

04.82.03

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
2	ABO 1982

CNEA-NT 19/82

REPUBLICA ARGENTINA
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Dependiente de la Presidencia de la Nación
GERENCIA DE DESARROLLO

UTILIDAD DE LA FUNCION DISTRIBUCION DE
ORIENTACIONES CRISTALINAS EN EL ANALISIS DE LA
TEXTURA CRISTALOGRAFICA

J.D. HERMIDA y A.A. POCHETTINO

Buenos Aires

1982

RESUMEN

El análisis de la Función Distribución de Orientaciones Cristalinas (FDOC) permite poner de manifiesto el peso y dispersión de las diferentes componentes de textura que presenta un material policristalino.

En el presente trabajo se muestran los fundamentos teóricos de la (FDOC) y se la aplica al estudio de la textura de un tubo tipo Candú. A fin de ayudar a una mejor interpretación de este formalismo, las figuras de polos (0002) y $\{10\bar{1}0\}$ son regeneradas a partir de los resultados obtenidos.

1. ESTUDIO TEORICO DE LA REPRESENTACION DE TEXTURAS

1.1 Orientación de un grano.

La ubicación de un grano en el seno de un material policristalino se describe utilizando 6 parámetros referidos a un sistema fijo a la muestra:

- Tres coordenadas que determinan la posición del mismo en el material,
- Tres ángulos que describen la orientación del grano respecto del referencial muestra.

Para muestras delgadas se puede aceptar en primera aproximación que el tamaño de granos es homogéneo y que la disposición de granos de igual orientación dentro de la muestra es aleatoria. Este hecho permite eliminar los parámetros de posición (lo que equivale a suponer que la textura es la misma en todo punto de la muestra) y por lo tanto tres variables angulares serán suficientes para orientar un grano.

1.1.1 Descripción de la orientación de un grano.

- Sea un referencial fijo, ligado a la muestra y definido por el triédro trirectángulo (A,B,C). Los ejes ABC son tomados.

	CHAPAS	TUBOS
A//	Dir. Laminado (DL)	Dir. Axial (DA)
B//	Dir. Transversal (DT)	Dir. Tangencial (DT)
C//	Dir. Normal (DN)	Dir. Radial (DR)

- Sea un segundo referencial ortogonal (X,Y,Z) ligado a 3 direcciones cristalográficas (X// $[10\bar{1}0]$, y // $[1\bar{2}10]$ y Z// $[0001]$ para un cristal hexagonal).

La orientación g de un grano es descripta por la rotación que permite pasar del referencial (A, B, C) al referencial (X, Y, Z). Esta rotación es descripta generalmente por medio de los 3 ángulos de Euler (ψ, θ, ϕ) definidos en la Fig. (1), siendo

$$0 \leq \psi \leq 2\pi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi$$

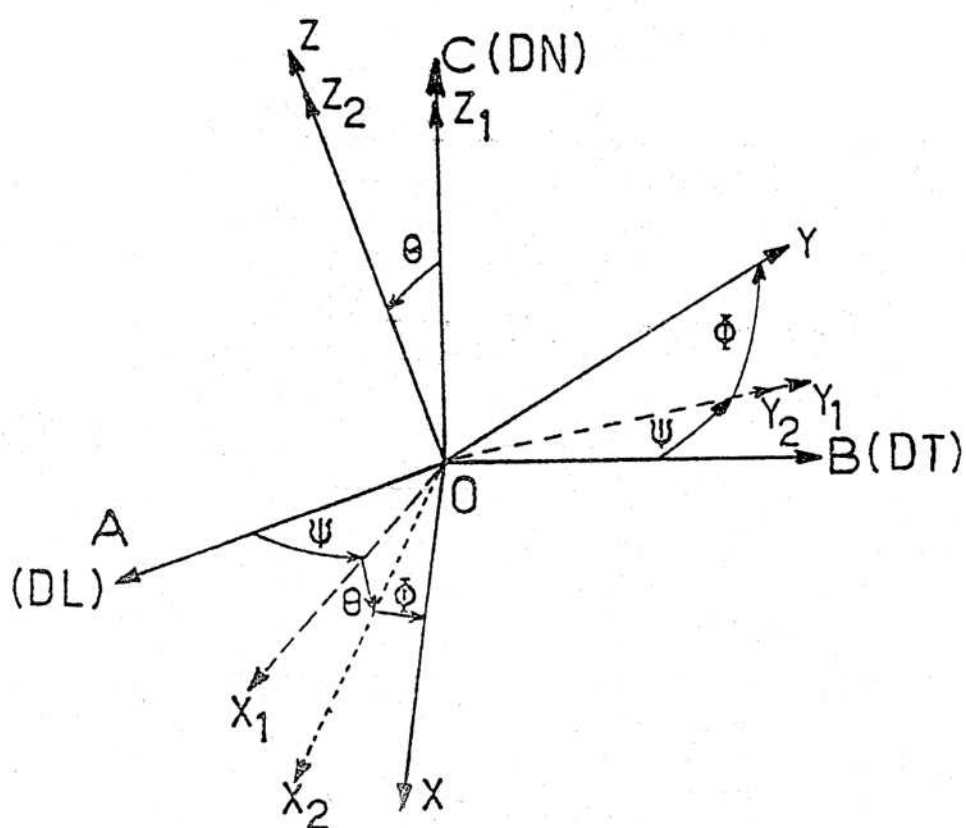


Figura 1: Descripción de la rotación $g(\psi, \phi, \theta)$ que permite pasar del referencial muestra al referencial cristal.

1.2 Representación clásica de texturas por figuras de polos directas

Las figuras de polos directas son utilizadas habitualmente para poner de manifiesto la anisotropía de distribución de orientaciones cristalográficas. Ellas consisten en la proyección estereográfica, sobre el plano de la muestra, de la distribución de densidades de polos de una familia de planos $\{hkl\}$ en todas las direcciones de la muestra.

La densidad de polos $q_{\{h,k,l\}}(\eta, \chi)$ asociada a un vector $\bar{e}(\eta, \chi)$ de la esfera de polos (referencial muestra, fig. 2), esta definida como el co ci ente entre las intensidades difractadas $I_{\{hkl\}}(\bar{e})$ por el conjunto de planos $\{hkl\}$ de la muestra y la intensidad difractada $I_i(\bar{e})_{\{hkl\}}$ para una muestra sin textura o isótropa. Si en el referencial cristal los planos (hkl) se describen utilizando un vector $\bar{r}$ normal a los mismos, fig. (3) queda en tonces

$$q_{\bar{r}}(\bar{e}) = \frac{I_{\bar{r}}(\bar{e})}{I_i(\bar{e})} \quad (1.1)$$

Es interesante remarcar que las texturas poseen simetrías vinculadas a su modo de formación (solidificación, deformación plástica, etc). Las figuras de polos presentan, por ejemplo, los elementos de simetría del dispositivo industrial (o experimental) de trabajado del material. Así, en el caso de una chapa laminada se observan tres planos de simetría: el plano de la chapa, el plano normal a los ejes de los rodillos y el plano transversal que pasa por esos ejes. Para el caso de tubos laminados, los planos de simetría son los perpendiculares a las direcciones axial, radial y tangencial respectivamente.

Para describir cualitativamente la naturaleza de la textura, generalmente se buscan una o varias orientaciones ideales correspondientes a las zonas de máxima densidad de las figuras de polos (reducción a un monocristal equivalente). El significado de esta representación de la textura es el de encon trar una cierta familia de planos $(h'k'l')$ con su normal paralela a la direc ción radial de un tubo y una dirección $u'v'w'$ paralela a la dirección axial.

Esta descripción de las texturas permite tener una idea bastante buena de la componente principal de textura del material pero es inexplorable des

de el punto de vista cuantitativo ya que no tiene en cuenta el peso ni la dispersión de las distintas componentes que pueden existir y la búsqueda de orientaciones ideales está llena de incertezas.

1.3 Función de Distribución de Orientaciones Cristalinas.

Una descripción cuantitativa de la textura cristalográfica puede ser realizada mediante la utilización de la llamada "Función Distribución de Orientaciones Cristalinas" (FDOC).

