

Tesis de Posgrado

Influencia de la textura en la anisotropía de propiedades macroscópicas en materiales cristalinos

Ortiz Albuixech, María

1993

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Ortiz Albuixech, María. (1993). Influencia de la textura en la anisotropía de propiedades macroscópicas en materiales cristalinos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2573_OrtizAlbuixech.pdf

Cita tipo Chicago:

Ortiz Albuixech, María. "Influencia de la textura en la anisotropía de propiedades macroscópicas en materiales cristalinos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1993. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2573_OrtizAlbuixech.pdf

Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Tema de Tesis:

Influencia de la textura en la anisotropía de propiedades macroscópicas
en materiales cristalinos

Autor:

María Ortiz Albuixech

Director de Tesis:

Dr. Alberto A. Pochettino

Lugar de Trabajo:

Comisión Nacional de Energía Atómica
Departamento Materiales

Tesis presentada para optar al título de
Doctor en Ciencias Físicas

- 1993 -

1885
2573
4,2

A mis padres

Paco y María

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi agradecimiento:

Al Dr. Alberto A. Pochettino por la dirección de esta Tesis y por su orientación y colaboración en la realización de la misma.

A mis compañeros de trabajo del Departamento Materiales por su compañerismo y permanente ayuda.

Al Ing. Alfredo M. Hey por sus valiosas sugerencias y opiniones, las cuales enriquecieron este trabajo.

A la Dra. Delia E. Arias por su afecto y sus consejos.

Al Lic. Jorge D. Hermida, que me transmitió los primeros conocimientos en difracción de rayos X.

Al Sr. José A. Marengo por su importante aporte en el diseño y construcción del equipo para medición de módulo de Young.

Al Proyecto Multinacional de Investigación y Desarrollo en Materiales OEA-CNEA por el apoyo recibido en la realización de este trabajo.

INDICE

Introducción.....	1
I. Texturas cristalográficas.....	7
1.1 Introducción al problema de la descripción de la textura.....	7
1.1.1 Determinación experimental de la textura.....	8
1.1.2 Descripción cualitativa de la textura.....	11
1.2 Resultados experimentales.....	14
II. Promedio de magnitudes tensoriales.....	27
2.1 Introducción al problema de los promedios.....	27
2.2 Cálculo del promedio utilizando la FDOC.....	31
III. Coeficientes de dilatación térmica.....	33
3.1 Promedio de un tensor de segundo orden.....	33
3.2 Coeficientes de dilatación térmica en materiales de estructura cristalina hexagonal y simetría ortotrópica de la muestra.....	35
3.3 Aplicaciones al Zr, Zircaloy-4 y Ti.....	39
3.4 Conclusiones.....	49
IV. Elasticidad.....	50
4.1 Elasticidad en monocristales.....	50
4.2 Elasticidad en policristales. Promedio de un tensor de cuarto orden	52
4.3 Policristales con estructura cristalina cúbica.....	53
4.3.1 Cálculo del módulo de Young en el plano de una chapa.....	55

4.3.2	Significado físico de los coeficientes de textura.....	58
4.3.3	Cálculo del módulo de Young en alambres con simetría de revolución.....	59
4.3.4	Aplicaciones a chapas de cobre y aceros.....	62
4.3.5	Aplicaciones a alambres de cobre trefilados.....	75
4.4	Policristales con estructura cristalina hexagonal.....	82
4.4.1	Aplicaciones a chapas de Zr, Zircaloy-4 y Ti.....	87
4.5	Conclusiones.....	93
V.	Tensiones residuales.....	95
5:1	Principio de medida de tensiones residuales por difracción de rayos X.....	97
5.2	Constantes elásticas radiocristalográficas.....	100
5.3	Cálculo de las CER en el caso de materiales isótropos.....	105
5.3.1	Materiales con estructura cristalina cúbica.....	108
5.3.2	Materiales con estructura cristalina hexagonal.....	110
5.4	Cálculo de las CER en materiales texturados con estructura cristalina hexagonal.....	113
5.4.1	Aplicaciones a Zr, Zircaloy-4, Ti y Zn.....	119
5.4.2	Análisis del apartamiento del comportamiento isotrópico en materiales hexagonales en la aproximación de Reuss.....	134
5.5	Determinación experimental de las CER.....	143
5.6	Conclusiones.....	146

APENDICE I. Matrices de pasaje entre los distintos sistemas

de coordenadas.....	148
APENDICE II. Tabla A2.1.....	152
APENDICE III. Determinación del módulo de Young a partir de la frecuencia de resonancia de vibraciones flexurales.....	153
A3.1 Descripción del equipo.....	153
A3.2 Cálculo del módulo de Young.....	155
A3.3 Cálculo de errores.....	160
Referencias.....	162

INTRODUCCION

Los materiales policristalinos presentan en general anisotropía en muchas de sus propiedades físicas. Ello es consecuencia de que: 1) las propiedades físicas de los granos que componen el policristal son anisotrópicas y 2) estos granos no están orientados al azar, sino que por el contrario existen, en el policristal, orientaciones cristalinas preferenciales o "texturas cristalográficas". Si bien existen otras causas que contribuyen a esta anisotropía macroscópica (tensiones intergranulares, distribución de inclusiones o de segundas fases, etc.), la textura es el factor preponderante.

Teniendo en cuenta que la mayoría de los materiales de interés tecnológico (metales, cerámicos, algunos plásticos) son policristalinos y que en algunos casos la anisotropía de una propiedad física puede resultar favorable y en otros nefasta, se han encarado numerosos estudios tanto para la determinación de las texturas como para modelizar el comportamiento macroscópico de los policristales en función de las mismas.

La técnica más comunmente utilizada para la medición de las texturas se basa en la difracción de los rayos X. Schulz [1] propuso el método en reflexión que explora la figura de polos en la zona central, ya que en la periferia de la misma es muy importante el fenómeno de defocalización que conduce a una disminución de la intensidad difractada recibida por el contador de rayos X. Para completar la figura de polos se recurre entonces al método en transmisión [2],[3].

Si bien la figura de polos permite una descripción cualitativa de la textura, permitiendo asignar a los cristales orientaciones preferenciales ideales, frecuentemente esto es insuficiente y es necesario conocer la distribución exacta de orientaciones cristalinas en el

policristal. El cálculo de la distribución de orientaciones cristalinas a partir de las figuras de polos es el problema central de todos los análisis de textura y requiere un tratamiento matemático y computacional elaborado. El principal aporte, en este sentido fue hecho por Bunge [4] y Roe [5], que introdujeron los desarrollos en serie de esféricos armónicos de superficie para las densidades de polos y en serie de esféricos armónicos generalizados para la Función Distribución de Orientaciones Cristalinas (FDOC). Estos desarrollos permiten introducir las simetrías propias del cristal y las correspondientes a la muestra, reduciendo de esta manera el número de coeficientes independientes. Si bien trabajos recientes [6], [7], [8] mostraron que con el método de desarrollos en serie, solo se conoce una parte de la FDOC, en los cálculos de los promedios de propiedades físicas de policristales representadas por tensores de orden par, resulta particularmente útil, ya que es la que interviene en los mismos e introduce una gran simplificación.

Los primeros trabajos sobre cálculo de propiedades macroscópicas en policristales, a partir de las propiedades de los monocristales fueron realizados, en forma casi simultánea, en el campo de la elasticidad y la plasticidad. En el trabajo de Míngolo [62], se hace una reseña de las modelizaciones desarrolladas para predecir las propiedades plásticas anisotrópicas de policristales. En lo referente a propiedades elásticas, los primeros modelos fueron aplicados a materiales macroscópicamente isótropos. Voigt [9] asumiendo uniformidad de las deformaciones calculó el promedio del tensor de constantes elásticas. Reuss [10] supuso uniformidad en el estado de tensiones y obtuvo el promedio del tensor de módulos elásticos. Posteriormente, Hill [11] demostró en forma teórica que si el material es macroscópicamente homogéneo y contiene un número suficientemente grande de granos, el valor verdadero del promedio de los módulos elásticos está comprendido entre los límites de Voigt y Reuss. Al promedio aritmético de los valores obtenidos usando las aproxima-

ciones de Voigt y Reuss se lo conoce como aproximación de Hill.

En trabajos posteriores Pursey y Cox [12] y Bradfield y Pursey [13] derivaron expresiones para las constantes elásticas promedio de barras policristalinas que presentaban una textura con simetría de revolución alrededor de su eje y simetría cúbica de los cristales. Davies, Goodwill y Kallend [14] utilizaron estos resultados para chapas texturadas, introduciendo la FDOC para el cálculo del módulo de Young en el plano de la chapa. Sus resultados son válidos para materiales poco texturados y simetría cúbica de los cristales.

Simultáneamente se comenzó a estudiar la influencia de la textura en otras propiedades físicas tales como el coeficiente de dilatación térmica [15], [16] y el crecimiento por irradiación [17], [18].

Morris [19] plantea el problema general de promediar un tensor de cuarto orden tomando como función de peso la FDOC y lo resuelve para simetría ortotrópica de la muestra y ortorrómbica o mayor del cristal. La simetría ortotrópica de la muestra presenta un interés particular ya que es la que normalmente aparece luego de someter al material a algunos procesos mecánicos tales como el laminado. Los cálculos se simplifican utilizando los desarrollos en serie de esféricos armónicos generalizados y sus propiedades de ortonormalidad. Bunge [4] presenta el problema general de promediar propiedades físicas, dependientes de la orientación, representadas por tensores de distintos órdenes y utilizando el formalismo de la FDOC.

