes para poder observar claramente el cambio de simetría con el que nos encontramos, por lo que necesitamos revisar la figura de alambre y con ella tendremos mayor seguridad de ver correctamente el cambio de simetría mencionada.

En la Figura III.37, encontramos cuadrantes separados por dislocaciones y la figura de alambre de los cuadrantes (2), (4), (6) y (8) corresponde a la figura de alambre de la frontera singular desplazada. Los cuadrantes (1), (3), (5), (7) y (9) corresponden a la figura de alambre de la frontera singular.

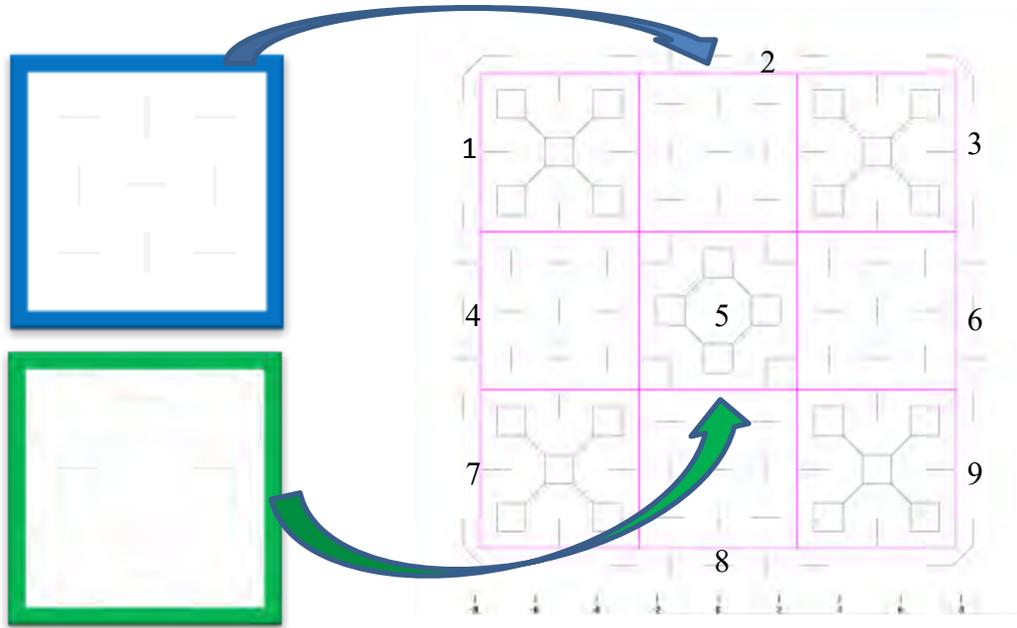


Figura III.37 Caso de Estudio FG [3 3]. - Figura de alambre de una frontera de segundo orden. En el lado superior izquierdo encontramos la figura de alambre de la frontera singular desplazada. En el lado inferior izquierdo encontramos la figura de alambre de la frontera singular. A la derecha se encuentra el conjunto de celdas parciales de la red de segundo orden, señaladas en cuadrantes del (1) al (9).

Una vez visto esto, podemos observar algunas cosas. La primera es que en las regiones (1), (3), (7) y (9) la simetría de la figura de alambre es la misma que en la frontera singular, pero esta desplazada horizontalmente. La segunda observación es que se conserva la estructura de la frontera singular sin cambios en el centro de la FG, el cuadrante (5). En la tercera y última observación, cada una de las fronteras de segundo orden mantienen las dislocaciones de la frontera singular y añaden sus propias dislocaciones como se puede observar en la Figura III.38.

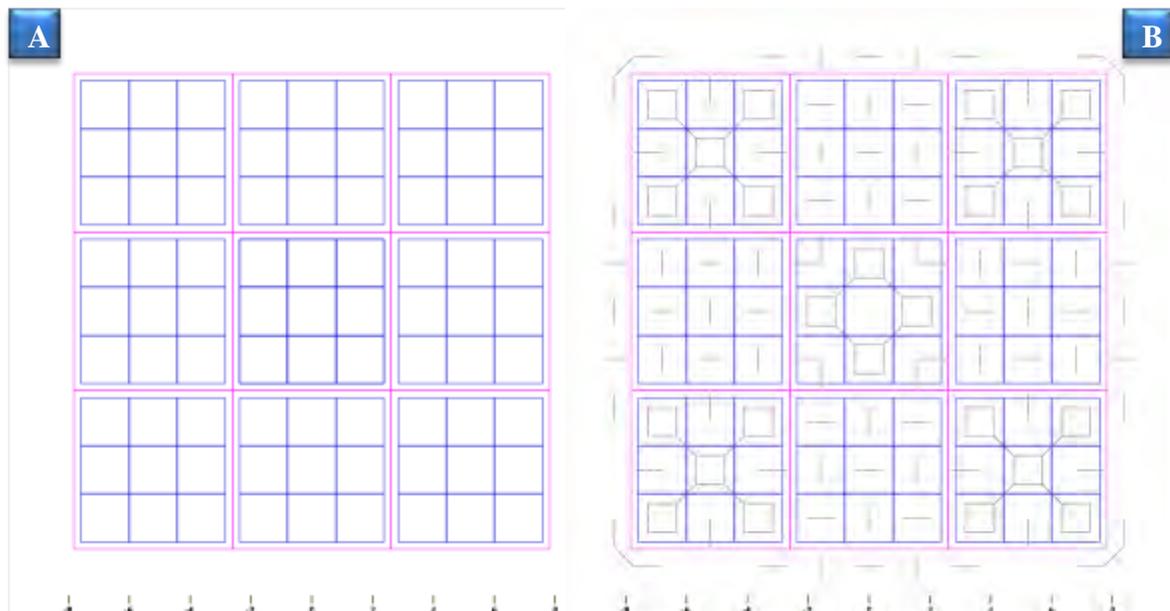


Figura III.38 Caso de Estudio FG [3 3]. - Celdas de O-Lattice. A muestra las celdas de la O-Lattice de primer orden en color azul, mientras que las de color rosa son las celdas parciales de segundo orden. En B encontramos la misma figura en conjunto con la figura de alambre de E^{\parallel} .

Si bien saltamos directamente a la FG [3 3], recordemos que X_2 puede tomar cualquier valor positivo o negativo, lo cual nos permite ver por ejemplo [3 4] o [3 5] o cualquier otra FG. Las propiedades de la **FG [3 3]** son: **ángulo 33.40°**, **$\Sigma 109$** , **$\Omega 2$** y **el tamaño de la muestra 10**. Podemos observar que del ángulo anterior a éste se redujo 3.47°, teniendo un ángulo en la frontera singular de 36.87°.

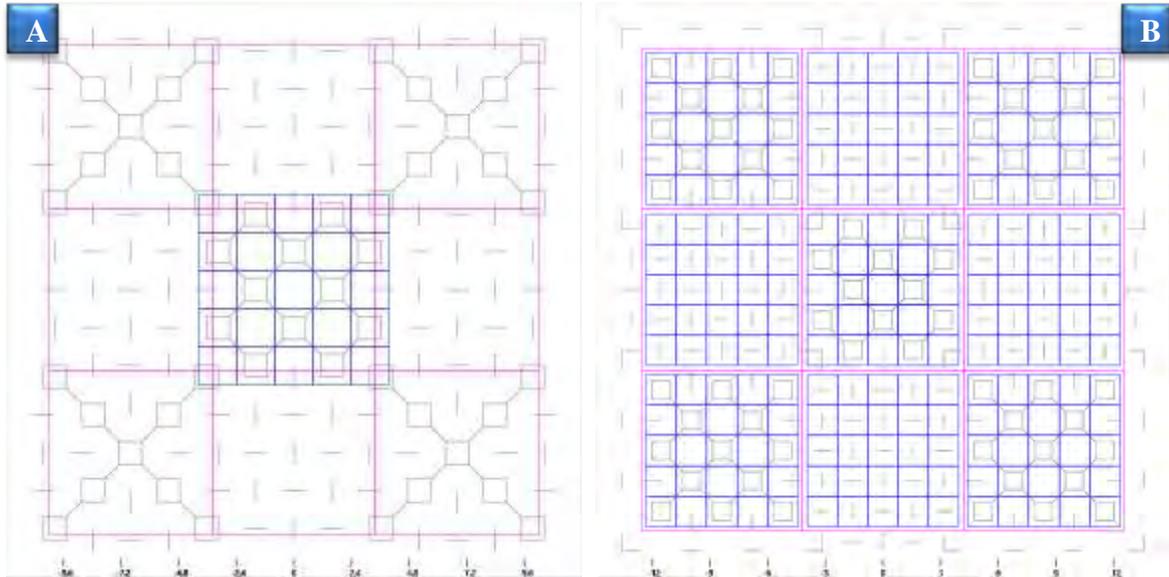


Figura III.39 Caso de Estudio FG [3 4] y [3 5]. - Figuras de alambre y O-Lattice. A muestra una FG [3 4]. B despliega una FG [3 5].