La FDOC puede considerarse como la probabilidad de encontrar granos en un entorno de la orientación g del material en estudio. Por lo tanto, la fracción de volumen global del material (V_0) que posee la orientación comprendida entre (g) y $(g+dg)$ se puede describir como:

$$\frac{dV}{V_0} = K \cdot F(g) \cdot dg \quad (1.12)$$

siendo el elemento diferencial de rotación

$$dg = \sin \theta \, d\theta \, d\psi \, d\phi$$

La normalización de la función se realiza integrando en todas la orientaciones:

$$\frac{1}{V_0} \int_V dV = K \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} F(\psi, \theta, \phi) \cdot \sin \theta \, d\theta \, d\psi \, d\phi = 1$$

Para una muestra isotrópica $F(g)$ será constante. Eligiendo $F(g)=1$, resulta $K = \frac{1}{8\pi^2}$.

1.4 Relación entre la FDOC y las figuras de polos directas.

Las figuras de polos directas, obtenidas experimentalmente, permiten po

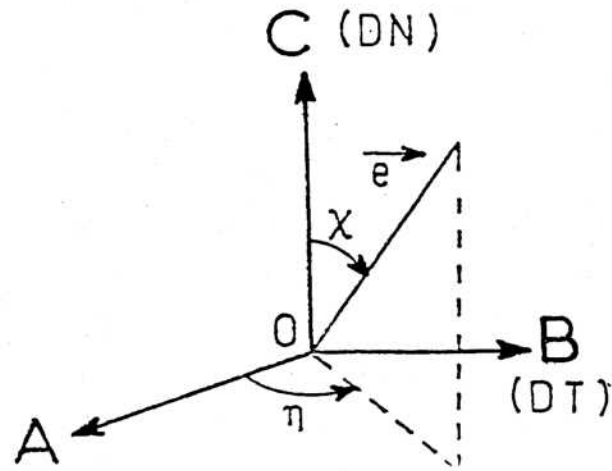


Figura 2: Coordenadas angulares del vector $\vec{e}$, asociado a un punto de la proyección extereográfica, en el referencial muestra.

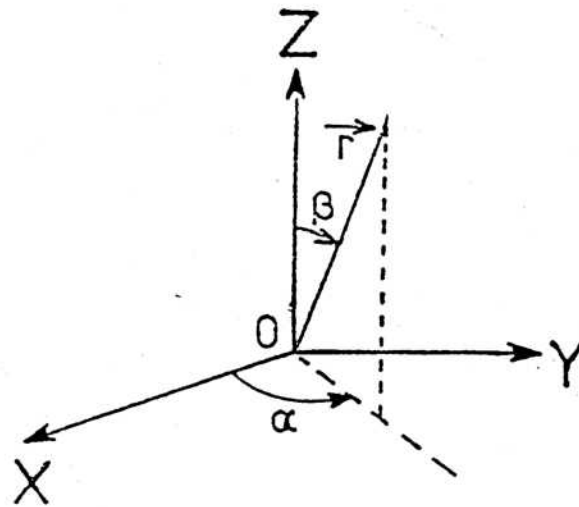


Figura 3: Coordenadas angulares del vector $\vec{r}$, normal a una familia de planos $\{hkl\}$, en el referencial cristal.

ner en evidencia la anisotropía de distribución de orientaciones cristalinas que presenta una muestra. Para poder calcular la FDOC relativa a dicha textura es necesario establecer una relación entre las densidades de polos y la función distribución.

Si se considera una figura de polos $\{hkl\}$, dichos polos son caracterizados por las direcciones $\bar{r}_n$ en el referencial cristal, con $1 \leq n \leq N$, donde N indica el factor de multiplicidad de dicha familia de planos $\{hkl\}$. Físicamente, los vectores $\bar{r}_n$ son indescernibles.

Todos los granos de la muestra orientados de forma tal que uno de los vectores $\bar{r}_n$ del referencial cristal sea paralelo a $\bar{e}$ en el referencial muestra, contribuyen a la intensidad difractada en un punto $\bar{e}$ de la figura de polos $\{hkl\}$.

Para cada vector $\bar{r}_n$ la intensidad difractada es independiente de una rotación γ alrededor de la normal $\bar{r}_n$ al plano difractante. Por lo tanto, la contribución debida a la totalidad de cristales que poseen la orientación $g_{\bar{r}_n}$ es proporcional a la integral $\int_0^{2\pi} F(g_{\bar{r}}) d\gamma$. La intensidad total difractada por una muestra texturada en un punto $\bar{e}$ de la figura de polos corresponde a la del conjunto de vectores $\bar{r}_n$.

$$I_{\bar{r}}(\bar{e}) = R \sum_{n=1}^N \int_0^{2\pi} F(g_{\bar{r}}) d\gamma$$

donde R es un factor de proporcionalidad.

De acuerdo a (1.1) la densidad de polos se puede escribir

$$q_{\bar{r}}(\bar{e}) = \frac{I_{\bar{r}}(\bar{e})}{I_{i_{\bar{r}}}(\bar{e})} = \frac{R \sum_{n=1}^N \int_0^{2\pi} F(g_{\bar{r}_n}) d\gamma}{R \sum_{n=1}^N \int_0^{2\pi} F_i(g_{\bar{r}_n}) d\gamma} \quad (1.3)$$

Si la FDOC es normalizada tal que $F_i(g_{\bar{r}_n}) = 1$ para una muestra isotrópi

ca, resulta:

$$q_{\vec{r}}(\vec{e}) = \frac{1}{2\pi N} \sum_{n=1}^N \int_0^{2\pi} F(g_{\vec{r}_n}) d\gamma$$

Como los vectores $\vec{r}_n$ son físicamente indistinguibles, se debe imponer a la FDOC el mismo valor para las N rotaciones $g_{\vec{r}_n}$. Esta imposición significa que el referencial cristal no es determinado de manera única, y que, por el contrario, pueden existir permutaciones cristalográficamente para los tres ejes. Por lo tanto, la ecuación a resolver resulta ser:

$$q_{\vec{r}}(\vec{e}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(g_{\vec{r}}) d\gamma \quad (1.4)$$

Esta ecuación conecta las informaciones $q_{\vec{r}}(\vec{e})$, recogidas experimentalmente, a la FDOC, que fue definida matemáticamente, para poder realizar una descripción cuantitativa de la textura de una muestra. La FDOC debe poseer todas las características físicas incluidas en las figuras de polos: simetrías de la ley de difracción cristalográfica, propiedades de simetría del cristal y de la muestra.

1.5 Cálculo de la Función Distribución de Orientaciones Cristalinas.

El cálculo de la FDOC se realiza de acuerdo a las propuestas de Bunge (1) y Roe (2), quienes desarrollan en serie de armónicos esféricos las funciones $q_{\vec{r}}(\vec{e})$ y $F(g_{\vec{r}})$, o sea:

$$q_{\vec{r}}(\vec{e}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Q_{lm}^{\vec{r}} Y_{lm}(\eta, \chi) \quad (1.5)$$

-donde los $Q_{lm}^{\vec{r}}$ son los coeficientes del desarrollo en serie y los Y_{lm} armónicos esféricos de superficie.

$$F(g_{\vec{r}}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l f_{lmn} \cdot Z_{mn}^l(\psi, \theta, \phi) \quad (1.6)$$

donde f_{lmn} son los coeficientes del desarrollo en serie y $Y_{lm}^1(\psi, \theta, \phi)$ son armónicos esféricos generalizados.