El conocimiento de la relación entre textura cristalográfica y propiedades elásticas adquiere gran importancia cuando se quiere aplicar la técnica de difracción de rayos X al análisis de las tensiones residuales. Esta técnica, debido a los progresos recientes tanto tecnológicos como teóricos, es actualmente la más utilizada en la determinación del estado de tensiones de capas superficiales de materiales cristalinos. En el análisis clásico se

supone isotropía del material lo que conduce a la llamada ley del $\sin^2\psi$, que relaciona en forma lineal las deformaciones medidas con las tensiones que se quieren calcular. El apartamiento de esta ley en los materiales texturados ha sido motivo de trabajos recientes en materiales de estructura cristalina cúbica [20].

El objetivo de este trabajo fue en primer término la determinación precisa de la textura cristalográfica en materiales con distinta estructura cristalina (cúbica y hexagonal). Para esto se comenzó poniendo a punto, en el laboratorio, la técnica en transmisión - reflexión para la obtención mediante difracción de rayos X de las figuras de polos de los distintos materiales y siguiendo el método de Roe [5] se calculó la FDOC.

Con el fin de ligar resultados dispersos y contribuir a una mejor comprensión de los elementos teóricos que se usan en el análisis del efecto de la textura sobre las propiedades macroscópicas, se aplicó, luego, el método propuesto por Bunge [4] para analizar la conexión entre la textura y dos propiedades anisotrópicas representadas por tensores de distinto orden: el tensor de coeficientes de dilatación térmica (tensor de orden 2) y el tensor de constantes elásticas (tensor de orden 4). El análisis de la dilatación térmica en materiales hexagonales, tales como el Zr y el Ti, presenta particular interés, ya que dada su gran anisotropía, juega un rol importante en la generación de tensiones internas de origen térmico en estos materiales. Para avalar el análisis teórico con resultados experimentales propios, sobre todo en materiales hexagonales de uso en industrias de alta tecnología, se realizaron mediciones de coeficiente de dilatación térmica en un equipo comercial y mediciones de módulo de Young en un equipo diseñado y construido a tal efecto.

Finalmente se puso a punto la técnica de medición de tensiones residuales mediante difracción de rayos X y se desarrolló un programa de cálculo para obtener, utilizando la FDOC, las llamadas Constantes Elásticas Radiocristalográficas (CER) en materiales textu-

rados de estructura cristalina hexagonal. Para desarrollar el programa fue necesario realizar un análisis de las propiedades de simetría de la FDOC correspondientes a la simetría ortorrómbica de la muestra y hexagonal del cristal, ya que no se encontró esta información en la literatura. El conocimiento de las CER es indispensable en el cálculo de las tensiones residuales, ya que la hipótesis de isotropía puede conducir a resultados erróneos. Los cálculos teóricos fueron comparados con mediciones experimentales realizadas en chapas de circonio y en tubos extrudados de Zircaloy-4 con diferente textura. Se eligieron estos materiales dada la importancia que presentan para la industria nuclear y por la falta de información bibliográfica sobre el tema.

La presentación del trabajo se hace en el orden siguiente:

- Capítulo I. Bases del método experimental para la obtención de la figura de polos mediante la técnica de difracción de rayos X. Descripción del método de Roe para el cálculo de la FDOC. Resultados experimentales en aceros (bcc), cobre (fcc), circonio (hcp) y titanio (hcp).
- Capítulo II. Presentación del método de Bunge para el cálculo de promedios de magnitudes tensoriales usando la FDOC.
- Capítulo III. Coeficientes de dilatación térmica en materiales hexagonales. Aplicación del método de Bunge a un tensor de orden 2. Obtención de las expresiones matemáticas y resultados experimentales en chapas de circonio, Zircaloy-4 y Titanio
- Capítulo IV. Constantes elásticas en materiales cúbicos y hexagonales. Aplicación del método de Bunge a un tensor de orden 4. Obtención de las expresiones matemáticas y resultados experimentales en chapas de cobre, aceros, circo-

nio, Zircaloy-4, Ti y alambres trefilados de cobre.

Capítulo V. Tensiones residuales. Principio de medida. Cálculo de las CER en materiales hexagonales. Comparación con resultados experimentales en circonio y Zircaloy-4 con dos texturas distintas.

CAPITULO I

TEXTURAS CRISTALOGRAFICAS

1.1 INTRODUCCION AL PROBLEMA DE LA DESCRIPCION DE LA TEXTURA

Un material policristalino puede ser pensado como un agregado de monocristales con diferentes orientaciones. Una descripción completa de la textura en una muestra policristalina implica un conocimiento de la posición de cada grano y de su orientación cristalina respecto a un sistema de coordenadas fijo a la muestra. Si se considera, en primera aproximación, que el tamaño de los granos es homogéneo y que la distribución de granos de igual orientación es aleatoria, se obtiene una representación simplificada de la textura, en la cual intervienen solo las variables angulares. Se define entonces

- a) un sistema ortogonal fijo a la muestra
- b) un sistema ortogonal fijo a cada cristal
- c) una rotación g caracterizada por los tres ángulos de Euler (α, β, ω) (Figura I.1) que transforma el sistema de coordenadas fijo a la muestra al sistema de coordenadas fijo al cristal o viceversa (g^{-1})
- d) una función $F(g)$ (FDOC) que describe estadísticamente la distribución de orientaciones de los cristales referidas al sistema de coordenadas fijo a la muestra.

Si dV representa todos los elementos de volumen de la muestra con una orientación cristalina entre g y $g+dg$, y V es el volumen total de la muestra, entonces

$$\frac{dV}{V} = K \cdot F(g) \cdot dg \quad (1.1)$$

donde K es una constante de normalización. En el espacio de Euler $dg = \sin\beta \cdot d\beta \cdot d\alpha \cdot d\omega$ para $0 \leq \beta \leq \pi$; $0 \leq \alpha \leq 2\pi$; $0 \leq \omega \leq 2\pi$. Se supone que $F(g)$ es positiva, continua e infinitamente derivable.

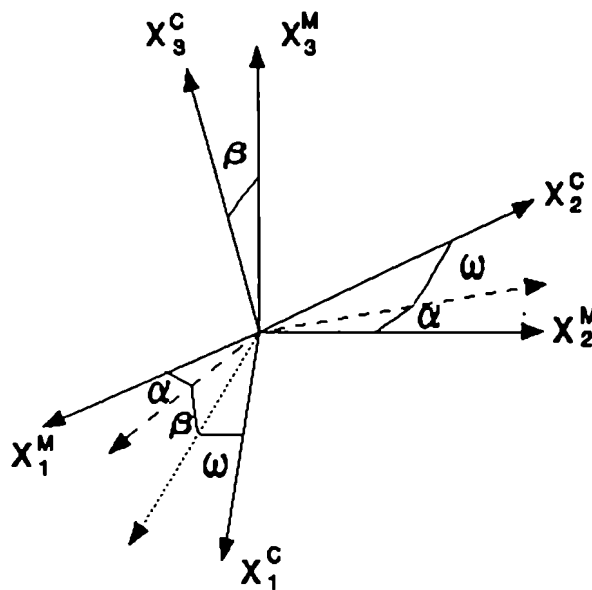
La normalización de $F(g)$ se realiza integrando en todo el espacio de Euler

$$\frac{1}{V} \int_V dv = K \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} F(\alpha, \beta, \omega) \cdot d\alpha \cdot d\beta \cdot \sin\omega \cdot d\omega = 1 \quad (1.2)$$

Para una muestra isótropa $F(g)$ es constante. Eligiendo $F(g)=1$ resulta $K=1/8\pi^2$. Esta es la convención habitualmente utilizada en las representaciones gráficas. Para los desarrollos matemáticos resulta más claro tomar $F(g)=1/8\pi^2$ para una muestra isótropa, de forma tal que la constante K tome el valor 1 y no resulte necesario incluirla explícitamente en las fórmulas.

FIGURA I.1

Definición de los ángulos de Euler



1.1.1 DETERMINACION EXPERIMENTAL DE LA TEXTURA

El método experimental más usado para la determinación de la FDOC es la técnica de difracción de rayos X.

La intensidad difractada por un policristal es proporcional al volumen de material en condiciones de difractar, es decir, si se elige un plano cristalino $\{hkl\}$ y se mantienen

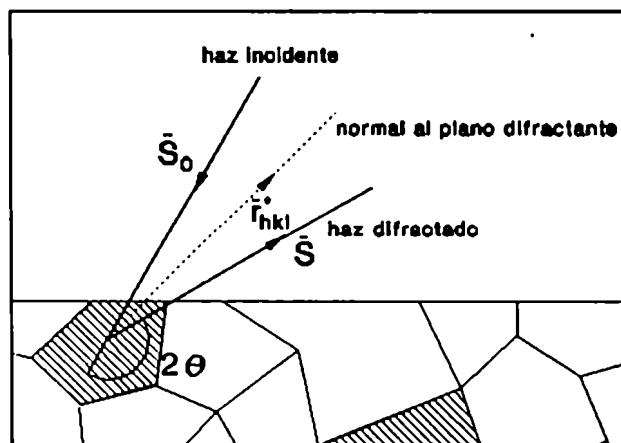
en una posición fija el haz de rayos X y el detector de rayos X de manera que formen entre si el ángulo de Bragg (2θ) correspondiente al plano $\{hkl\}$ elegido, solo difractarán los cristales orientados de tal manera que la normal al plano $\{hkl\}$ bisecte el ángulo formado por el haz incidente y el haz difractado (Figura.I.2):

$$\vec{r}_{hkl} = \frac{(\vec{S} - \vec{S}_0)}{\lambda} \quad (1.3)$$

donde \vec{S}_0 : vector unitario en la dirección del haz incidente
 \vec{S} : vector unitario en la dirección del haz difractado
 λ : longitud de onda de la radiación incidente
 \vec{r}_{hkl} : vector recíproco del plano $\{hkl\}$

FIGURA I.2.