Para una siguiente frontera, empezando por [3 4], nuestras propiedades serían las siguientes: 34.21° , $\Sigma 185$, $\Omega 2$ y un tamaño de muestra 12. Para una frontera [3 5] las propiedades obtenidas son: 34.71° , $\Sigma 281$, $\Omega 2$ y un tamaño de muestra 15. Podemos observar esto en la Figura III.39.

Se puede observar también en la Figura III.39, que cuando X_2 tiene un valor par, las celdas de la O-Lattice de primer orden (O_1), no cubren de manera continua la totalidad de las celdas de la O-Lattice parcial de segundo orden (P_2).

III.4.4. Fronteras de Tercer Orden

Una frontera de tercer orden está dada para la familia de FGs [3], por [3 X_2 X_3], donde X_2 es el número de celdas de O_1 que se encuentran dentro de las celdas de P_2 .

La frontera [3 3 3] tiene como propiedades un ángulo de 33.72° , $\Sigma 1189$, $\Omega 4$ que en la Figura III.40 se muestra un tamaño de muestra de 30. El incremento en el ángulo desde la frontera de segundo orden es de 0.32° .

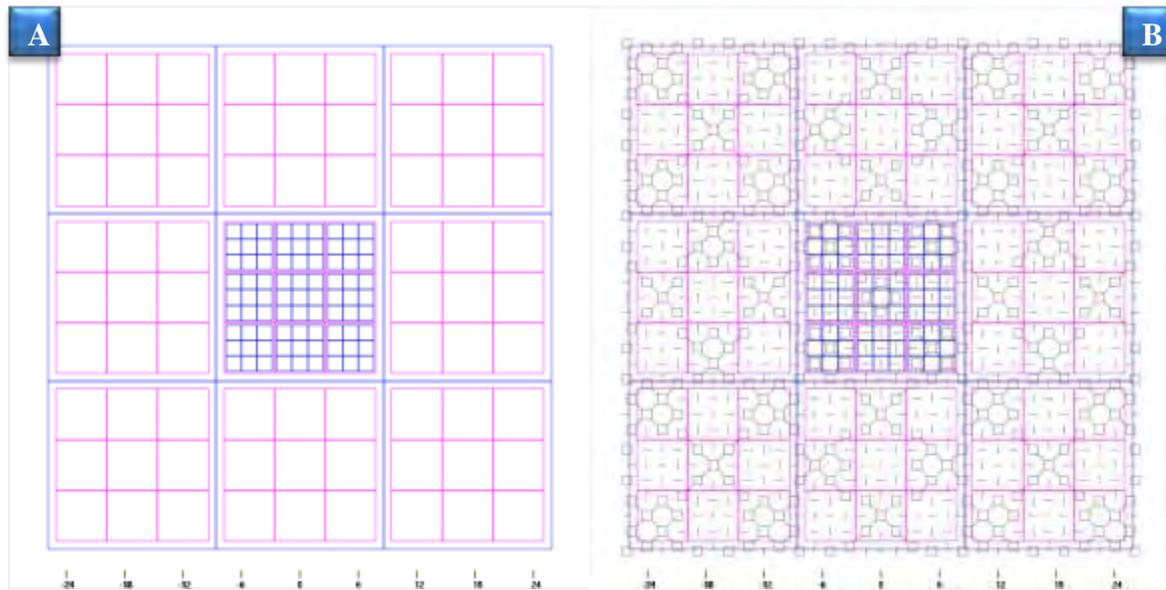


Figura III.40 Caso de Estudio FG [3 3 3]. - Celdas de O-Lattice de una frontera de tercer orden. A muestra las celdas de la frontera. En B se ven las mismas celdas, con el patrón generado por la figura de alambre de la frontera [3 3 3].

En la Figura III.40 podemos el volumen de celdas de O_1 dentro de las celdas de P_2 , pero aparece un nuevo caso, las celdas de la O-Lattice de tercer orden (O_3), contienen grupos de celdas de P_2 . Podemos ver que entre los grupos de celdas de P_2 hay un espacio igual a una celda de O_1 .

En cuanto a X_3 , es necesario ver casos de fronteras diferentes, por lo que veremos [3 3 4] y [3 3 5].

Para una frontera [3 3 4], las propiedades que obtenemos en GBLab son un **ángulo** de **33.64°**, **$\Sigma 1009$** , **$\Omega 2$** y un tamaño de muestra **35**. El incremento en el ángulo es de 0.24°. En ésta frontera de tercer orden, observamos que existen en la base de la celda de O_3 , celdas incompletas de P_2 que no cubren por completo el área de la celda de O_3 (ver Figura III.41). Nuevamente viendo el mismo efecto que en las fronteras de segundo orden, para confirmarlo, veamos la frontera [3 3 5]. La frontera [3 3 5] tiene un **ángulo** de **33.60°**, **$\Sigma 3065$** , **$\Omega 4$** y el tamaño de la muestra es **48**. El incremento en el ángulo es de 0.20°.

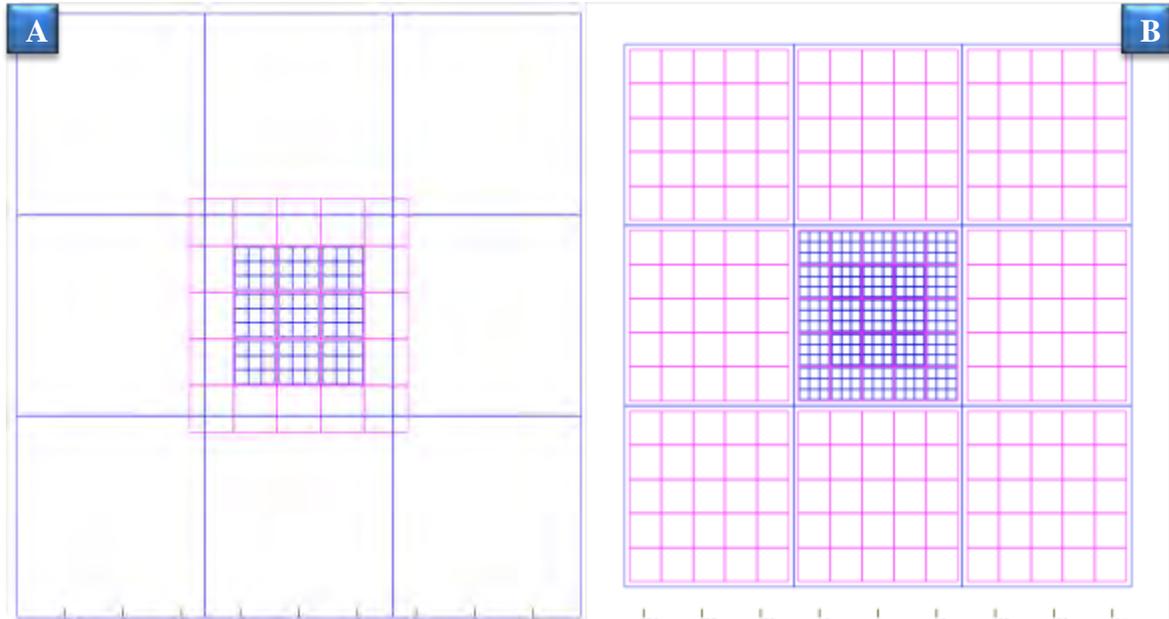


Figura III.41 Caso de Estudio FG [3 3 4] y [3 3 5]. - Celdas de O-Lattice de tercer orden. A muestra la FG [3 3 4]. En B está desplegada la FG [3 3 5].