Introduciendo (1.6) en (1.4) se puede llegar a la siguiente expresión de $q_r^-(\bar{e})$:

$$\int_0^{2\pi} F(g_r^-) d\gamma = \sum_l \sum_m \sum_n 2\pi \left(\frac{2}{2l+1}\right)^{1/2} \cdot f_{lmn} \cdot Y_l^{n*}(\alpha, \beta) \cdot Y_l^m(\eta, \chi) \quad (1.7)$$

Por unicidad de los desarrollos en series, comparando miembro a miembro los términos de los desarrollos (1.5) y (1.7) resulta:

$$Q_{lm}^{\bar{r}} = 2\pi \left(\frac{2}{2l+1}\right)^{1/2} \sum_{n=-l}^l f_{lmn} \cdot Y_l^{n*}(\alpha, \beta) \quad (1.8)$$

donde los coeficientes $Q_{lm}^{\bar{r}}$, relativos a la figura de polos para la cual $\bar{r}$ caracteriza a la normal a los planos difractantes, pueden ser calculados a partir de los valores $q_r^-(\bar{e})$ obtenidos experimentalmente. Haciendo uso de las propiedades de ortogonalidad de armónicos esféricos de superficie se obtiene.

$$Q_{lm}^{\bar{r}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} q_r^-(\bar{e}) \cdot Y_l^{m*}(\eta, \chi) \sin \chi \, d\chi \, d\eta \quad (1.9)$$

Resulta entonces posible calcular los coeficientes f_{lmn} de la FDOC a partir de los $Q_{lm}^{\bar{r}}$ resolviendo el sistema (1.8) de $(2l+1)$ ecuaciones lineales para cada valor de l . A tal fin se adaptaron programas de cálculo escrito por Pernot (3) y Dervin (4). Las consideraciones sobre simetrías, que se discuten en la próxima sección, permiten disminuir el número de coeficientes a calcular. Sin embargo, conviene remarcar que el número limitado de figuras de polos obtenidas experimentalmente no permiten un desarrollo que sobrepase un valor límite de 1, más allá del cual el número de incógnitas f_{lmn} será mayor que el número de ecuaciones (1.8), con lo cual el sistema quedará sin solución.

1.5.1 Consecuencias de las simetrías en el cálculo de la FDOC.

Al analizar los efectos de las simetrías sobre los elementos de cálculo de la FDOC, se debe tener en cuenta:

- La centrosimetría de la difracción (Ley de Friedel).
- La simetría ortotrópica de tubos y chapas laminadas.
Consecuencia de la misma, los planos perpendiculares a las direcciones DA(DL), DT y DR (DN) son planos de simetría.
- Los elementos de simetría del cristal.

Para un material de estructura hexagonal resulta:

a) Q_{lm}^r es real para todo valor de $\underline{l}$ y $\underline{m}$.

b) $flmn$ es real para todo valor de $\underline{l}$ y $\underline{m}$

$$c) Q_{lm}^r = \begin{cases} Q_{lm}^r & \text{si } \underline{l} \text{ y } \underline{m} \text{ son pares} \\ 0 & \text{si } \underline{l} \text{ y } \underline{m} \text{ es impar} \end{cases}$$

$$d) flmn \begin{cases} fl\bar{m}\bar{n} = fl\bar{m}n = flm\bar{n} & \text{si } \underline{l} \text{ y } \underline{m} \text{ son pares y } \underline{n} \text{ múltiplo de 6.} \\ = 0 & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

Si se agregan las relaciones lineales existentes entre los $flmn$ como consecuencia de la simetría de rotación de orden 6 alrededor del eje $\bar{c}$ del cristal, el número de coeficientes $flmn$ a calcular se reduce considerablemente, como se puede observar en la tabla I.

Orden desarrollo	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22
N°coef. indep. $flmn$ a calcular	3	6	14	24	36	57	81	108	148	192	248
N° mínimo de figuras de polos	1		2			3			4		

T A B L A I

Las consideraciones de simetría sobre los $flmn$ también permiten reducir el dominio del espacio de Euler sobre el cual se define la función distribu-

ción, siendo en este caso:

$$0 \leq \chi \leq \frac{\pi}{2}, \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad 0 \leq \psi \leq \frac{\pi}{3}$$

1.5.2 Estimación de la precisión de la representación de texturas.

Se pueden distinguir tres tipos de errores:

- Los errores experimentales en la determinación de figuras de polos.
- Errores introducidos por la truncación de las series a un orden l.
- Los errores introducidos por los métodos numéricos utilizados en la integración.

La validez de la FDOC puede ser controlada por un cálculo de retorno. A partir de los coeficientes $flmn$, calculados por un método de cuadrados mínimos sobre las figuras de polos medidas, se recalcula Q_{lm}^r (ecuación 1.8) y luego las figuras de polos (ec.1.5). La comparación de las figuras de polos experimentales y recalculadas da una idea de la precisión de la representación de texturas.

Para cada figura de polos se define

$$ETI = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} (q \bar{r}(\eta, \xi)_{\text{medido}} - q \bar{r}(\eta, \xi)_{\text{recalc.}})^2 d\xi d\eta^{1/2}$$

con $d\xi = \sin \chi d\chi$

Esta expresión permite estimar un error global sobre cada figura de polo, pudiéndose también estimar la precisión a partir del valor de la desviación standart (TRC), cuyo valor varía entre 0 y 1. Se define

$$TRC = \frac{ETI}{\overline{TEX}} \quad (1.12)$$

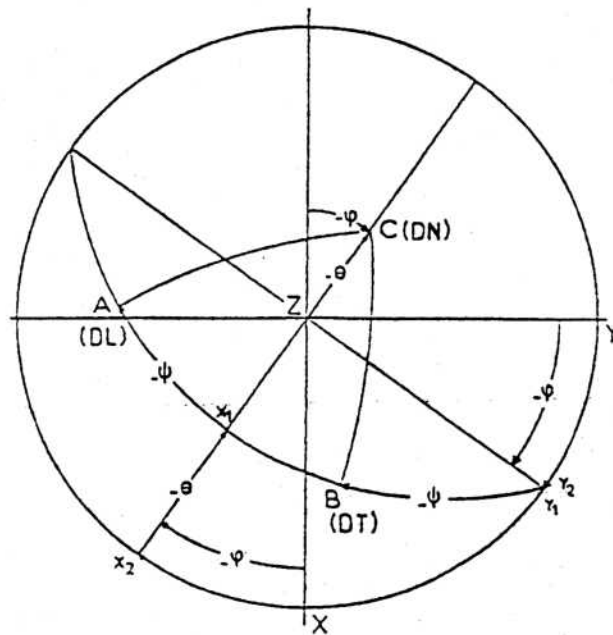
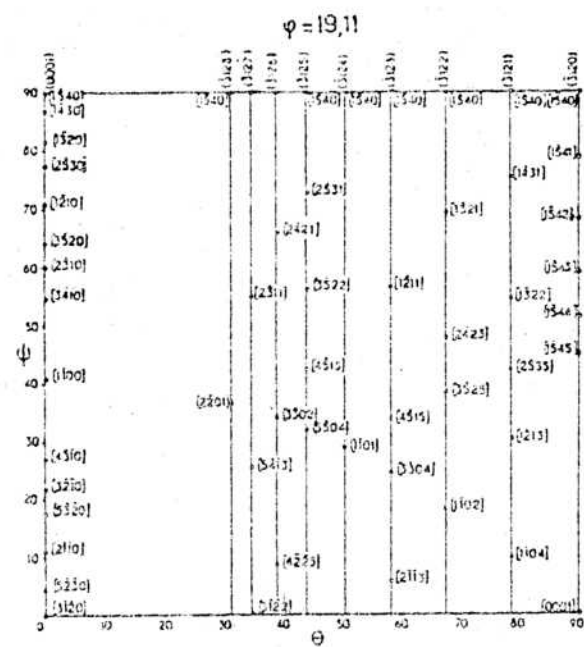
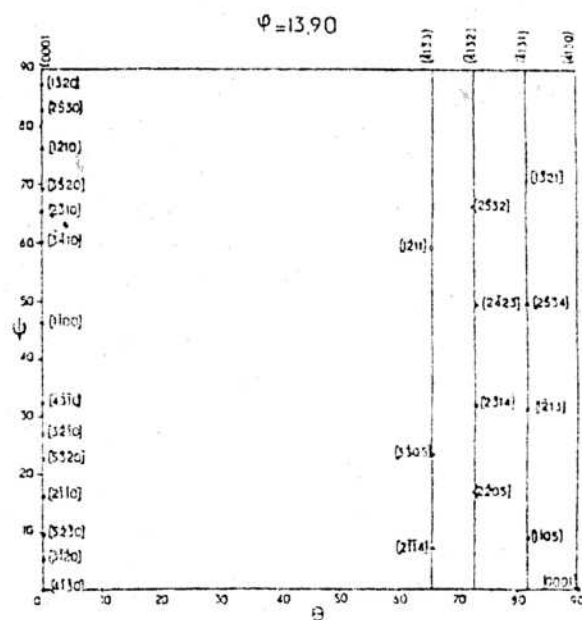
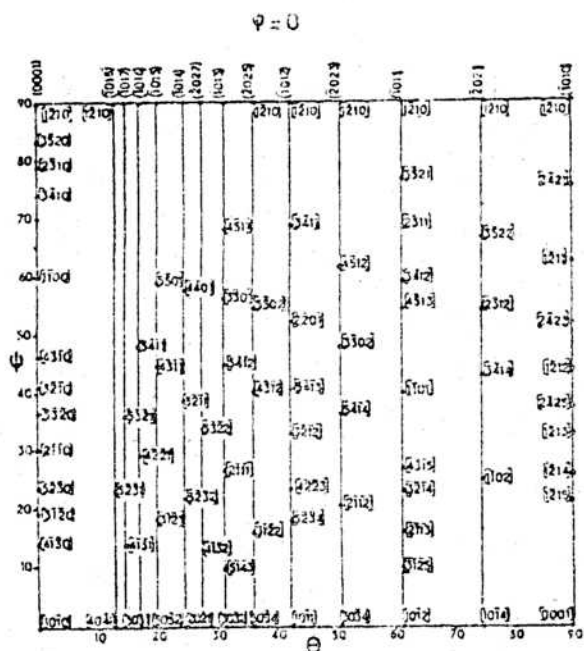