Esquema de la difracción en policristales

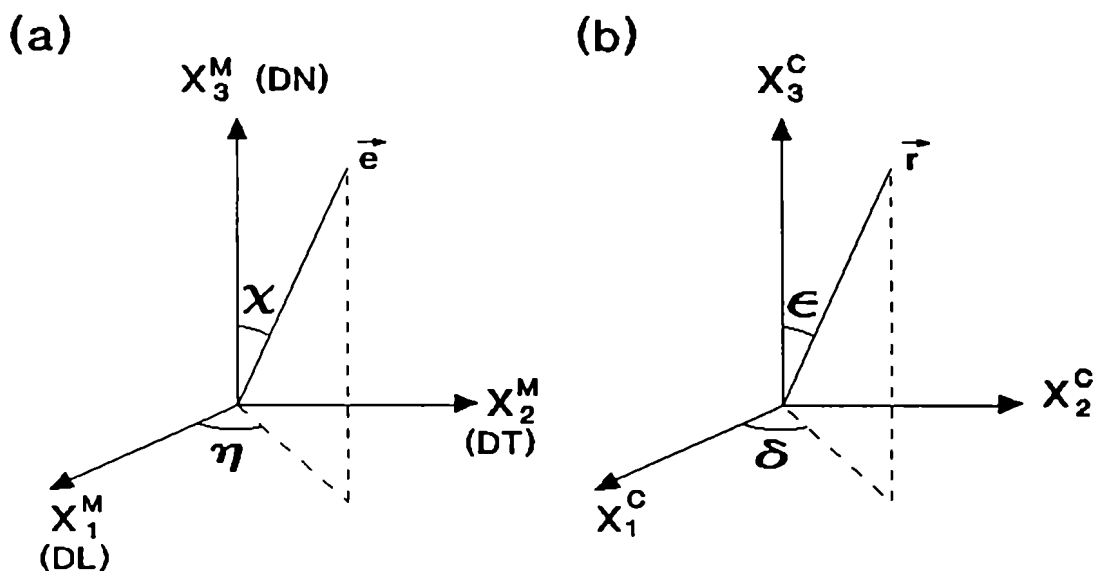


Mediante un goniómetro de textura se puede entonces medir la intensidad difractada por un plano $\{hkl\}$ dado, para cada dirección \vec{e} de la muestra (Figura I.3.a). Esta intensidad será proporcional al volumen de cristales orientados de tal manera que el plano $\{hkl\}$ sea perpendicular a la dirección \vec{e} .

Para la medición de las intensidades difractadas en todas las direcciones \vec{e} de la muestra ($0 \leq \chi \leq \pi/2$, $0 \leq \eta \leq 2\pi$) se utiliza el método en reflexión [1] para valores de χ hasta 70° y el método en transmisión [2] para valores de χ entre 60° y 90° , realizándose el empalme entre las dos regiones a partir de las mediciones hechas en la zona de superposición. El fenómeno de defocalización [21], de origen esencialmente geométrico, consiste en un ensanchamiento del haz difractado a medida que aumenta el ángulo χ . Dado que la ranura de entrada al contador de rayos X tiene un ancho fijo durante toda la experiencia, esto se traduce en una disminución en la intensidad difractada registrada por el contador. Si bien existen correcciones teóricas que tienen en cuenta este efecto [22], en los casos en que es posible adelgazar la muestra, es más confiable utilizar la técnica en transmisión para los ángulos χ superiores a 70° .

FIGURA I.3

Sistemas de coordenadas (a) fijo a la muestra y (b) fijo al cristal



1.1.2 DESCRIPCION CUALITATIVA DE LA TEXTURA

La densidad de polos se define como el cociente entre la intensidad difractada por un plano $\{hkl\}$ perpendicular a una dirección dada en la muestra considerada y la intensidad difractada en la misma dirección por una muestra sin textura. La figura de polos directa es la representación de la distribución de la densidad de polos de una familia de planos $\{hkl\}$ en todas las direcciones de la muestra, en proyección estereográfica, donde el plano de la muestra (DL-DT) es considerado como plano de proyección.

Una forma simple de representar las texturas es a partir del estudio de los principales refuerzos de las figuras de polos. Dichos refuerzos se asocian a orientaciones ideales respecto del referencial muestra, las que se notan: $\{hkl\} \langle uvw \rangle$; siendo $\{hkl\}$ el plano paralelo al plano (DL-DT) y $\langle uvw \rangle$ la dirección paralela a DL. Esta es una forma de describir cualitativamente la textura mediante una o más orientaciones ideales.

Como los rayos X no son polarizados la intensidad difractada es independiente de una rotación cualquiera del plano difractante alrededor de su normal \vec{F}_{hkl} . Teniendo en cuenta la definición de la FDOC la intensidad difractada en una dirección \vec{e} , normalizada por la intensidad difractada por una muestra sin textura es

$$q(\vec{r}, \vec{e}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(g) \cdot d\gamma \quad (1.4)$$

donde $d\gamma$ indica la rotación alrededor de \vec{F}_{hkl} y \vec{r} es una dirección del cristal paralela a \vec{F}_{hkl} (Figura 1.3.b).

La ecuación anterior conecta la información $q(\vec{r}, \vec{e})$ obtenida experimentalmente con la FDOC definida matemáticamente. Uno de los métodos más utilizados para resolverla es el llamado método armónico propuesto por Bunge [4] y Roe [5] quienes desarrollaron los dos miembros de la ecuación (1.4) sobre la base de armónicos esféricos para encontrar una relación entre los coeficientes de ambos desarrollos.

De acuerdo al método de Roe, una dirección \vec{e} asociada a la muestra está descripta

en el referencial muestra por las coordenadas (η, χ) ($0 \leq \eta \leq 2\pi; 0 \leq \chi \leq \frac{\pi}{2}$) (Figura I.3.a), mientras que una dirección \vec{r} del cristal está descrita en el referencial cristal por las coordenadas polares (δ, ϵ) ($0 \leq \delta \leq 2\pi; 0 \leq \epsilon \leq \frac{\pi}{2}$) (Figura I.3.b).

Considerando las propiedades de continuidad supuestas para la función $F(g)$, la misma se desarrolla sobre la base de armónicos generalizados en una serie convergente:

$$F(\alpha, \beta, \omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} f_{lmn} Z_{lmn}(\cos \beta) e^{-im\alpha} e^{-in\omega} \quad (1.5)$$

donde $Z_{lmn}(\cos \beta)$ son los polinomios de Legendre generalizados asociados. Asimismo las densidades de polos son desarrolladas sobre la base de armónicos esféricos de superficie:

$$q^{\vec{r}}(\eta, \chi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Q_{lm}^{\vec{r}} P_{lm}(\cos \chi) e^{-im\eta} \quad (1.6)$$

donde $P_{lm}(\cos \chi)$ son los polinomios de Legendre asociados.

Se demuestra [3] que existe una relación lineal entre los coeficientes $Q_{lm}^{\vec{r}}$ y f_{lmn} de los desarrollos (1.5) y (1.6) de la forma:

$$Q_{lm}^{\vec{r}} = 2\pi \left[\frac{2}{2l+1} \right]^{1/2} \sum_{n=-l}^{+l} f_{lmn} P_{ln}(\cos \epsilon) e^{in\delta} \quad (1.7)$$

Los coeficientes $Q_{lm}^{\vec{r}}$ son calculados a partir de las densidades de polos experimentales $q^{\vec{r}}(\eta, \chi)$ de acuerdo con la expresión:

$$Q_{lm}^{\vec{r}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} q^{\vec{r}}(\chi, \eta) P_{lm}(\cos \chi) e^{im\eta} d(\cos \chi) d\eta \quad (1.8)$$

Para l y m fijos la relación (1.7) representa una ecuación de $(2l+1)$ incógnitas f_{lmn} , para valores $P_{ln}(\cos \chi)$ extraídos de tablas y valores $Q_{lm}^{\vec{r}}$ obtenidos de la ecuación (1.8). La determinación de los coeficientes f_{lmn} se efectúa por resolución del sistema de $(2l+1)$ ecuaciones del tipo (1.7) a cada orden l . Sin embargo, en razón de las propiedades de simetría del cristal y la muestra [4], se reduce el número de incógnitas y consecuente-

mente, el número de ecuaciones a resolver. Conociendo los coeficientes f_{lmn} , la función $F(g)$ se calcula a partir de la ecuación (1.5).