III.4.5. Fronteras de Cuarto Orden

Conforme al avance de nuestro caso de estudio, podemos ver que de la familia de FGs [3], el cuarto orden está dado por $[3 X_2 X_3 X_4]$. Para seguir analizando los efectos encontrados, empezaremos con la FG [3 3 3 3] que tiene un ángulo de 33.69° , $\Sigma 6485$, $\Omega 2$ y el tamaño de la muestra es 100. Del tercer orden al cuarto, hubo un decremento de 0.03° . Es aquí donde vemos como los instrumentos de medición actuales pueden llegar al límite de precisión, mientras que GBLab permite llegar a una precisión más allá de la mostrada hasta ahora.

En la Figura III.42, podemos observar nuevamente el número de celdas de la O-Lattice dado por el valor de X_4 , para las celdas de O_4 , sin embargo encontramos que entre las celdas de O_4 , separando las celdas de O_3 hay celdas de P_2 . Es importante ver que el contenido de las celdas de O_3 , contiene celdas de O_1 y P_2 y que también O_1 se encuentra dentro de las celdas de P_2 .

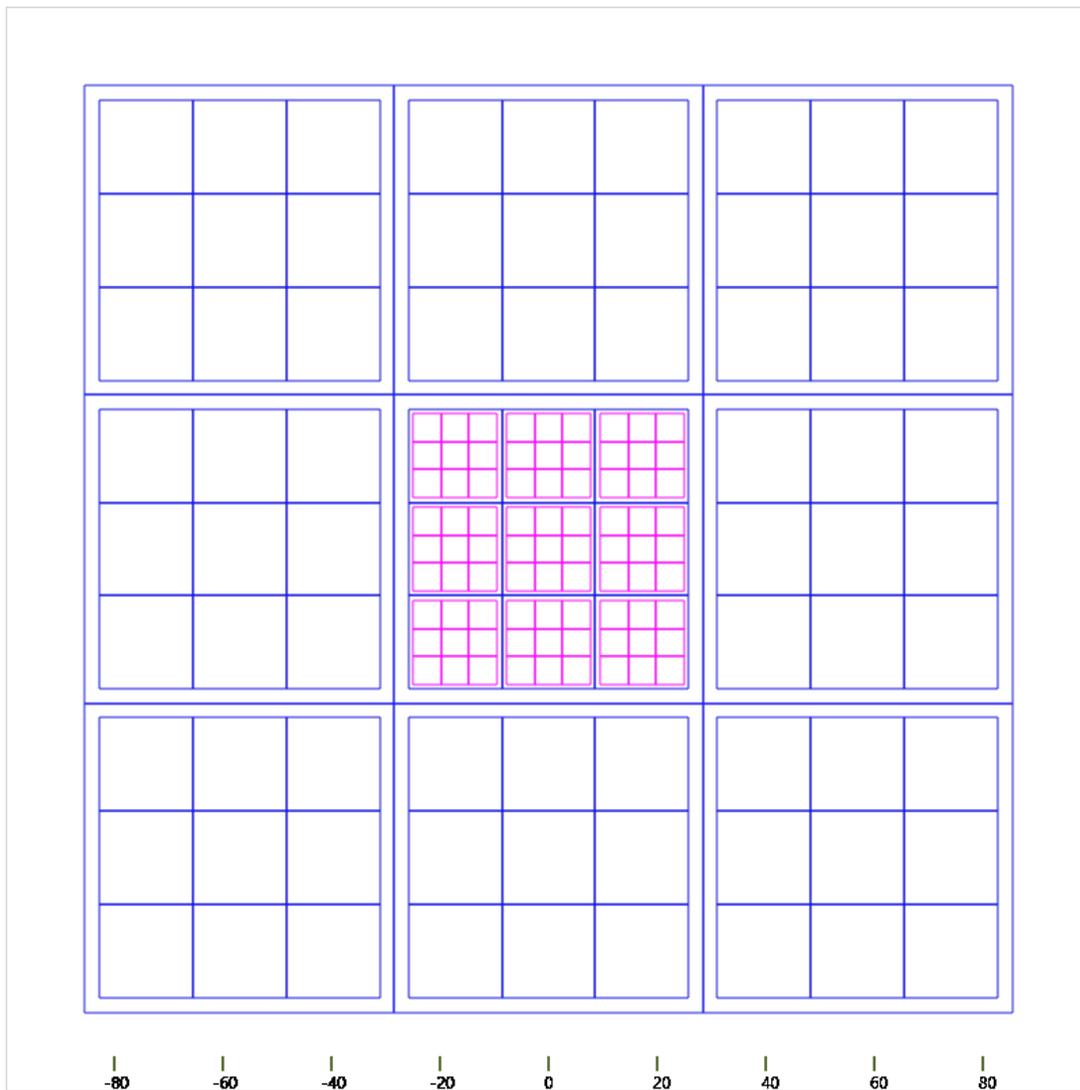


Figura III.42 Caso de Estudio FG [3 3 3 3]. - Celdas de O-Lattice de Cuarto Orden con su contenido de celdas de menor orden con excepción de las de primer orden que son demasiado pequeñas para la escala de la figura.

III.5. Análisis de resultados

A continuación describimos en detalle cada paso del proceso recursivo descrito en el capítulo I. Para esto es útil reescribir las ecuaciones del capítulo I en una forma más apropiada.

La ecuación I.21 para el q-esimo orden se puede expresar como

$$T_q = \left(R_{-\frac{\Delta_q}{2}} - R_{\frac{\Delta_q}{2}} \right)^{-1} = \frac{\sqrt{\Delta_q^2 + 1}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Donde

$$\Delta_q = \frac{N + \xi_{q-1} \xi_q}{\xi_{q-1} - \xi_q} \quad (23)$$

y

$$\xi_q = |x_1| + \frac{s_2}{|x_2| + \dots + \frac{s_q}{|x_q|}} \quad (24)$$

donde s_i representa el signo de x_i . Por último, los vectores de Burgers se calculan mediante la ecuación:

$$B_q \equiv T_q^{-1} O_q \quad (25)$$

III.5.1. Análisis de N1 [3 3 3] 33.72° Σ1189

A continuación describiremos los resultados obtenidos con el programa usando como ejemplo el caso de estudio para la red cuadrada (N=1) Σ1189 con ángulo de rotación de 33.72° y parámetro de rotación $\xi=3.3$ cuya expansión fracciones continuas es [3; 3,3].

III.5.1.1. Primer Orden [3]

Iniciamos con la matriz de estructura de la red de referencia L_m dada por:

$$L_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

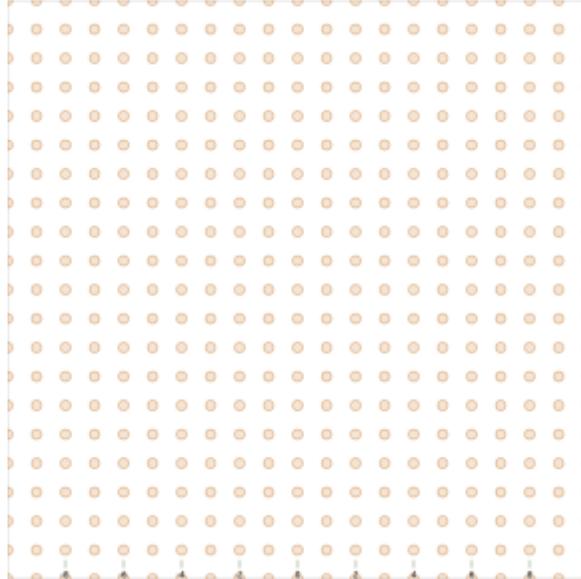


Figura III.43 Sitios de la red mediana (L_m).