Figura 4: Representación, en una proyección estereográfica, del pasaje del referencial cristal al referencial muestra.



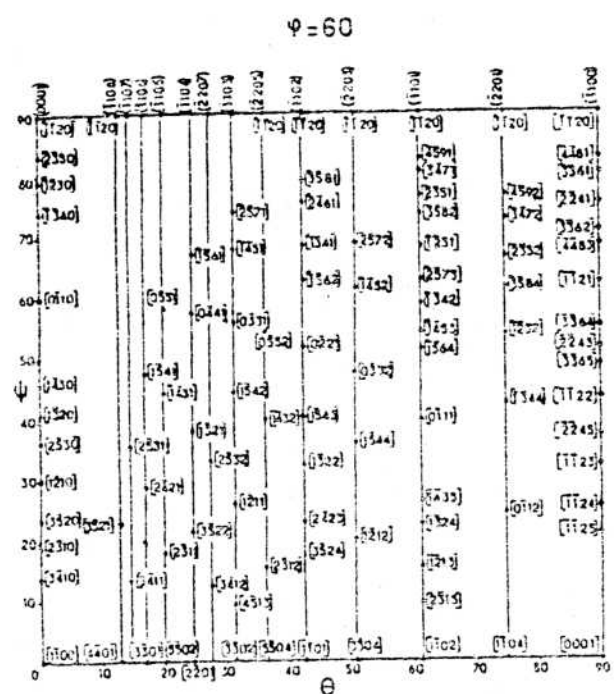
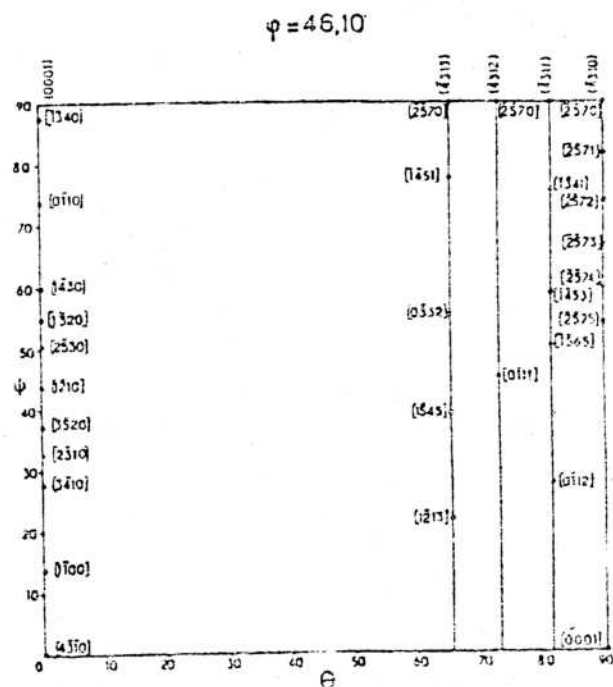
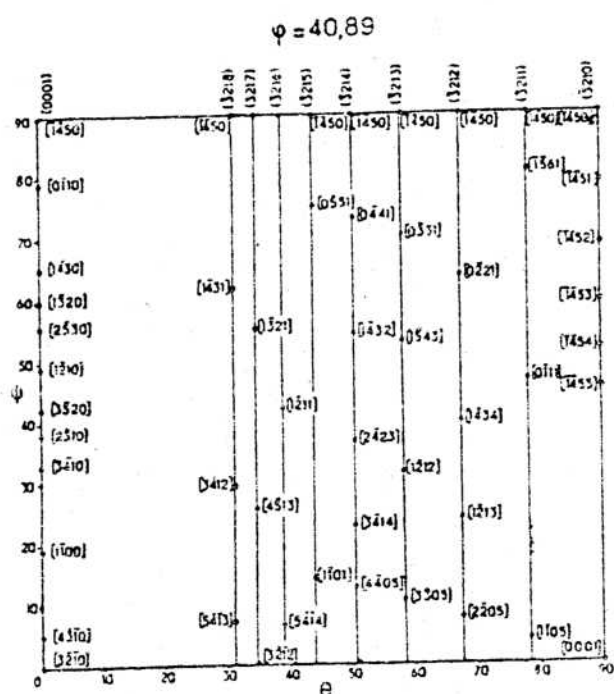


Figura 5: Abacos para la interpretación de la FDOC de un material de estructura hexagonal.

$$\text{siendo } \text{TEX} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} \bar{q}_{\text{medido}}^2(\eta, \xi) d\xi d\eta^{1/2}$$

En general, un cálculo al orden 1=16 corresponde a un valor de TRC ≤ 0.15 , el que indica una aceptable precisión en la descripción de la textura. Es posible mejorar la precisión aumentando el orden 1 del desarrollo en serie pero este hecho trae aparejado un fuerte aumento del tiempo de cálculo, pues, según la Tabla I, el número de coeficientes flmn a calcular prácticamente se duplica al pasar del orden 1=16 a 1=20 y requiere además la obtención de una cuarta figura de polos experimental.

1.6 Representación de la FDOC.

La representación de la FDOC se basa en la necesidad de conocer las distintas componentes de texturas presentes en una muestra.

Esto implica conocer las familias de planos $\{hkl\}$ que tengan su normal coincidente con la DR(DN) y una dada dirección $\langle uvw \rangle$ coincidente con la dirección DA (DL).

La FDOC es función de los ángulos de Euler (ψ, θ, ϕ) . En la fig. (1) se han definido dichos ángulos. Para conocer en que orientación la dirección DR coincide con un cierto polo $\{hkl\}$ y la dirección axial con una cierta dada dirección $\langle uvw \rangle$, se utiliza una proyección estereográfica en la que está definida la terna (XYZ) fija al cristal, fig. (4). Se elige como ejemplo un cristal hexagonal. Si el orden de rotaciones que permiten ubicar la terna (XYZ) a partir de la terna es (ψ, θ, ϕ) , el orden para ubicar a la terna (DA, DT, DR) a partir de (XYZ) será $(-\phi, -\theta, -\psi)$. Por consiguiente, una rotación $-\phi$ alrededor del eje Z y una rotación $-\theta$ alrededor de y' en la fig. (4) ubicará a la DR coincidente con un cierto polo $\{hkil\}$, y luego una rotación $-\psi$ alrededor de DR permitirá conocer la dirección $\langle uvtw \rangle$ paralela a la (DA). Este es el principio de generación de los ábacos de la fig. (5). En ellos, un corte de espacio de Euler a $\phi = \text{cte.}$ indicará, para cada valor del ángulo θ , que familia $\{hkil\}$ tiene su polo paralelo a la dirección normal. El ángulo ψ permitirá ubicar

a la dirección normal $\langle uvw \rangle$ coincidente con DA.