Teniendo en cuenta las simetrías del cristal y de la muestra, se reduce el dominio angular en el cual es necesario calcular la FDOC. En el caso de simetría cúbica del cristal y ortorrómbica de la muestra el dominio angular de los tres ángulos de Euler se reduce al cuadrante $0, \pi/2$. En el caso de simetría hexagonal del cristal y ortorrómbica de la muestra la FDOC se calcula para $0 \leq \alpha \leq \pi/2$; $0 \leq \beta \leq \pi/2$; $0 \leq \omega \leq \pi/3$ [61]

Este método de cálculo, mediante desarrollos en serie, de la función distribución en tres dimensiones (generalmente los tres ángulos de Euler), a partir de las figuras de polos, que son proyecciones de la misma en dos dimensiones, fue elegido, en este trabajo, por la simplicidad con que se pueden realizar los cálculos de promedios de propiedades físicas de los policristales. Se han desarrollado otros métodos de inversión de la figura de polos: método vectorial (VM) [23], método "Williams - Imhof - Matthies - Vinel" (WIMV) [24]. Esling y col. [25] hacen un estudio detallado de los mismos poniendo de manifiesto las diferentes precisiones alcanzadas con cada uno de ellos.

Uno de los principales cuestionamientos que se le hace a los métodos de inversión de la ecuación (1.4) mediante desarrollos en serie es que, dado que la difracción es centrosimétrica (ley de Friedel), los coeficientes Q_{lm}^r del desarrollo en serie de las densidades de polos son nulos para l impar. Esto llevó a suponer las mismas propiedades de simetría en los esféricos armónicos generalizados y tomar los coeficientes f_{lmn} de la FDOC iguales a cero para l impar. En realidad el espacio de las rotaciones g no posee la operación de centrosimetría, apareciendo entonces en el desarrollo de $f(g)$ términos de orden impar. Los trabajos recientes de Matthies [6], [26], [27] plantean este problema: La función distribución $F(g)$ puede dividirse en suma de dos funciones, una determinable a partir de las figuras de polos, $\tilde{F}(g)$, que contiene valores pares de l y otra no determinable mediante este método $\tilde{\tilde{F}}(g)$. El error fundamental radica en suponer que si los coeficientes f_{lmn} no pueden calcularse a partir de la ecuación (1.7) entonces son nulos. Sin embargo el hecho de conocer solo la parte par de la FDOC no afecta los resultados cuando se calculan los valores de

propiedades macroscópicas como promedios de las propiedades microscópicas del material, siempre y cuando la propiedad en cuestión sea centrosimétrica (propiedades representadas por tensores de orden par, como por ejemplo la elasticidad). En efecto, en este caso solo interviene en el cálculo de los promedios $\bar{F}(g)$ [7].

1.2 RESULTADOS EXPERIMENTALES

Las mediciones experimentales se realizaron en un goniómetro de textura semiautomático Siemens, que permite utilizar las técnicas en reflexión y transmisión y la detección del haz difractado se realizó con un detector proporcional. Las intensidades medidas para cada par de ángulos χ, η fueron corregidas, mediante un programa de cálculo, por ruido de fondo y por variación de volumen difractante, en el caso de transmisión y por ruido de fondo, defocalización y variación de volumen difractante en el caso de reflexión. Luego de realizar el empalme de ambas zonas, utilizando las intensidades medidas en la zona de superposición, se calcularon las intensidades normalizadas, a partir de las cuales se graficaron las figuras de polos y se calculó la FDOC.

Se estudiaron los siguientes materiales:

- Aceros ferríticos comerciales calmados al Al e inoxidables:
 - a) acero calmado al Al. Chapa laminada
 - b) chapa a) más un laminado en frío adicional del 50%
 - c) chapa a) más un recocido industrial a una temperatura del orden de 700°C
 - d) acero inoxidable AISI 409

Las composiciones químicas se detallan en la tabla IV.1. Se utilizó radiación de $\text{MoK}\alpha$ ($\lambda=0.7107\text{Å}$).

En las Figuras I.4, I.5, I.6 y I.7 se muestran las figuras de polos $\{200\}$ y $\{110\}$

experimentales de las muestras y en la Figura I.8 están graficadas las secciones de la FDOC correspondientes al corte $\omega = 45^\circ$.

En el acero calmado se puede observar la presencia de tres componentes principales de textura: la componente $\{001\} \langle 110 \rangle$, comunmente llamada de laminado, y las de tipo $\{111\} \langle uvw \rangle$ con refuerzos para las componentes $\{111\} \langle 110 \rangle$ y $\{111\} \langle 112 \rangle$. Como puede verse en la Tabla I.1, el laminado adicional en la muestra b incrementa los valores de la FDOC asociados a las componentes principales con respecto a la chapa original sin recocido (muestra a). El efecto del recocido (muestra c) se traduce en un refuerzo de la componente $\{111\} \langle 110 \rangle$ y se puede aproximar la textura a una fibra $\{111\} \langle uvw \rangle$, con direcciones $\langle 111 \rangle$ paralelas a la DN de la chapa.

En el acero inoxidable las principales componentes de textura están localizadas alrededor de orientaciones $\{332\} \langle 113 \rangle$, $\{554\} \langle 225 \rangle$ y refuerzos importantes para las componentes $\{111\} \langle 112 \rangle$, $\{100\} \langle 110 \rangle$ y $\{112\} \langle 110 \rangle$.

TABLA I.1

Valores de la FDOC asociados a componentes principales de
textura en las muestras de aceros

Muestra	$\{hkl\} \langle uvw \rangle$	F(g)
Calmado (a)	$\{001\} \langle 110 \rangle$	3.8
	$\{111\} \langle 112 \rangle$	4.7
	$\{111\} \langle 110 \rangle$	3.1
Calmado (b)	$\{001\} \langle 110 \rangle$	4.5
	$\{111\} \langle 112 \rangle$	6.8
	$\{111\} \langle 110 \rangle$	5.6
Calmado (c)	$\{111\} \langle 112 \rangle$	7.7
	$\{111\} \langle 110 \rangle$	10.2
Inoxidable (d)	$\{001\} \langle 110 \rangle$	8.2
	$\{111\} \langle 112 \rangle$	7.8
	$\{233\} \langle 113 \rangle$	12.9
	$\{554\} \langle 225 \rangle$	10.3
	$\{112\} \langle 110 \rangle$	6.3

FIGURA I.4

Figuras de polos experimentales correspondientes a una chapa laminada de acero calmado al Al (muestra a)

● $\{111\} \langle 110 \rangle$ ■ $\{111\} \langle 112 \rangle$ ○ $\{001\} \langle 110 \rangle$

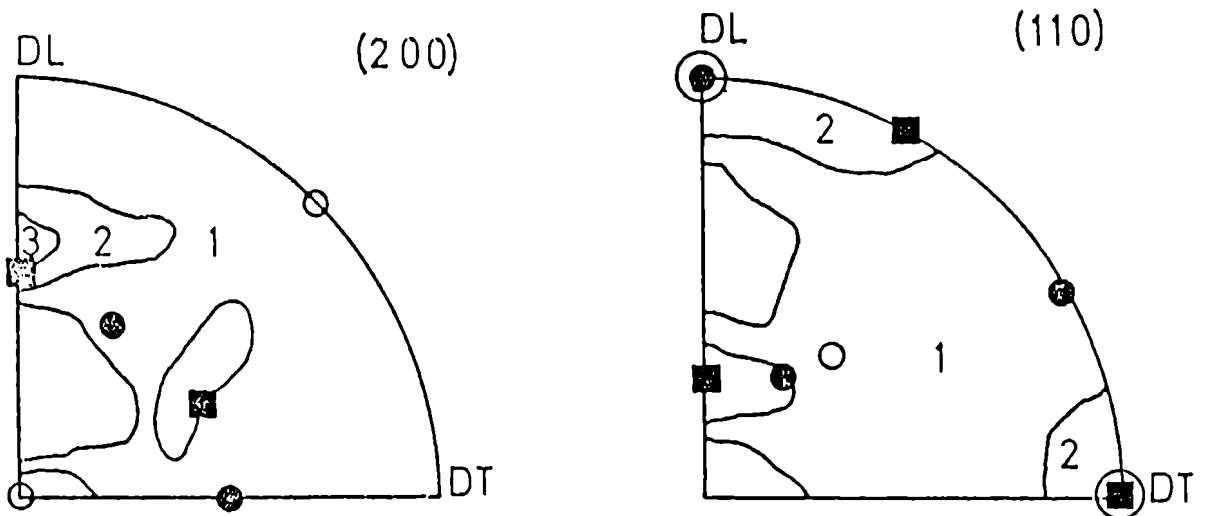


FIGURA I.5

Figuras de polos experimentales de una chapa laminada de acero calmado al Al con un laminado adicional del 50% (muestra b)

● $\{111\} \langle 110 \rangle$ ■ $\{111\} \langle 112 \rangle$ ○ $\{001\} \langle 110 \rangle$