Para el primer orden, la ecuación (23) queda:

$$\Delta_1 = \xi_1 = 3.$$

De tal manera que la ecuación (22) toma los valores de:

$$T_1 \equiv T(\Delta_1) = \frac{\sqrt{3^2+1}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

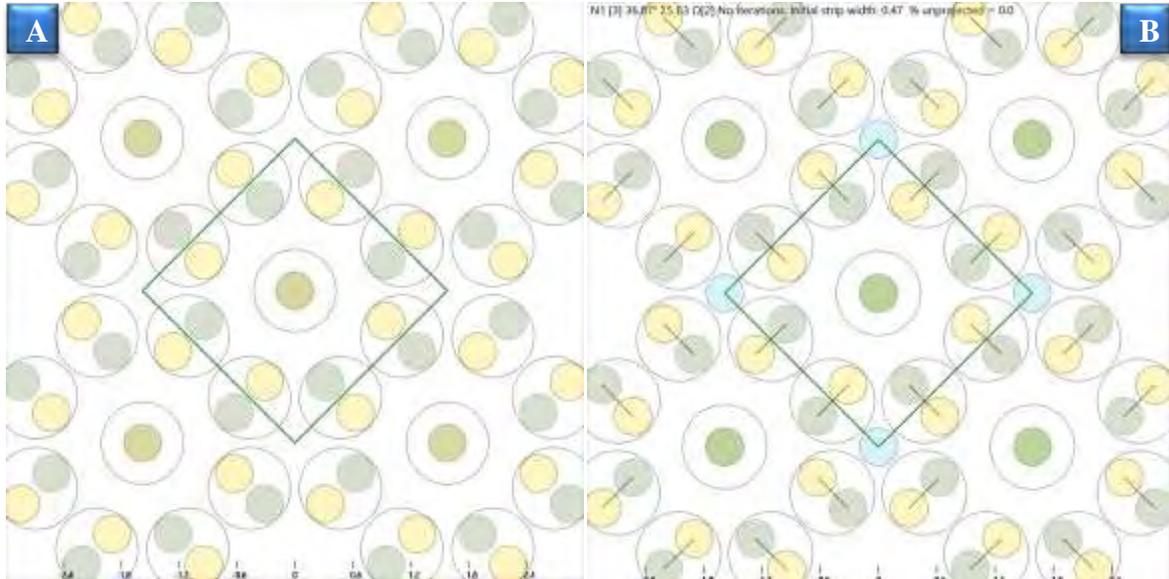


Figura III.44 FG singular [3]. A contiene los sitios de E^{\parallel} y se muestran los sitios de las redes L_1L_2 , junto con la celda unidad de la CSL. B muestra además los desplazamientos entre las redes L_1L_2 , mostrando los sitios de la O-Lattice.

De esta manera de la ecuación I.19 los resultados obtenidos son:

$$O_1 = T_1 L_m = 1.58 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

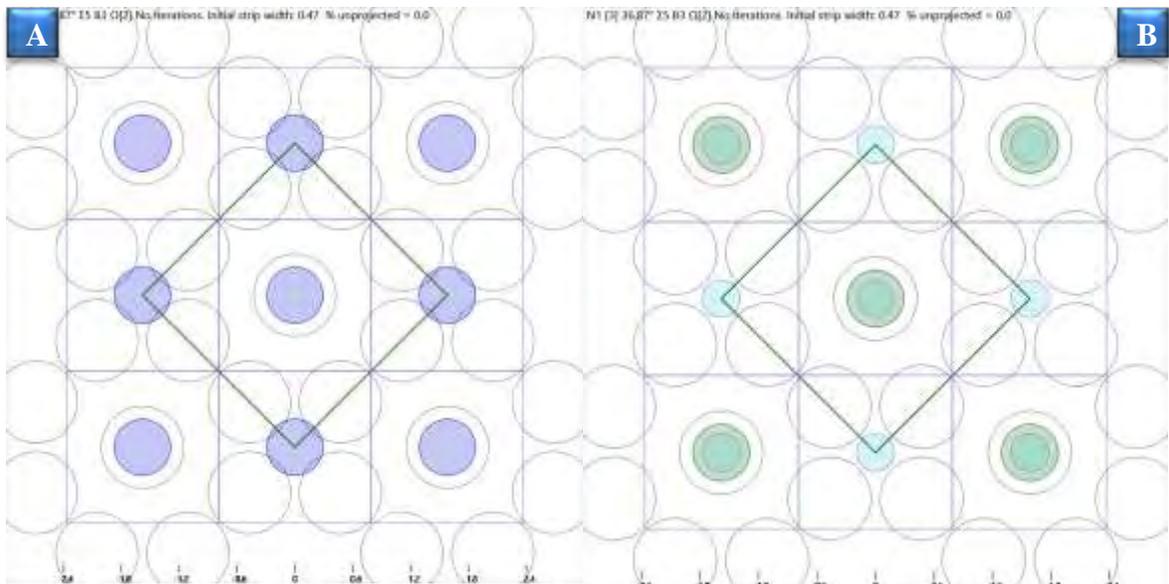


Figura III.45 FG singular [3]. A contiene los sitios de E^{\parallel} y la O-Lattice y las celdas de la O-Lattice y la celda unidad de la CSL. B contiene además los sitios de la CSL.

Y con ello, los vectores de Burgers en la ecuación (25) están dados por:

$$B_1 \equiv T_1^{-1} O_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ya que Δ_1 es non, la matriz de estructura de la CSL, dada por las ecuaciones I.13 e I.11, es:

$$C_1 = O_1 \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = 1.58 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

y la DSC de primer orden dada por la ecuación I.20 es:

$$D_1 = \frac{1}{\Sigma_1} C_1 = 0.32 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

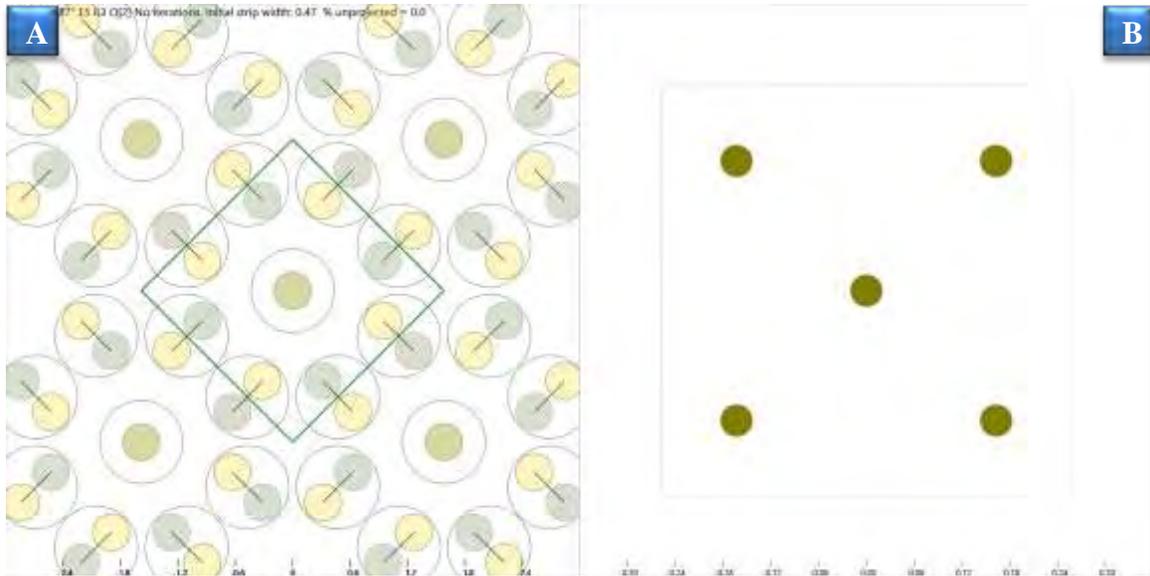


Figura III.46 FG singular [3]. A muestra los desplazamientos entre las redes L_1L_2 dentro de los sitios de E^{\parallel} y los modulo vectores únicos de estos desplazamientos se ven reflejados en B.