2. PARTE EXPERIMENTAL

2.1 Condiciones generales.

- Se analizó la textura cristalográfica de una vaina del elemento combustible tipo CANDU. Se obtuvieron las figuras de polos $\{10\bar{1}0\}$, (0002) y $\{10\bar{1}1\}$ mediante el método de reflexión-transmisión de acuerdo al procedimiento seguido por Pernot (3).

La muestra obtenida a partir del torneado exterior de un segmento de la vaina de 25mm de longitud hasta llegarlo a un espesor de pared de 0.2mm, el cual fue posteriormente reducido, por ataque químico, a 0.05mm para la etapa de reflexión y 0.01mm para transmisión.

En las experiencias se utilizó un goniómetro Siemens standard con un radio de 222mm y radiación Cu K α filtrada a 40 Kv y 20 mA. Las intensidades fueron medidas por un detector proporcional asociado a una electrónica Camberra, que permite la impresión de las mismas en una teletipo. Los datos fueron luego volcados a una cinta magnética que fue utilizada en la computadora IBM 370. En ella mediante programas escritos en Fortran IV se realizan todos los cálculos necesarios para obtener las figuras de polos normalizadas y la FDOC correspondiente.

2.2 Reflexión.

Como a partir del espesor mencionado el material adquiere gran flexibilidad, dicho segmento fue cortado longitudinalmente y pegado sobre una chapa de Aluminio. Posteriormente se cortó un disco de 25mm de diámetro que fue utilizado como muestra.

Para corregir las intensidades por defocalización se utilizó el método desarrollado por Ortiz y Hermida (5), por lo cual se fijó, para cada ángulo de difracción, la ranura de apertura del goniómetro de forma tal que la zona irradiada tuviera un semiancho de 4mm. El ancho y alto de la ranura de recepción fueron fijados en 2mm y 10mm respectivamente.

Se trabajó con una velocidad angular $V_{\eta}=1^{\circ}\text{seg.}^{-1}$. Las medidas fueron realizadas en 15 círculos, desde $\chi=0^{\circ}$ hasta $\chi=70^{\circ}$, a intervalos de 5° . Se contó cada 5 segundos y, dado que el tiempo de impresión es de 1 seg. se obtuvieron 60 datos por círculo.

2.3 Transmisión.

A fin de realizar la corrección por la pérdida de volumen difractante, se midió el coeficiente u_t mediante la colocación de la muestra en el camino del haz difractado por un monocristal de cuarzo. El resultado obtenido fue $u_t=0.95$. Como este goniómetro no está realmente preparado para realizar medidas en transmisión, hubo que hacer algunas modificaciones. Se eliminó el movimiento de vaivén que realiza el promedio de intensidades, dado que el cable flexible que transmite el movimiento interrumpe al haz difractado en ciertas posiciones del ángulo de giro χ (figura 2). Por esta razón, se eligió un ancho y un alto de la ranura de apertura que produjera una zona irradiada de $8 \times 8\text{mm}$ para cada ángulo de difracción. El ancho de la ranura de recepción fue aumentando a 4 mm. para tener en cuenta el ensanchamiento de los picos que produce una zona irradiada grande.

Fueron realizados 7 círculos de mediciones desde $\chi=90^{\circ}$ hasta $\chi=60^{\circ}$ a intervalos de 5° . En estas condiciones experimentales, la única velocidad disponible es de $V_{\eta}=0,5^{\circ}\text{seg.}^{-1}$, por lo tanto fueron registrados 120 datos por círculos, los cuales fueron luego reducidos a 60 en el programa de cálculo, para equipararlos en el caso de reflexión. En ciertas zonas de los círculos de $\chi=60^{\circ}$, el portamuestra interrumpe al haz difractado en intervalos angulares variables de acuerdo al ángulo de difracción. Como fueron elegidos los círculos de $\chi=60^{\circ}$, 65° y 70° para realizar el empalme entre reflexión y transmisión, fue necesario hacer una corrección de este fenómeno teniendo en cuenta la ortotropía de la muestra. Por esta razón se reemplazaron los valores afectados por los valores simétricos correspondientes.

3. ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS

3.1 Figuras de polos.

En la fig (6a-b) pueden observarse las figuras de polos (0002) y $\{10\bar{1}0\}$ del tubo Candú. En la primera de ellas existe la clásica concentración de intensidades alrededor de DR con máximos ubicados en $\eta=90^{\circ}$ y $\chi=\pm 30^{\circ}$.

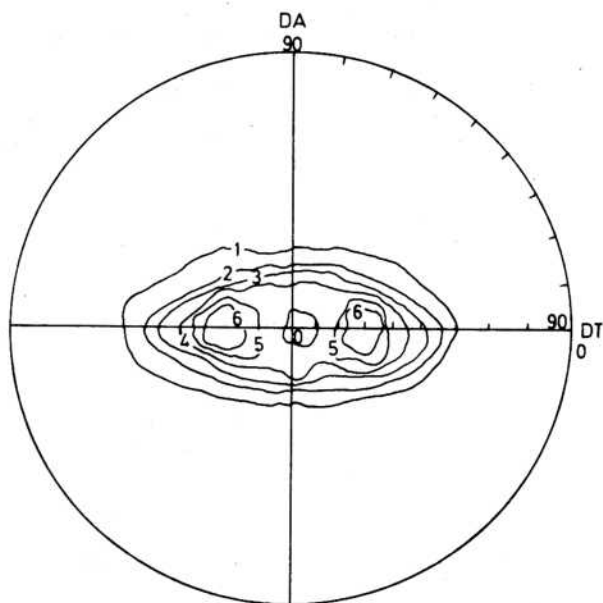


Fig. 6 - a

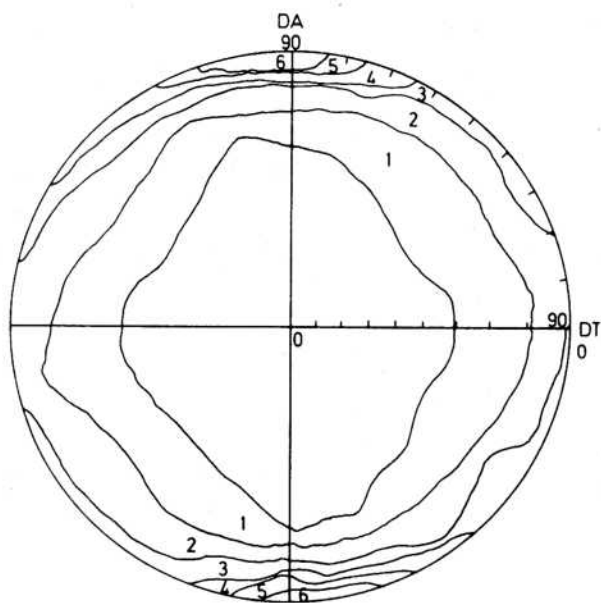


Fig. 6 - b

Figura 6: Figura de polos de una vaina de elementos combustibles tipo Candú. (a) (0002); (b) $\{10\bar{1}0\}$.

En la figura de polos $\{10\bar{1}0\}$ se observa una distribución creciente de intensidades a partir de $\chi=60^\circ$ para todo valor de η y máximos

alrededor de $\eta=0-180^\circ$ y $\chi=90^\circ$. Una primera interpretación de las componentes de textura puede ser realizada utilizando la proyección estereográfica de monocristales equivalentes. En la fig. (7.a) se muestra la proyección de un monocristal con su polo basal paralelo a la DR y la dirección $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ paralela a la DA, la cual es indicada por los siguientes símbolos: $\times$: $|0002|$, $\boxtimes$: $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ (Caso a). En la misma figura también se muestra la proyección resultante de rotar el monocristal 30° alrededor de la DA, la cual es indicada mediante los siguientes símbolos: $+$: $|0002|$, y $\boxplus$: $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ (Caso b). En la fig. (7.b) se muestra el esquema anterior pero con la dirección $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ ubicada inicialmente a 30° de la DA, lo cual es equivalente a decir que la dirección $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ coincide con la DA (casos c y d). Los cuatro casos mencionados representan las siguientes componentes de textura.