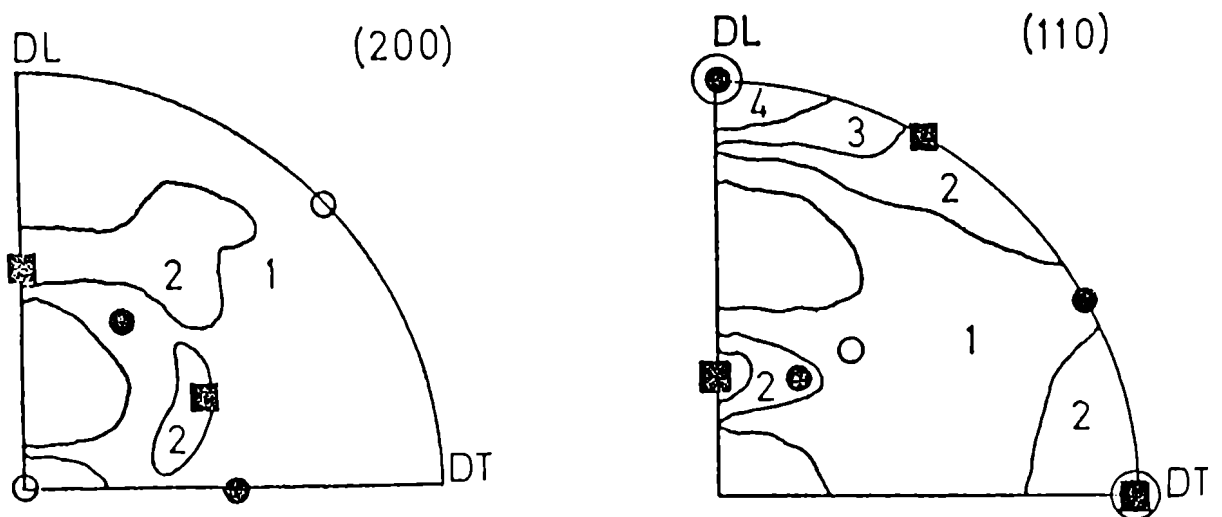


FIGURA I.6

Figuras de polos experimentales de un acero calmado al Al
recocido (muestra c)

● $\{111\} \langle 110 \rangle$ ■ $\{111\} \langle 112 \rangle$

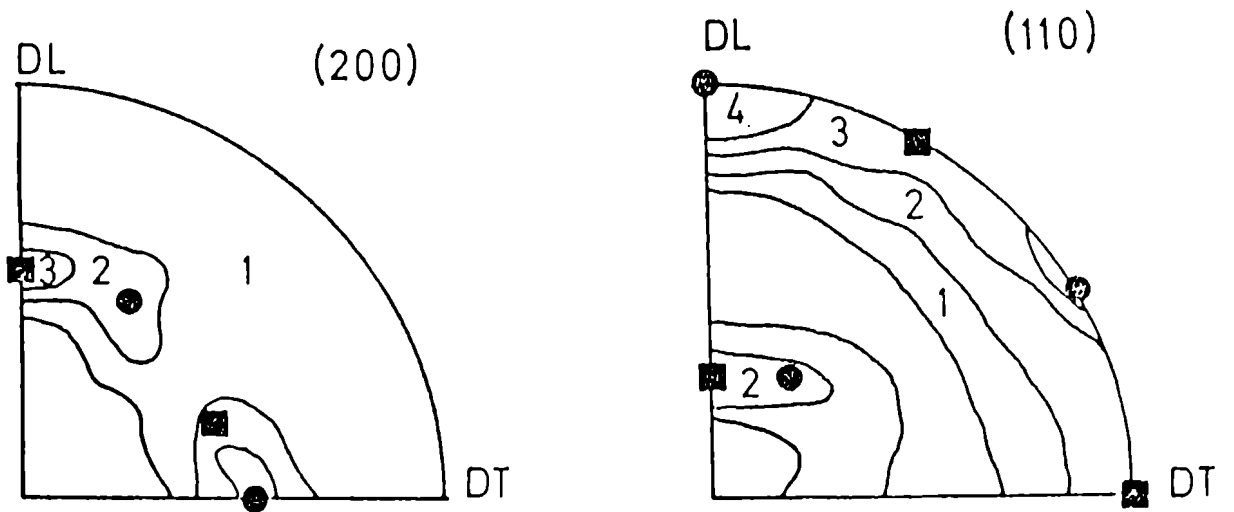


FIGURA I.7

Figuras de polos experimentales de un acero inoxidable
AISI 409 (muestra d)

● $\{111\} \langle 110 \rangle$ ■ $\{111\} \langle 112 \rangle$ ○ $\{001\} \langle 110 \rangle$ ▲ $\{332\} \langle 113 \rangle$

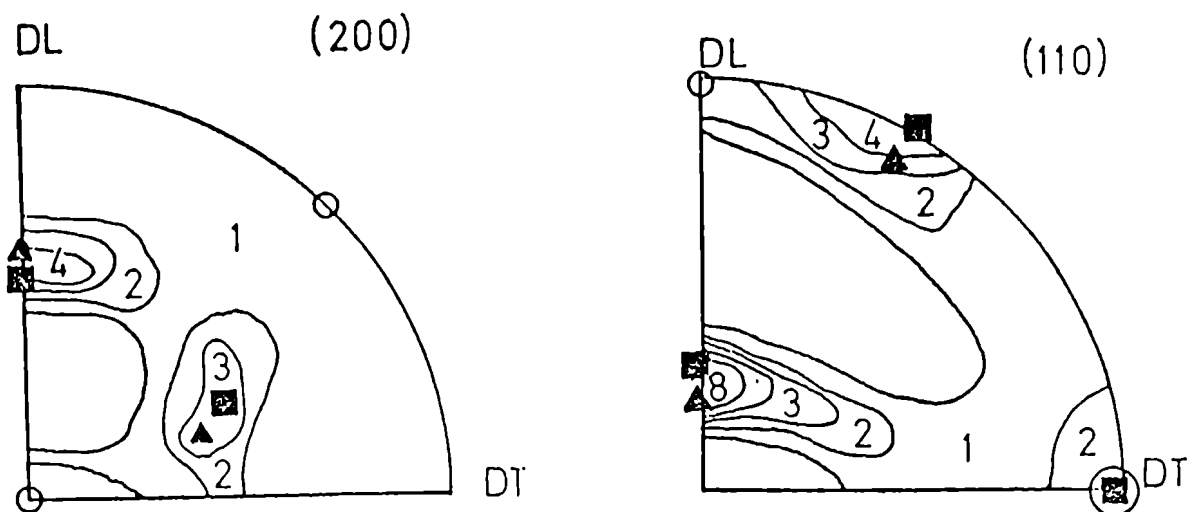
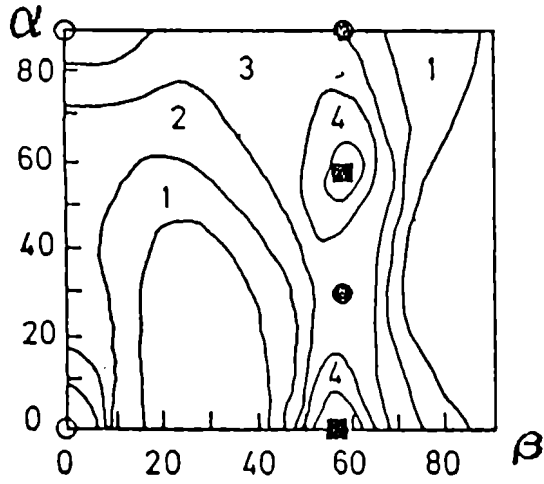


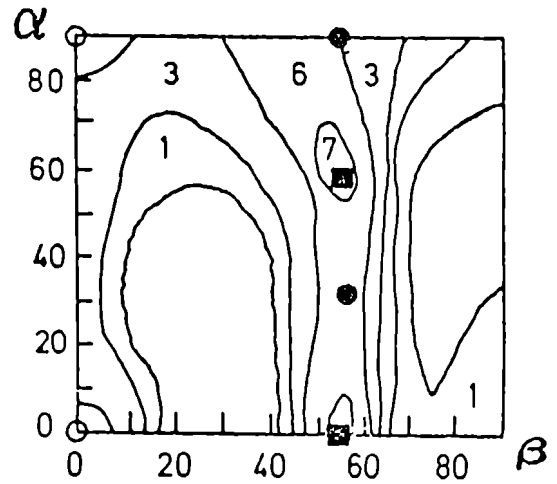
FIGURA I.8

Cortes de la FDOC a $\omega = 45^\circ$ para las chapas de acero a, b, c y d

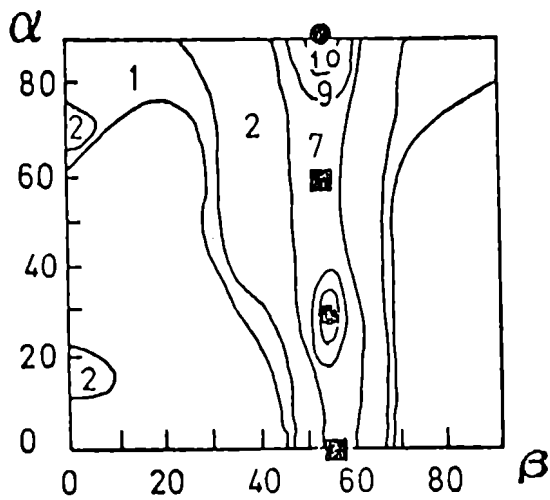
● $\{111\} \langle 110 \rangle$ ■ $\{111\} \langle 112 \rangle$ ○ $\{001\} \langle 110 \rangle$ ▲ $\{332\} \langle 113 \rangle$