III.5.1.2. Segundo Orden [3 3]

De la Figura I.7, podemos observar cómo nos aproximamos gradualmente en rotaciones singulares al ángulo de rotación entre las redes L_1 y L_2 , tras la primera rotación (ξ_1) nos aproximamos al ángulo de rotación de segundo orden θ_2 según la ecuación (23), dada por:

$$\xi_2 = 3 + \frac{1}{3} = \frac{10}{3}$$

$$\Delta_2 = \frac{3 * \frac{10}{3} + 1}{\frac{10}{3} - 3} = 33$$

$$\Delta\theta = \frac{180}{\pi} 2 \tan^{-1} \frac{1}{33} = 3.4714^\circ$$

$$\theta_2 = \frac{180}{\pi} 2 \tan^{-1} \frac{1}{\frac{10}{3}} = 33.98^\circ$$

III.5.1.2.1. Transformaciones de Segundo Orden

La transformación de Bollmann de Segundo Orden para [3 3], está dada por la ecuación (22) y da como resultado:

$$T_2 = T(\Delta_2) = \frac{\sqrt{(33)^2+1}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Del resultado anterior, al calcular la transformación de desplazamiento, obtenemos:

$$T_2^{-1} = \frac{2}{\sqrt{(33)^2+1}} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

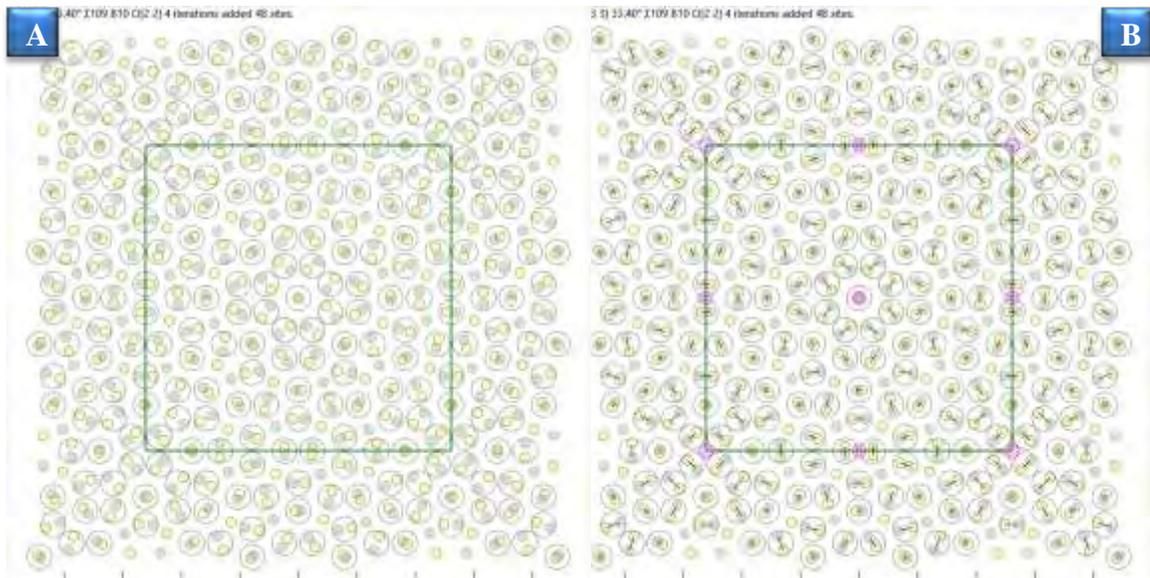


Figura III.47 Sitios de [3 3]. A muestra los sitios de las redes L_1L_2 dentro de los sitios de E^{\parallel} y la celda unidad de la CSL. B muestra adicionalmente los desplazamientos de las redes y los sitios de la P-Lattice de segundo orden.

Dado que $\Delta\theta$ es un número impar, el factor geométrico que se utiliza es:

$$G_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Para el cálculo de la P-Lattice de segundo orden, se utilizará el factor geométrico:

$$S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

III.5.1.2.2. Vectores base de Segundo Orden

El resultado de calcular la O-Lattice de segundo orden con la ecuación I.19, es:

$$O_2 = T_2 D_1 = 5.22 \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Y con ello, el desplazamiento en los vectores base de la O-Lattice (Bilby) está dado por:

$$B_2 = T_2^{-1} O_2 = 0.32 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

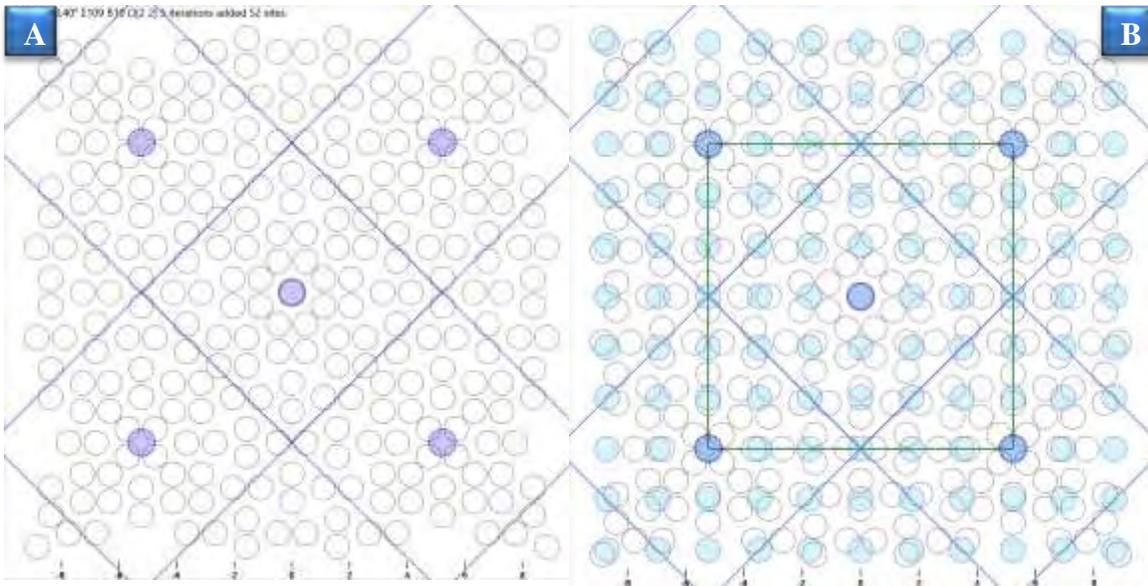


Figura III.48 FG de segundo orden [3 3]. A muestra los sitios y las celdas de la O-Lattice de segundo orden y los sitios de E^{\parallel} . B contiene los sitios de la O-Lattice de Bollmann en conjunto con lo mostrado en A.