<u>CASOS</u>	<u>COMP. TEXTURAS</u>
a	(0002) $\langle 10\bar{1}0 \rangle$
b	(1 $\bar{2}$ 15) $\langle 10\bar{1}0 \rangle$
c	(0002) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$
d	(01 $\bar{1}$ 3) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$

En la fig. (8) se muestran los planes y las direcciones cristalográficas citados en los casos b y d.

Analizando las figuras de polos (0002) y $\{10\bar{1}0\}$, con referencia a estas cuatro componentes puede apreciarse que están todas presentes, sin que sea posible evaluar el peso y la dispersión de la misma. La FDOC permite justamente realizar esta evaluación.

3.2 Análisis de la FDOC.

En la fig. (9) se representan los cortes de la FDOC del tubo Candú para valores $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 20^\circ, 30^\circ$ y 45° . La FDOC presenta sus valores máximos sobre las regiones de los cortes vecinas a $\psi=90^\circ$ y $0^\circ < \theta < 45^\circ$, pudiéndose considerar a la función como nula en la región definida por $\theta > 60^\circ$.

A fin de estudiar la distribución de orientaciones de la DR en el refe

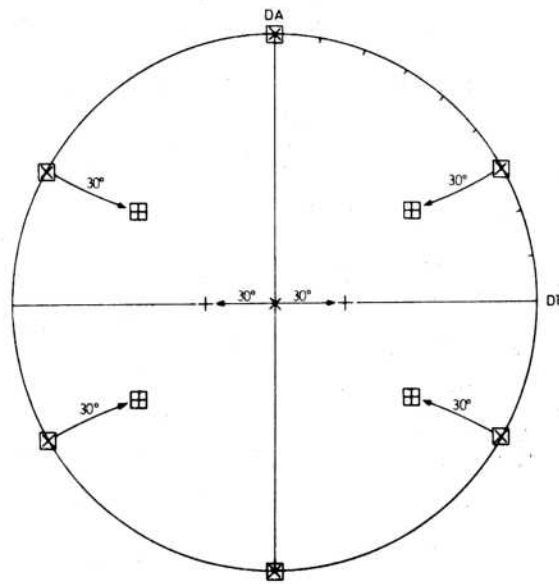


Fig. 7 - a

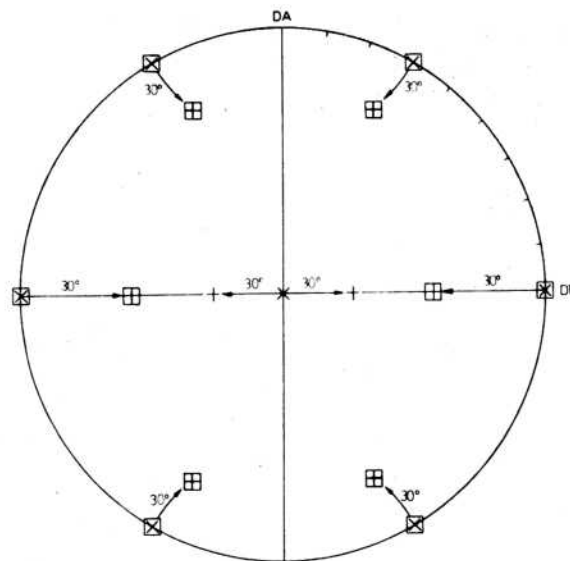


Fig. 7 - b

Figura 7: Representación de los polos $|0002|$ y $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ en el referencial muestra para dos orientaciones distintas del primero de ellos: $\chi=0^\circ$ y $\chi=30^\circ$. (a) $\langle 10\bar{1}0 \rangle // DA$; (b) $\langle 11\bar{2}0 \rangle // DA$.

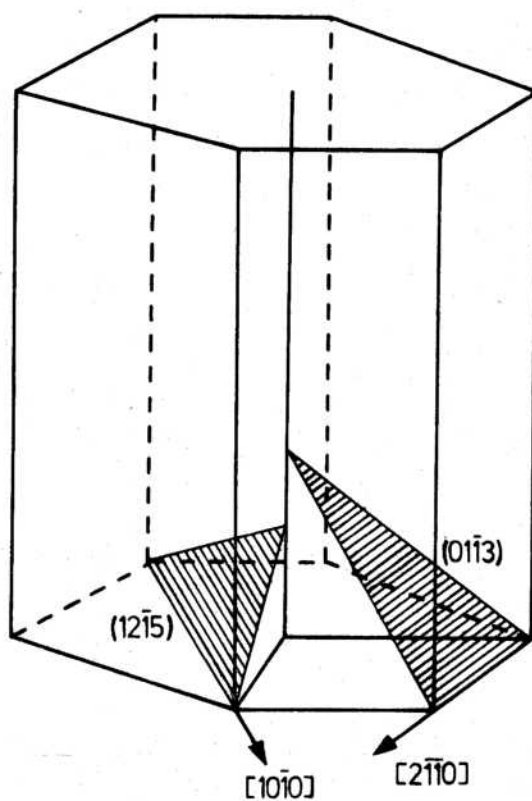


Figura 8: Representación de los planos (0002) y $(12\bar{1}5)$ y de las direcciones $[2\bar{1}\bar{1}0]$ y $[10\bar{1}0]$ en una celda hexagonal.

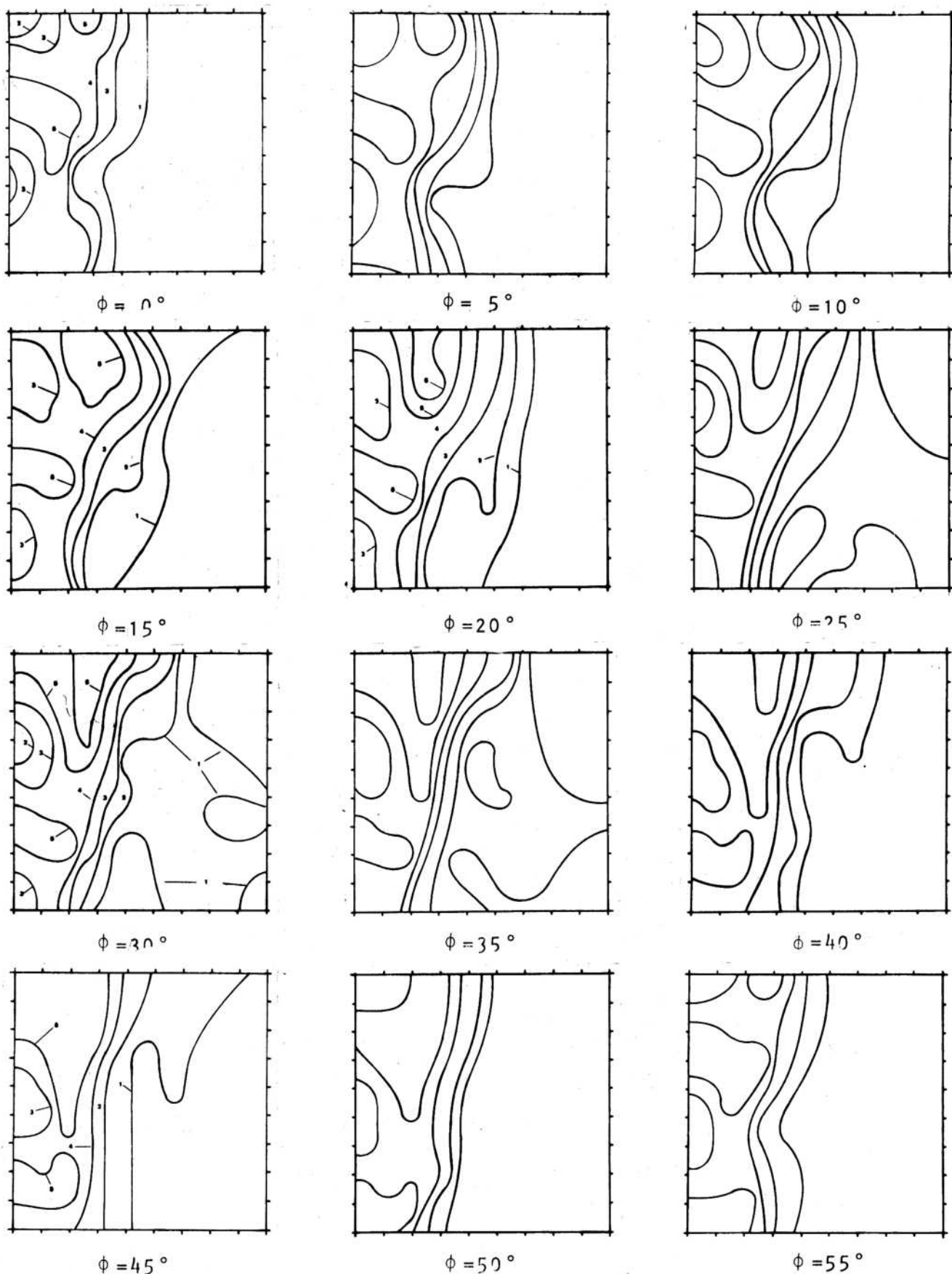
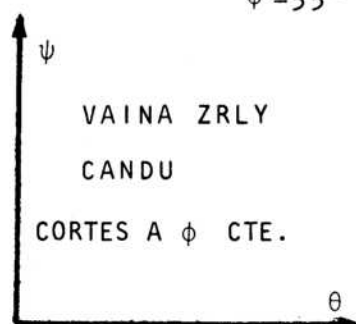