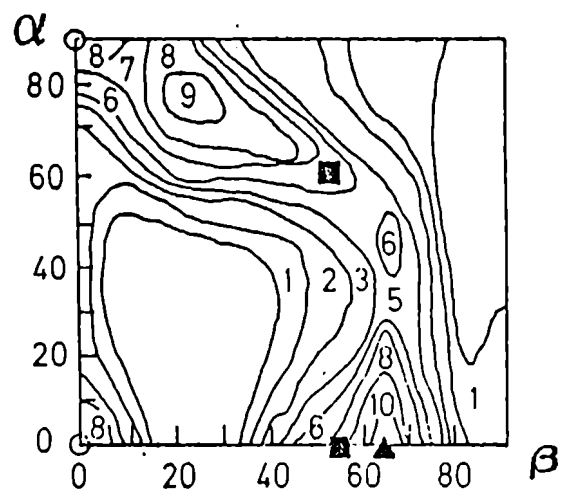
a



b



c



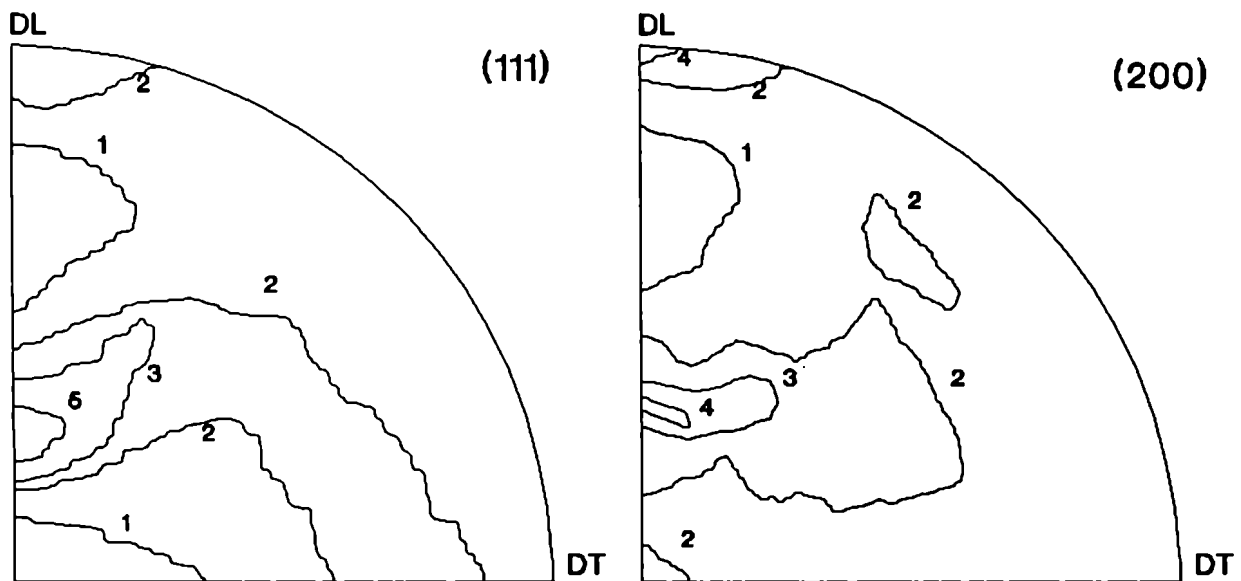
d

-Chapa de cobre de pureza comercial

Se utilizó radiación de $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda=1.54050\text{\AA}$). En la Figura I.9 se muestran las figuras de polos experimentales $\{111\}$ y $\{200\}$

FIGURA I.9

Figuras de polos experimentales de una chapa de cobre



Las principales componentes de textura que se observan, a partir del estudio de los cortes de la FDOC, son similares a las obtenidas por Ferreira [28] en Al laminado al 80% y luego sometido a un tratamiento térmico de recristalización: $\{123\} \langle 111 \rangle$, $\{100\} \langle 100 \rangle$ y $\{110\} \langle 100 \rangle$

- Alambres trefilados de Cu

Se utilizó radiación de $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda=1.54050\text{\AA}$)

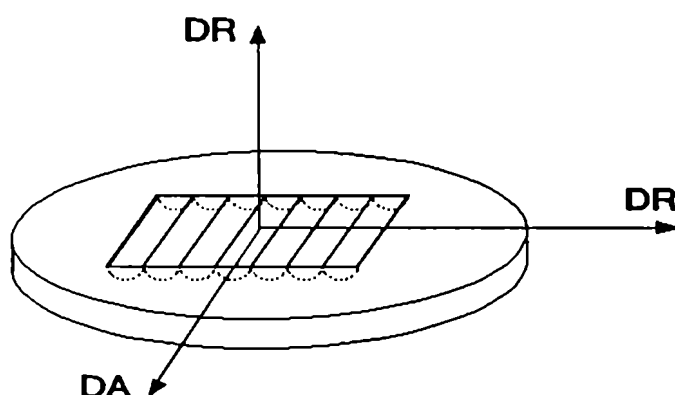
En la tabla IV.4 figuran las características de las muestras de alambres trefilados

cuyas texturas se determinaron.

Las muestras se prepararon juntando secciones de alambres cortadas longitudinalmente por el centro de los mismos, según el esquema de la Figura I.10. El plano de la muestra es el determinado por las direcciones DA (dirección axial) y DR (dirección radial).

FIGURA I.10

Esquema de la muestra utilizada para la obtención de la Figura de Polos en alambres trefilados de Cu



Las características de las muestras hicieron que no se pudieran adelgazar las mismas para trabajar en transmisión. Por lo tanto las experiencias se realizaron en reflexión hasta el ángulo $\chi=85^\circ$, corrigiéndose las intensidades por defocalización [22]. Para completar la figura de polos se utilizó un método de extrapolación. El error introducido por esta aproximación no fue muy grande, ya que la dispersión relativa media entre las densidades de polos medidas y recalculadas para las figuras de polos $\{200\}$ y $\{111\}$ no excedía 0.2.

En la Figura I.11 se muestran las figuras de polos $\{200\}$ y $\{111\}$ recalculadas para la muestra A_2 (radio = 0.2900cm) y en la Figura I.12 están graficadas las secciones de la FDOC, correspondientes a los cortes $\omega=0^\circ$ y $\omega=45^\circ$

FIGURA I.11

Figuras de polos recalculadas de un alambre de Cu trefilado
(muestra A₂, radio=0.2900cm)

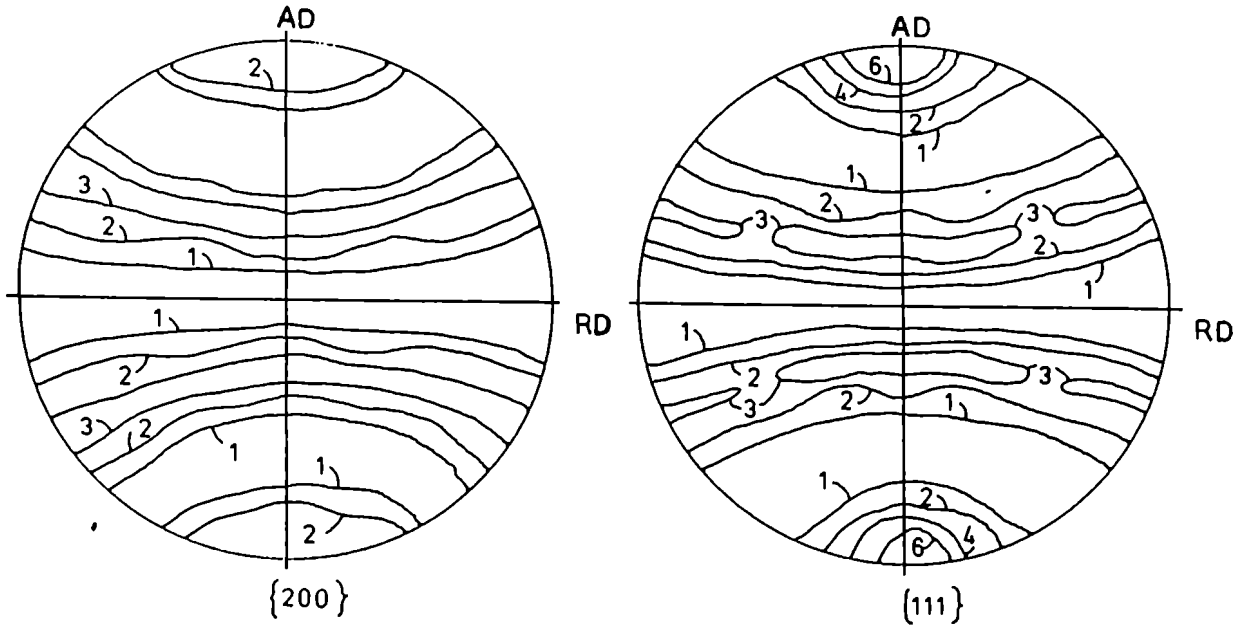
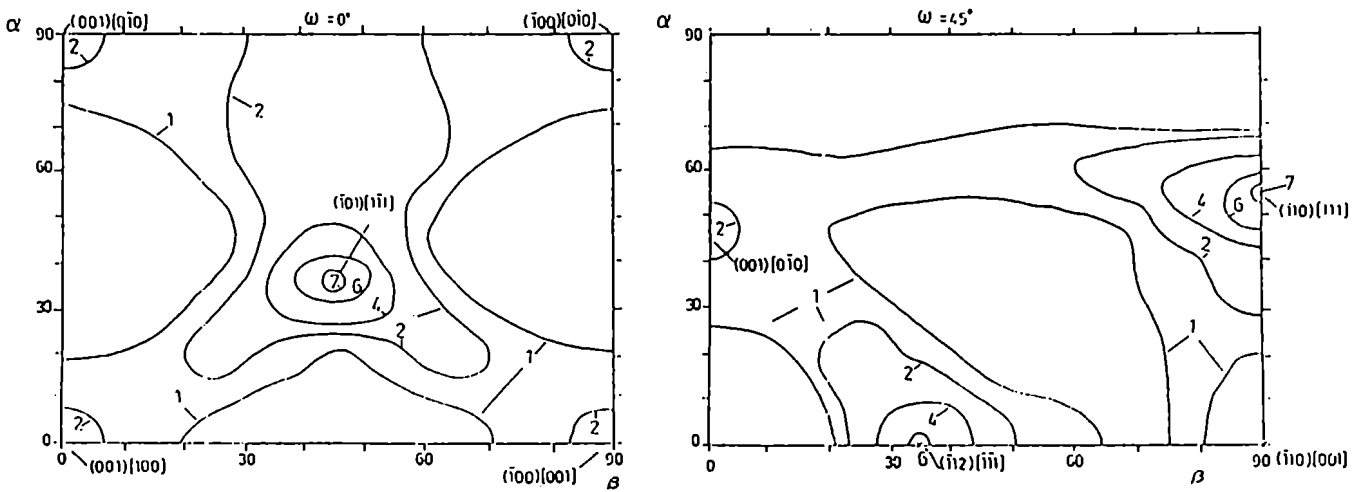