La base de la P-Lattice de segundo orden calculado con el factor de escala S resultante es:

$$P_2 = O_2 S = 5.22 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Con el resultado anterior, calculamos el desplazamiento en la P-Lattice H (Δ_2):

$$H_2 = B_2 S = 0.32 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

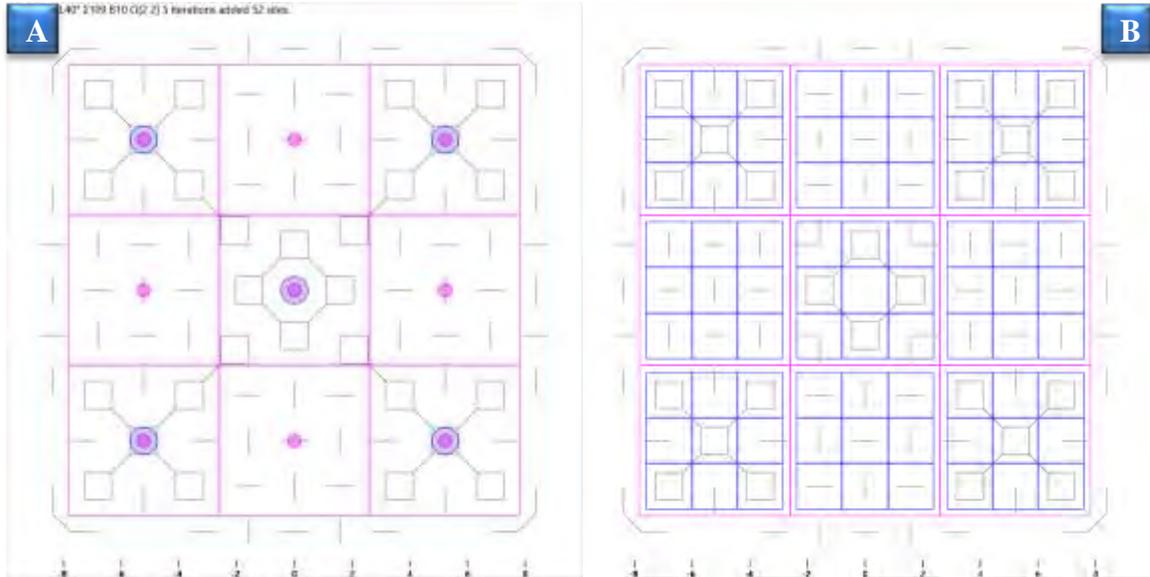


Figura III.49 FG de segundo orden [3 3]. A contiene la figura de alambre de E^{\parallel} con los sitios de las redes de segundo orden, P-Lattice y O-Lattice. B muestra la figura de alambre de E^{\parallel} en conjunto con las celdas de la P-Lattice de segundo orden y las celdas de la O-Lattice de primer orden.

Dado el factor de escala de segundo orden y la ecuación I.11, calculamos la matriz de estructura de la CSL:

$$C_2 = O_2 G_2 = 10.44 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Con la ecuación I.20 y el resultado anterior, el resultado de calcular la DSC es:

$$D_2 = \frac{c_2}{\Sigma_2} = \frac{c_2}{109} = 0.096 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

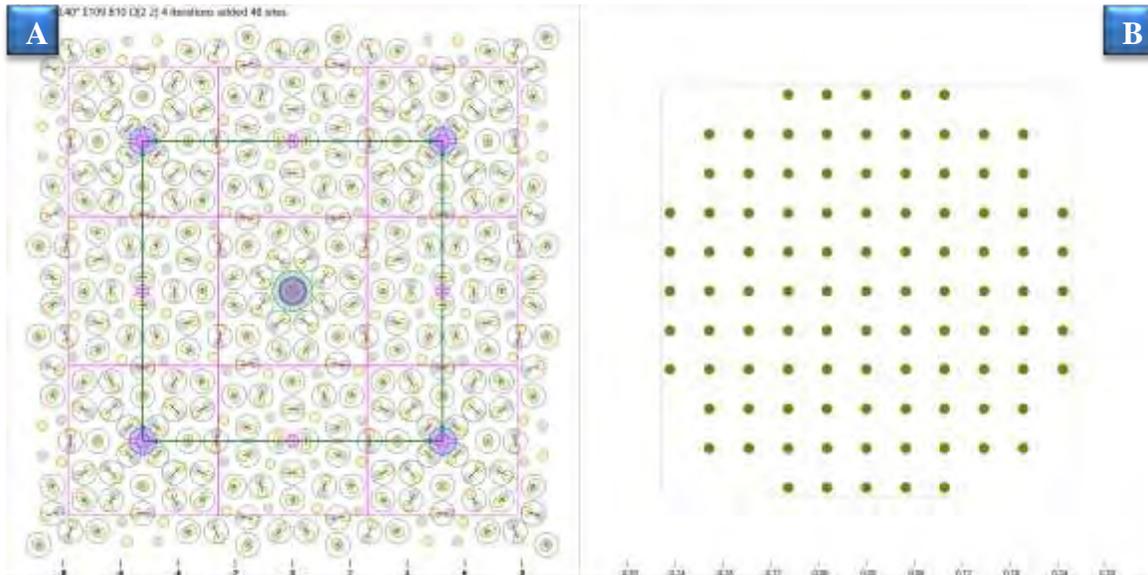


Figura III.50 FG de segundo orden [3 3]. A muestra los desplazamientos entre las redes L_1L_2 dentro de los sitios de E^{\parallel} , las celdas y los sitios de la P-Lattice de segundo orden. B despliega el conjunto de modulo vectores de desplazamiento, la red DSC.

III.5.2. Tercer Orden

En el tercer y último orden, el cambio en el ángulo de rotación es muy pequeño, calculado según las ecuaciones (22) y (23), de tal manera que podemos observar el pequeño incremento en el ángulo:

$$\xi_3 = 3 + \frac{1}{3 + \frac{1}{3}} = \frac{33}{10}$$

$$\Delta_3 = \frac{\frac{33}{10} \frac{10}{3} + 1}{\frac{3}{3} - \frac{10}{10}} = 360$$

III.5.3. Transformaciones de Tercer Orden

Según la ecuación (21), la transformación de Bollmann de Tercer Orden está dada por:

$$T_3 \equiv T(\Delta_3) = \frac{\sqrt{(360)^2 + 1}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Con ello obtenemos el resultado de calcular la transformación de desplazamiento:

$$T_3^{-1} = \frac{2}{\sqrt{(360)^2+1}} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

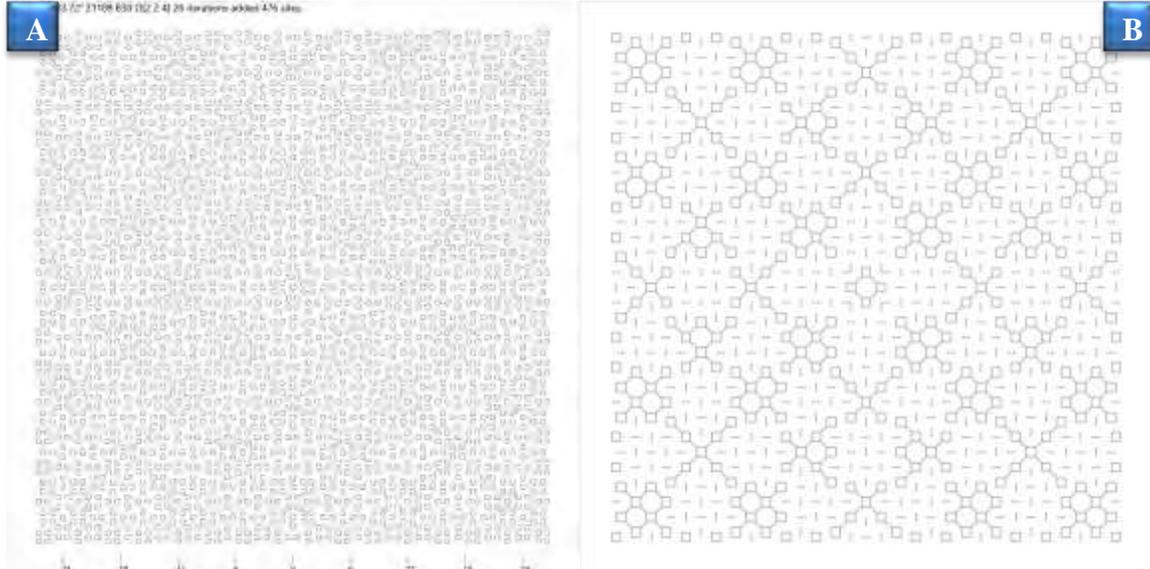


Figura III.51 FG de tercer orden [3 3 3]. A muestra los sitios de E^{\parallel} par. B despliega la figura de alambre de E^{\parallel} par