Figura 9: Cortes de la FDOC a ϕ cte.
de la vaina de elementos combustibles
Candú.



rencial cristal, se muestra en la fig. (10) la evolución de la FDOC en función del ángulo θ para $\psi=90^\circ$ y $\phi=0(60)$, $20(40)$ y 30° , siendo las curvas correspondientes a los valores entre paréntesis iguales a las curvas de los precedentes. El máximo absoluto de la FDOC se ubica alrededor de $\theta=30^\circ$ para $\phi=30^\circ$, cercana a una orientación ideal $(\bar{2}115) [01\bar{1}0]$, como puede verse en el ábaco correspondiente de la fig. (5). Para $\phi=0^\circ$ y 20° las curvas correspondientes muestran asimismo máximos pronunciados alrededor de $\theta=30^\circ$, los que están asociados a las siguientes componentes de textura:

$$\phi=0^\circ : (\bar{1}013) [1\bar{2}10]$$

$$\phi=19,1^\circ : (\bar{3}128) [1\bar{5}40]$$

También se puede apreciar que, en la curva de $\phi=30^\circ$, además de la componente mencionada $(\bar{2}115) [01\bar{1}0]$, existe una componente $(0002) [01\bar{1}0]$ para $\theta=0^\circ$. De otra parte, la dispersión asociada a cada una de estas componentes implicaría la existencia de componentes menores de textura, como las $(\bar{2}118) \langle 0\bar{1}10 \rangle$, $(\bar{2}114) \langle 0\bar{1}10 \rangle$, $(\bar{2}114) \langle 0\bar{1}10 \rangle$ y $(\bar{2}113) \langle 0\bar{1}10 \rangle$ para valores de $\theta=20, 40$ y 50° respectivamente, como se puede observar en el ábaco correspondiente de la fig. (5). Un análisis equivalente puede hacerse para los otros valores de ϕ .

Como la FDOC también presenta valores relativamente altos para $\psi=90$, es importante conocer la dispersión de la DA en el referencial cristal. En la fig. (11) se representa la FDOC en función de ψ , para distintos valores de θ y $\phi=30^\circ$, ángulo al que corresponde la curva de mayores valores de distribución de la DR. Para $\theta=0^\circ$ la FDOC representa a una componente de textura $(0002) \langle uvtw \rangle$, oscilando entre valores máximos y mínimos correspondientes a direcciones $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ y $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ respectivamente. La componente $(2115) \langle uvtw \rangle$ está representada por la curva para $\theta=30^\circ$, la cual toma valores decrecientes desde $\psi=90^\circ$ alcanzando la mitad de su valor máximo en $\psi=35^\circ$. Para ángulos comprendidos entre $0 < \theta < 30^\circ$ la FDOC adopta un comportamiento intermedio, siguiendo los mayores valores de las curvas correspondientes a $\theta=0^\circ$ y 30° , como se puede observar para $\theta=20^\circ$ en la fig. (11). Para valores de $\theta > 40^\circ$ la FDOC cae rápidamente a partir de $\psi = 90^\circ$.

3.3 Relación entre la FDOC y las figuras de polos.

Es de gran valor didáctico analizar la reconstrucción de las figuras de

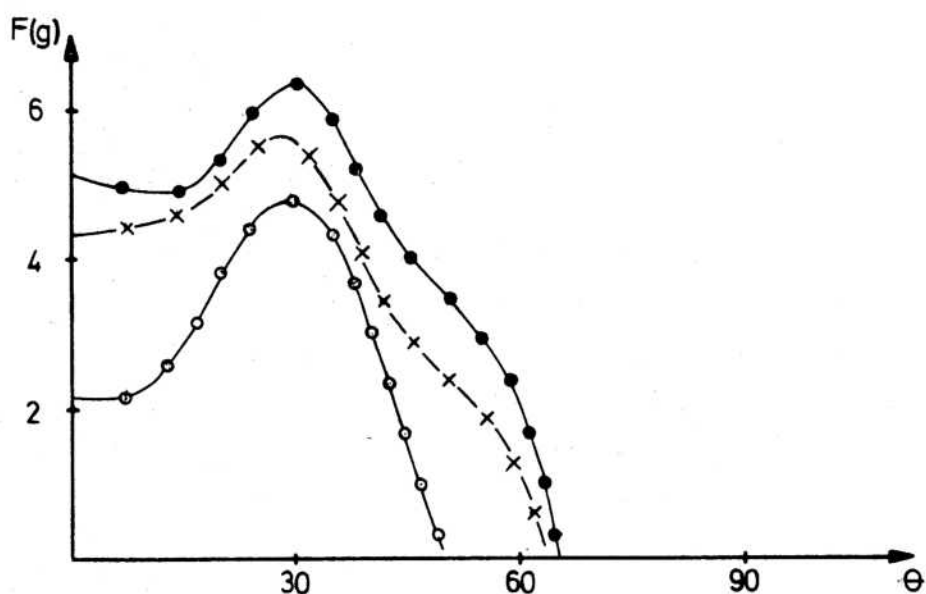


Figura 10: Evolución de la FDOC en función del ángulo θ para

$\psi=90^\circ$:

o : $\phi=0(60)^\circ$ {hki1} $\langle 12\bar{1}0 \rangle$,

x : $\phi=20(40)^\circ$ {hki1} $\langle 1\bar{5}40 \rangle$,

o : $\phi=30^\circ$ {hki1} $\langle 01\bar{1}0 \rangle$.

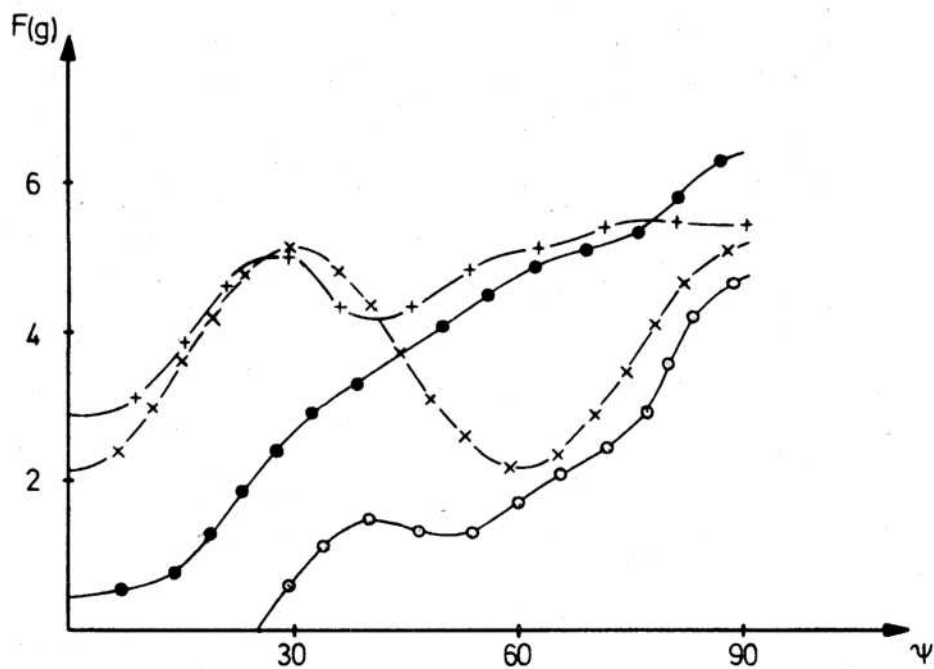


Figura 11: Evolución de la FDOC en función de ψ para $\phi=30^\circ$

x : $\theta=0^\circ$ (0002) $\langle uv\bar{t}w \rangle$,

+ : $\theta=20^\circ$ ($\bar{2}118$) $\langle uv\bar{t}w \rangle$,

o : $\theta=30^\circ$ ($\bar{2}115$) $\langle uv\bar{t}w \rangle$,

o : $\theta=40^\circ$ ($\bar{2}114$) $\langle uv\bar{t}w \rangle$.

polos a partir de la FDOC.