FIGURA I.12

Cortes de la FDOC para un alambre de Cu trefilado
(muestra A₂, radio=0.2900cm)



Los resultados obtenidos para las otras muestras trefiladas son cualitativamente similares. La textura observada es una textura de fibra, cuya principal componente es la dirección $\langle 111 \rangle$ alineada con la dirección axial de los alambres y una componente $\langle 100 \rangle$ de menor peso que la anterior. Se observa también un pequeño efecto de cilindrización, es decir, los planos cristalinos no se orientan al azar alrededor de la dirección $\langle 111 \rangle$, sino, como puede verse en la Figura I.12, el refuerzo en la componente $\{110\}$ $\langle 111 \rangle$ indica que los planos $\{110\}$ están preferentemente orientados paralelos a la dirección axial. En la muestra sometida a un tratamiento de recristalización (A_1) se observó una textura prácticamente al azar.

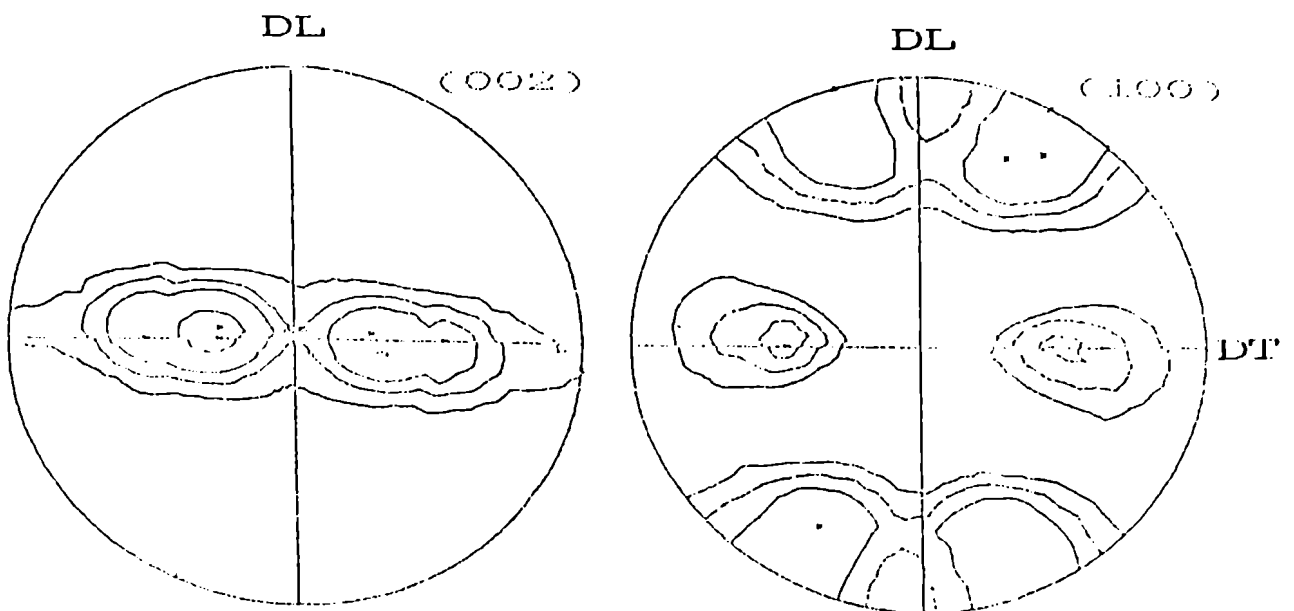
- Chapa de Zr

La composición química de la chapa de Zr se detalla en 3.3. Se utilizó radiación de $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$).

En la Figura I.13 se muestran las figuras de polos experimentales $\{002\}$ y $\{100\}$.

FIGURA I.13

Figuras de polos experimentales de una chapa de Zr



El análisis de la FDOC muestra que los ejes c están concentrados alrededor del plano definido por las direcciones normal (DN) y transversal (DT) observándose refuerzos para las componentes $\{10\bar{1}3\} \langle 1\bar{2}10 \rangle$ y $\{\bar{2}115\} \langle 10\bar{1}0 \rangle$. La presencia de estas componentes indican que el eje c forma un ángulo de aproximadamente 30° con DN, como puede verse en la Figura I.13. Esta textura, denominada de polo oblicuo, es típica en materiales hexagonales recristalizados.

- Chapa de Zircaloy-4

Las figuras de polos de la chapa de Zircaloy-4, cuya composición química se detalla en 3.3, fueron obtenidas con las mismas condiciones experimentales que la chapa de Zr. La textura es muy similar a la correspondiente al Zr (textura de polo oblicuo).

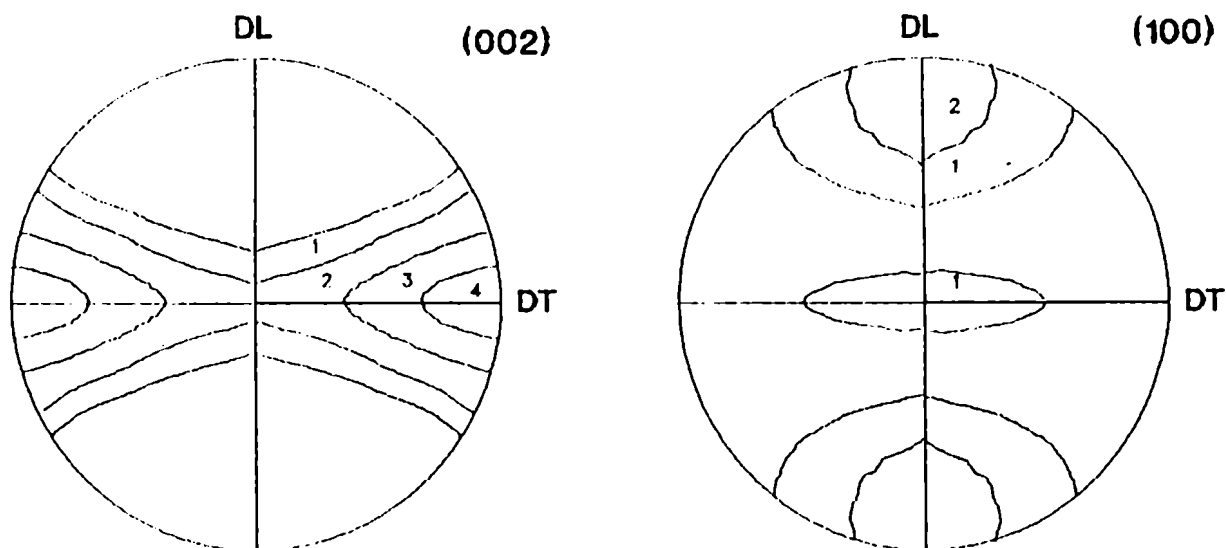
- Tubo extrudado de Zircaloy-4

La composición química del Zircaloy-4 se detalla en 3.3. Se utilizó radiación de $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 1.5405\text{\AA}$). Para obtener las muestras planas, necesarias para las experiencias de difracción, a partir del tubo original, se adelgazó la pared del tubo primero mediante un torneado y luego por pulido químico, para eliminar la capa de material deformada. Se cortó entonces el tubo y se pegó sobre un soporte de Al. La dirección normal de la muestra, así preparada, corresponde a la dirección radial del tubo, la dirección longitudinal de la misma corresponde a la dirección axial del tubo y la dirección transversal de la muestra es la dirección tangencial del tubo. El adelgazamiento se realizó de manera de obtener muestras correspondientes a la pared interna, a la pared externa y a una capa intermedia del tubo.

En la Figura I.14 se muestran las figuras de polos experimentales correspondientes a los planos $\{002\}$ y $\{100\}$

FIGURA I.14

Figuras de polos experimentales correspondientes a un tubo de
Zyrcaloy 4 extrudado



Las principales componentes de textura que se observan son las $\{1\bar{1}00\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ y la $\{2\bar{2}01\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$. Esto corresponde a posiciones del eje c, en el plano formado por la dirección radial y la dirección tangencial, cercanas a la dirección tangencial.