Debido a que la diferencia angular dada por la ecuación (23) resulta un número par, el factor geométrico utilizado obedece a la ecuación I.12:

$$G_3 = 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

III.5.4. Vectores base de Tercer Orden

Con todo lo anterior y usando nuevamente la ecuación I.19 para el cálculo de la O-Lattice de tercer orden obtenemos:

$$O_3 = T_3 D_2 = -17.24 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Y con ello obtenemos el desplazamiento en los puntos de la O-Lattice de tercer orden.

$$B_3 = T_3^{-1} O_3 = -0.096 \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

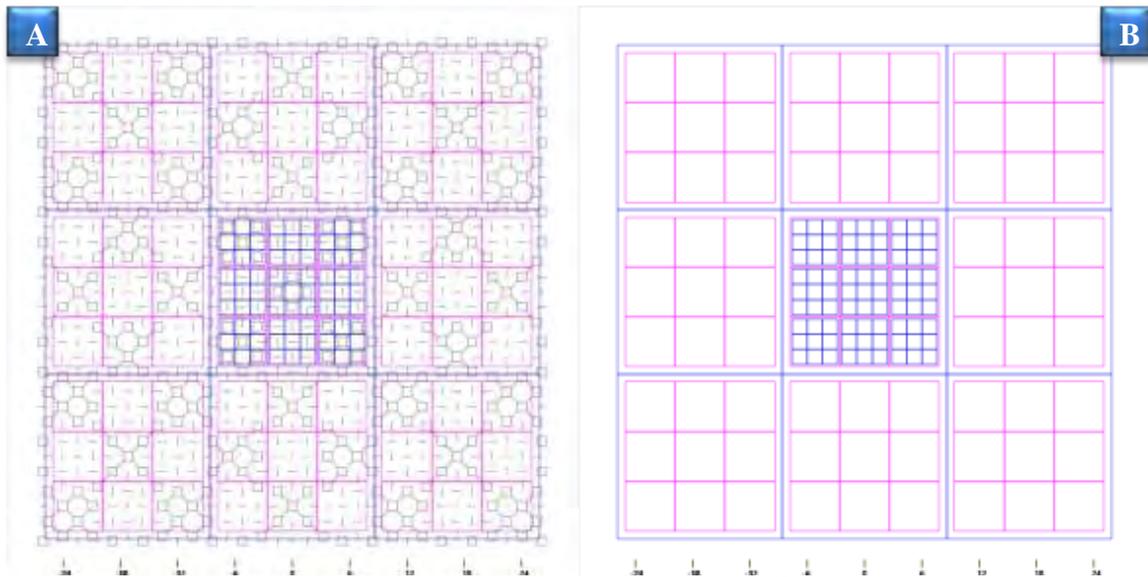


Figura III.50 FG de tercer orden [3 3 3]. A muestra la figura de alambre de E^{\parallel} en conjunto con las celdas de la O-Lattice de tercer orden, las celdas de la P-Lattice de segundo orden y las celdas de la O-Lattice de primer orden. B muestra el contenido de celdas de O-Lattice de tercer orden, donde las celdas de O_3 contienen las celdas de P_2 y éstas contienen las celdas de O_1 .

Al generar la O-Lattice nos permite el cálculo de la CSL según la ecuación I.11 dando:

$$C_3 = O_3 G_3 \approx -34.48 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

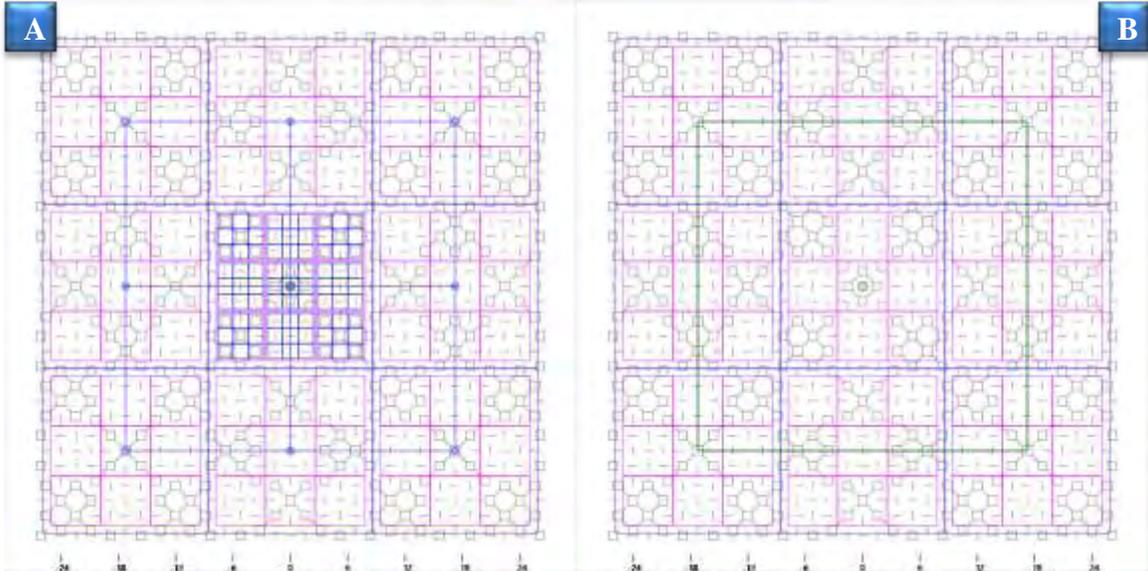


Figura III.4 FG de tercer orden [3 3 3]. A muestra la figura de alambre de E^{II} en conjunto con las celdas de O_3 , P_2 y O_1 , la celda unidad de la CSL y los sitios y la figura de alambre de O_2 . B muestra solamente la figura de alambre de E^{II} en conjunto con la celda unidad de la CSL y los sitios de la CSL de orden 3.

Por último, gracias al cálculo de la CSL, podemos fácilmente calcular la DSC:

$$D_3 = \frac{c_3}{\Sigma_3} = \frac{c_3}{1189} = -0.029 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

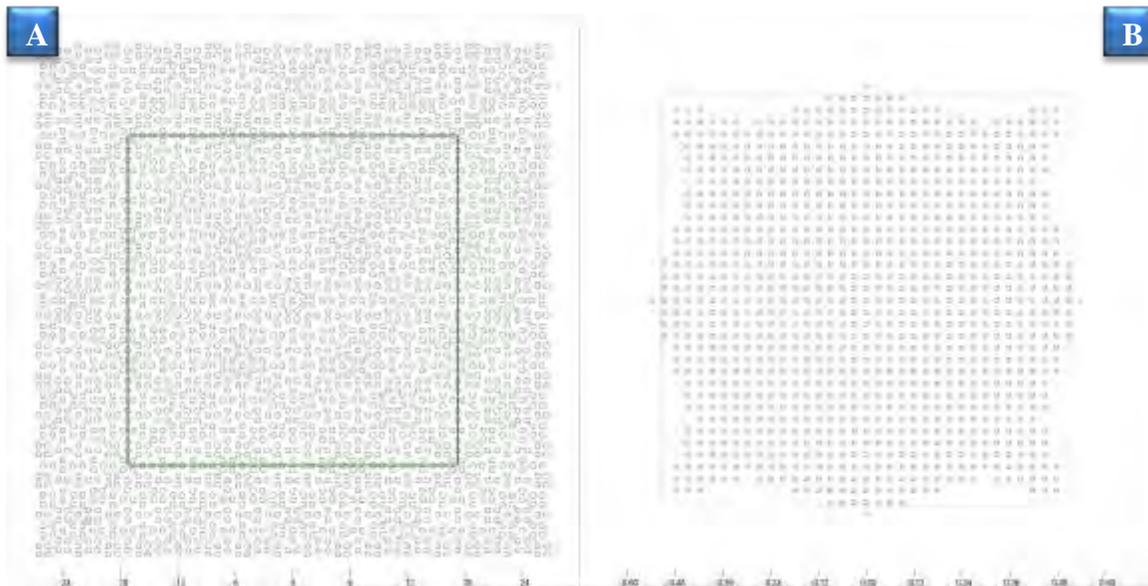


Figura III.5 FG de tercer orden [3 3 3]. A muestra los sitios de E^{\parallel} y la celda unidad de la CSL de tercer orden. B muestra los modulo vectores de desplazamiento de los sitios de las redes L_1 y L_2 , la DSC de tercer orden.