En la sección anterior se ha visto que los máximos de la FDOC se hallan en $\psi=90^\circ$, $\theta=30^\circ$ y diversos valores de ϕ . En el referencial muestra de la Fig. (12), la rotación inicial $\psi=90^\circ$ permite pasar del sistema X//DA, Y//DT y Z//DR a un nuevo sistema (X', Y', Z'). La rotación de un ángulo θ alrededor del eje Y' lleva al nuevo sistema (X'', Y'' $\equiv$ Y', Z''). Como el eje Z original coincide con la dirección $[0001]$, este procedimiento permite obtener la figura de polos (0002). Finalmente, la rotación ψ alrededor de Z'' lleva a la configuración (X_f, Y_f, Z_f $\equiv$ Z''), y, como X_f coincide con la dirección $\langle 10\bar{1}0 \rangle$, se obtiene entonces la figura de polos $(10\bar{1}0)$. A continuación se aplica este análisis a los principales componentes de texturas, utilizando el código definido en la Tabla II.

N°	ψ	θ	ϕ	Com. Textura
1	90	30	30	$(\bar{2}115) \langle 0\bar{1}10 \rangle$
2	90	30	0/60	$(\bar{1}013) \langle 1\bar{2}10 \rangle$
3	90	40	30	$(\bar{2}114) \langle 0\bar{1}10 \rangle$
4	90	0	0/60	$(0001) \langle 1\bar{2}10 \rangle$
5	90	0	30	$(0001) \langle 0\bar{1}10 \rangle$
6	65	30	30	$(2\bar{1}16) \langle 2\bar{5}31 \rangle$

TABLA II

En la fig. (12) se posicionan los ejes $[0001]$ y $[10\bar{1}0]$ los que se indican con los signos $\odot$ y $\circ$ respectivamente.

Los puntos 1 y 2 poseen la misma orientación del eje $\bar{C}$ del cristal pues corresponden a un mismo valor de las coordenadas ψ y θ . Si tenemos en cuenta que a estas coordenadas corresponden los máximos valores de la FDOC, es inmediato comprender la existencia del máximo de intensidad difractada en la figura de polos (0002) en dicha posición.

Sin embargo, los ejes $|10\bar{1}0|$ no coincidirán al corresponder a distintos valores de ϕ .

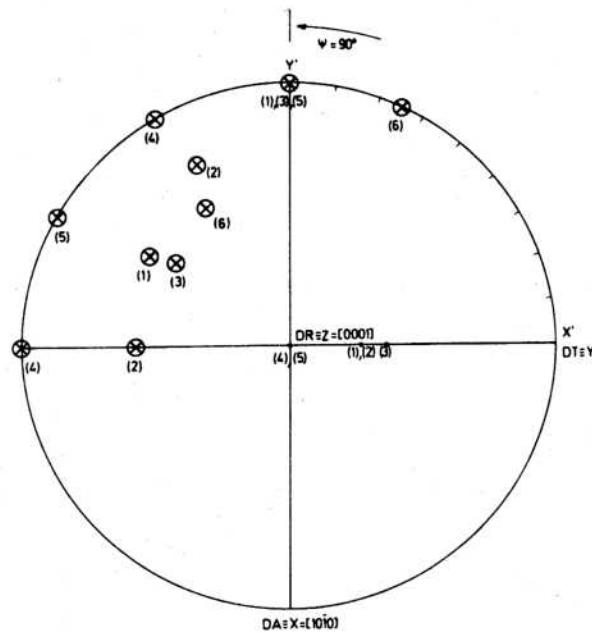


Figura 12: Representación de los ejes $[0001]$ y $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ para las distintas componentes de textura indicadas en la tabla II.

El punto 3, de igual coordenadas ψ y ϕ que el punto 1, tendrá una de las direcciones de la forma $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ coincidentes con la DA. Los puntos 4 y 5 muestran el efecto de la variación de la coordenada ϕ en las orientaciones de las direcciones $\langle 1010 \rangle$.

La superposición 1, 3 y 5 con la DA permite justificar los máximos de la figura de polos $(10\bar{1}0)$ coincidentes con dicha dirección.

Los puntos con coordenadas $\psi = 90^\circ$, por ejemplo el 6, muestran la dispersión alrededor del máximo de la figura de polos (0002) .

4. CONCLUSIONES

Se ha demostrado que la FDOC permite realizar un análisis más completo de la textura cristalográfica comparado con el que se puede obtener del simple análisis de figuras de polos, al brindar información sobre el peso y dispersión de las distintas componentes.

Los resultados obtenidos para un tubo tipo Candú muestran la existencia de las siguientes componentes importantes:

$(\bar{2}115)$	$\langle 0\bar{1}10 \rangle$
$(\bar{3}128)$	$\langle 1\bar{5}40 \rangle$
$(\bar{1}013)$	$\langle 1\bar{2}10 \rangle$
$(\bar{2}114)$	$\langle 0\bar{1}10 \rangle$
(0001)	$\langle 0\bar{1}10 \rangle$
(0001)	$\langle 1\bar{2}10 \rangle$

Siendo la primera de ellas la principal. La existencia de las 5 componentes, sumadas a la de otras de menor peso, imposibilita la comúnmente vista reducción de la textura del tubo a un monocristal equivalente orientado a $\psi=90^\circ$, $\theta=30^\circ$ y $\phi=30^\circ$ (Componente principal).

Una mejor representación de la textura se podría realizar mediante el cálculo de la fracción de volumen de la muestra asociada a cada componente (ecuac. 1.2), cuantificando así el peso correspondiente. De esta forma, la textura del policristal podría reducirse más adecuadamente a un cierto núme

ro de monocristales asociados a cada componente importante con su peso correspondiente.

La utilidad de esta representación se pondría de manifiesto al reducir la descripción de una propiedad física X del material, expresada por:

$$\bar{X} = \int_g X(g) \cdot F(g) \, dg$$

donde $X(g)$ es el valor de la propiedad en estudio para la orientación g , a una expresión del tipo

$$\bar{X} = \sum_i X(g)_i \cdot \left[\frac{\Delta V}{V_0}(g) \right]_i$$

con un ahorro significativo de tiempo y costo de cálculo.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.

- (1) H.J. Bunge, "Mathematische Methoden der texturanalyse", Berlín, Akademie Verlag (1968)
- (2) R.J. Roe, J. Appl. Phys. 36 (1965), 2024.
- (3) M. Pernot, Tesis de Dr. en Ciencias, Univ. París XI, 1977.
- (4) P. Dervin, Tesis de Dr. Ingeniero, Univ. París XI, 1978.
- (5) M. Ortiz y J.D. Hermida, Texture, 4,1 (1980) 57.

AGRADECIMIENTOS

Queremos manifestar nuestro agradecimiento a :

- La Srta Gloria Fernández por el mecanografiado del trabajo.
- El Sr. Jorge Casso por la colaboración técnica brindada.
- El Sr. Félix Segovia por el trabajo fotográfico realizado.
- Al PPFAE por el apoyo material brindado .