Los resultados de esta sección muestran que el programa permite analizar de manera gráfica la relación que hay entre todas las redes involucradas en la descripción de las FGs de acuerdo con el modelo matemático propuesto. Con esto es ahora posible comparar estos resultados con los obtenidos experimentalmente y corroborar la eficacia del modelo.

Capítulo IV. Conclusiones

Como se ha mencionado con anterioridad GBLab ha sido creado a partir de los requerimientos como una herramienta para visualizar y así comprobar el modelo propuesto (ver referencia 2).

Con los resultados del programa, se puede ahora experimentar la posibilidad de completar la teoría de Bollmann y poder explicar finalmente el modelo de dislocaciones completo. Por primera vez es posible identificar y visualizar todas las dislocaciones dentro de una FG y con ello podemos clasificar las FGs en fronteras singulares o de primer orden, secundarias, terciarias, de cuarto orden, quinto orden, etc. En el programa se observa la estructura que compone cada celda, la localización y clasificación de las dislocaciones. La construcción de la FG se genera a partir de la simetría y el ángulo de rotación.

Una FG podemos describirla mediante su ángulo de rotación, el parámetro de rotación o su fracción continua, la simetría, el número de sitios dentro de su celda unidad (Σ) y con ello podemos obtener de manera sencilla la O-Lattice, la CSL y DSC de la FG del orden que sea.

GBLab usando el modelo recursivo propuesto, fácilmente puede desplegar las celdas de cada una de las O-Lattices, del orden q -ésimo. Gracias a ello podemos visualizar por primera vez cómo están compuestas las FGs en relación al contenido de celdas de orden anterior y expandir la teoría de Bollmann usando el nuevo modelo matemático. Como ejemplo, la FG de cuarto orden [3 3 3 3] (ver Figura III.41.B), muestra las celdas O de una FG de cuarto orden, donde una celda de O_4 , contiene X_3^2 celdas de O_3 y una celda de O_3 contiene X_2^2 celdas de P_2 y P_2 contiene X_1^2 celdas de O_1 , siendo ésta la distribución de celdas del orden inmediato inferior que se encuentran dentro de cada celda.

Con el programa se muestra el tipo de análisis que ahora puede hacerse del contenido dislocativo de fronteras de grano en el que se muestran todos los órdenes de dislocaciones contenidos en una interface de cuarto orden.

Aunque la generalidad de estos resultados aún se está analizando, ha quedado demostrado que el programa satisface los requerimientos para el cual fue elaborado.

IV.1. Conclusiones finales

El programa ha permitido identificar las FGs. Esto nos permite clasificarlas de acuerdo a su parámetro de rotación angular dado en fracciones continuas, construir y desplegar las redes O-Lattice, CSL y DSC, localizar las dislocaciones y su orden.

En el programa pudimos comprobar la efectividad y precisión del proceso recursivo propuesto para modelar una FG y con ello, estudiar la manera en que los diversos ordenes de dislocaciones interaccionan entre sí.

Como ganancia personal, esta tesis me permitió investigar diferentes lenguajes de programación y elegir uno que cubre adecuadamente todos los requisitos solicitados, WPF. A pesar de su similitud con Visual Basic, WPF combinado con C# me permitió profundizar mis conocimientos en C y .NET.

Trabajando en conjunto con el director de tesis me permitió modificar lo que fuera necesario en el programa con funciones nuevas, corregir errores de ejecución o de diseño y realizar un programa que fuera agradable y funcional.

Aprender WPF fue necesario para la realización del programa, usando libros (ver referencia 15), cursos en línea y tutoriales, pude comprender el funcionamiento del lenguaje y al menos tener el conocimiento necesario para aplicar lo básico en GBLab y más adelante seguir profundizando en el lenguaje.

C# a pesar de tener similitudes con C y C++, me permitió extender la funcionalidad del programa y conocer más allá de lo aprendido durante las clases en la Facultad de Ingeniería (ver referencia 15).

GBLab a pesar de presentar las funciones básicas, puede mejorarse con funciones que no se realizaron por restricciones de tiempo. Dentro de las recomendaciones para un siguiente tesista serían en orden de importancia:

- Agregar un histograma.
- Análisis energético de las FG.
- Permitir el cambio de parámetros para introducir diferentes materiales.
- Introducir nuevos modificadores de presentación de resultados.
- Crear videos de transición entre ángulos y FGs.
- Mejorar la interface gráfica
- Realizar la migración a plataformas móviles.
- Realizar la migración a SO diferentes de Windows.

Bibliografía

- [1] W. Bollmann, *Crystal defects and crystalline interfaces*. New York. Heildeberg. Berlin: Springer-Verlag, 1970. Library of Congress Catalog Card No. 77-124069
- [2] D. Romeu and A. Correa. Artículo en preparación.
- [3] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, 4th ed. New York. London. Sidney. Toronto: John Wiley & Sons, Inc, 1971, p. 671. ISBN 0-471-49021-0
- [4] S. Ranganathan, "On the geometry of coincidence-site lattices", *Acta Crystallographica*, vol. 21, no. 2, pp. 197-199, 1966.
- [5] A. Sutton and R. Balluffi, *Interfaces in crystalline materials*, 1st ed. Oxford: Clarendon Press, 1995, p. 86. ISBN 0198500610.
- [6] R. Balluffi and P. Bristowe, "On the structural unit/grain boundary dislocation model for grain boundary structure", *Surface Science Letters*, vol. 144, no. 1, p. 28, 1984.
- [7] D. Romeu, "Interfaces and quasicrystals as competing crystal lattices: Towards a crystallographic theory of interfaces", *Physical Review B*, vol. 67, no. 2, 2003.
- [8] D. Sands, *Introduction to Crystallography*. New York. Amsterdam: W. A Benjamin, Inc., 1969, p. 13. Library of Congress Catalog 69-12565.
- [9] D. Romeu, J. Aragón, G. Aragón-González, M. Rodríguez-Andrade and A. Gómez, "Conditions for Singularity of Twist Grain Boundaries between Arbitrary 2-D Lattices", *Crystal Structure Theory and Applications*, vol. 01, no. 03, pp. 52-56, 2012.
- [10] V. Herrero Solana, "Sistemas Operativos y Ciencias de la Documentación", *Nosolousabilidad.com*, 2006. [Online]. Available: http://www.nosolousabilidad.com/articulos/sistemas_operativos.htm. [Accessed: 21- Apr- 2018].
- [11] S. Vaughan-Nichols, "Windows 10 is making too many PCs obsolete", *Computerworld*, 2017. [Online]. Available: <https://www.computerworld.com/article/3209977/microsoft-windows/windows-10-is-making-too-many-pcs-obsolete.html>. [Accessed: 21- Apr- 2018].
- [12] T. Sneath, "Comparing WPF on Windows Vista v. Windows XP", *Microsoft*, 2007. [Online]. Available: <https://blogs.msdn.microsoft.com/tims/2007/01/05/comparing-wpf-on-windows-vista-v-windows-xp/>. [Accessed: 21- Apr- 2018].
- [13] G. Warren, "Introducción a WPF", *Microsoft*, 2016. [Online]. Available: <https://docs.microsoft.com/es-es/visualstudio/designers/introduction-to-wpf>. [Accessed: 21- Apr- 2018].

- [14] Xu, J. (2007). *Practical WPF Graphics Programming – Advanced .NET Graphics Development with the Windows Presentation Foundation*. 1st ed. Phoenix: UniCAD Publishing.
- [15] Lippert, E. (2015). *Learning Path: C#*. [video] Available at:
<https://player.oreilly.com/videos/9781491940822> [Accessed 23 Feb. 2017].