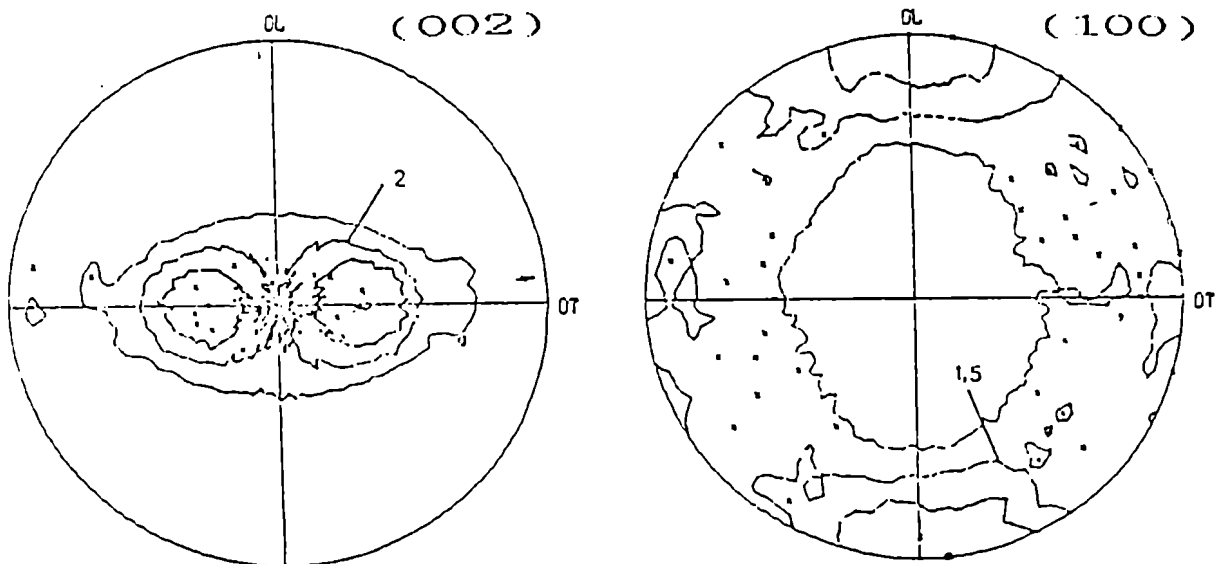
- Chapa de Ti

Se utilizó una chapa de Ti comercial UT 40, realizándose las experiencias de difracción con radiación de $\text{MoK}\alpha$ ($\lambda=1.79021$), para todos los planos, excepto para el $\{100\}$ para el cual el ángulo de Bragg ($\Theta=7.99^\circ$), muy pequeño, conduce a una defocalización importante. Para este plano se utilizó radiación de $\text{CuK}\alpha$.

En la Figura 1.15 se muestran las figuras de polos experimentales correspondientes a los planos $\{002\}$ y $\{100\}$

FIGURA I.15

Figuras de polos correspondientes a la chapa de Ti



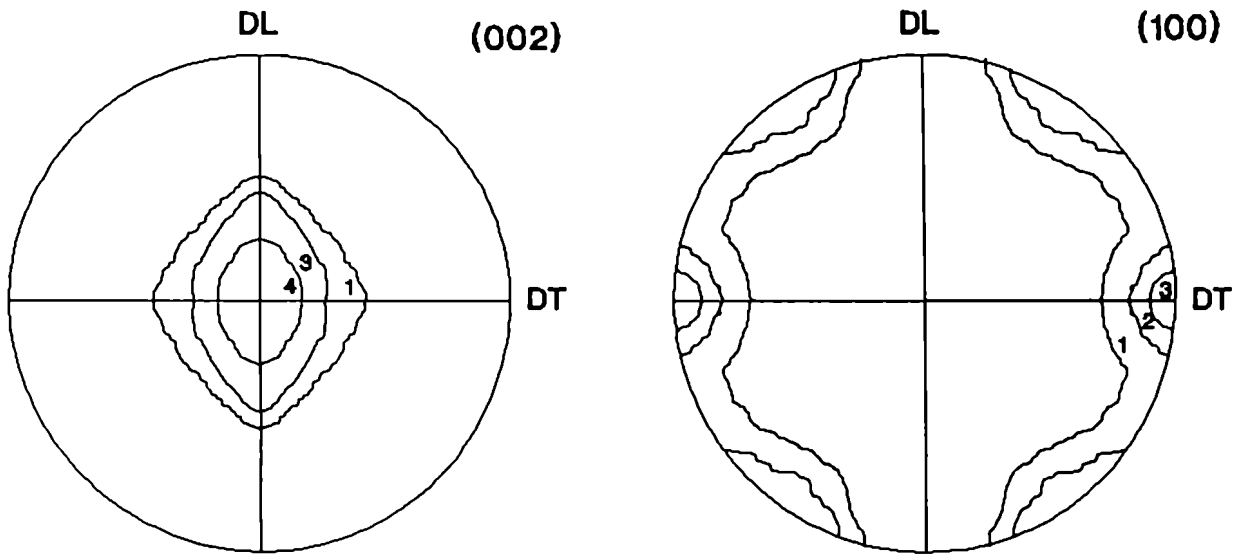
Las figuras de polos y las secciones de la FDOC, muestran una textura muy similar a la obtenida para la chapa de Zr (textura de polo oblicuo). Los máximos de la FDOC corresponden a una componente principal $\{2\bar{1}15\} \langle 01\bar{1}0 \rangle$ y otra de menor peso $\{20\bar{2}5\} \langle 1\bar{2}10 \rangle$.

- Chapa de Zn

Las figuras de polos de una chapa de Zn laminada fueron simuladas a partir de los datos obtenidos en la literatura [33]. Corresponde a una textura típica en los materiales hexagonales laminados (textura de polo central): el eje c se localiza en el centro de la figura de polos (eje c \parallel DN) y la dirección $\langle 1010 \rangle$ es paralela a la dirección transversal de la chapa. La orientación ideal asociada a esta textura es $\{0002\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$. En la Figura I.16 se muestran las figuras de polos simuladas correspondientes a los planos $\{002\}$ y $\{100\}$.

FIGURA I.16

Figuras de polos simuladas para una chapa de Zn laminada



CAPITULO II

PROMEDIO DE MAGNITUDES TENSORIALES

Uno de los objetivos de muchas investigaciones sobre texturas esta relacionado con el cálculo de propiedades macroscópicas de policristales basándose en las propiedades de los cristales individuales y en la distribución de orientaciones de los mismos en el policristal. En la mayoría de los casos las propiedades del policristal son también influenciadas, en menor o mayor grado, por otros factores tales como las interacciones entre granos, la distribución de bordes de grano o en general por la correlación de orientaciones en diferentes puntos del material.

2.1 INTRODUCCION AL PROBLEMA DE LOS PROMEDIOS

Muchas propiedades físicas que dependen de la dirección son representadas por tensores de distinto rango. El problema de calcular las propiedades del policristal requiere entonces promediar magnitudes tensoriales. En este capítulo, siguiendo la metodología propuesta por Bunge [4] se obtienen en forma general las expresiones para el cálculo de promedios de magnitudes tensoriales, introduciendo la FDOC como función de peso.

Dada una magnitud tensorial arbitraria E del monocristal que relaciona otras dos Y , X del mismo, de manera tal que para cada cristal se verifica

$$Y = E \cdot X \quad (2.1)$$

en el material policristalino las magnitudes E , X , Y dependen de la orientación del cristal y por lo tanto de su posición dentro del policristal.

$$Y(\vec{r}) = E(\vec{r}) \cdot X(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Esta ecuación se verifica en forma exacta para cada cristal.

Los valores medios de cada una de estas magnitudes en el volumen V del material son

$$\begin{aligned} \bar{Y} &= \frac{1}{V} \int_V Y(\vec{r}) dV \\ \bar{X} &= \frac{1}{V} \int_V X(\vec{r}) dV \\ \bar{E} &= \frac{1}{V} \int_V E(\vec{r}) dV \end{aligned} \quad (2.3)$$

Se pueden escribir entonces las magnitudes en cada punto en función del valor promedio de las mismas

$$\begin{aligned} Y(\vec{r}) &= \bar{Y} + \Delta Y(\vec{r}) \\ X(\vec{r}) &= \bar{X} + \Delta X(\vec{r}) \\ E(\vec{r}) &= \bar{E} + \Delta E(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde por (2.3)

$$\int_V \Delta X(\vec{r}) dV = \int_V \Delta Y(\vec{r}) dV = \int_V \Delta E(\vec{r}) dV = 0 \quad (2.5)$$

Sustituyendo en (2.2)

$$\bar{Y} + \Delta Y(\vec{r}) = \bar{E} \cdot \bar{X} + \bar{E} \cdot \Delta X(\vec{r}) + \Delta E(\vec{r}) \cdot \bar{X} + \Delta E(\vec{r}) \cdot \Delta X(\vec{r}) \quad (2.6)$$

Promediando ambos miembros de la ecuación en todo el volumen V del material

$$\bar{Y} = \bar{E} \cdot \bar{X} + \frac{1}{V} \int_V \Delta E(\vec{r}) \cdot \Delta X(\vec{r}) dV \quad (2.7)$$

Las magnitudes promedio \bar{Y} y \bar{X} (macroscópicas) no están relacionadas en forma directa a través del tensor promedio \bar{E} . Si el tensor \bar{X} es considerado como variable independiente, las componentes de $\Delta X(\vec{r})$ dependen de \bar{X} . Para $\bar{X} = 0$ se verifica que $\Delta X(\vec{r}) = 0$. Dada la relación lineal (2.2) generalmente es válido suponer que existe una relación lineal entre \bar{X} y $\Delta X(\vec{r})$

$$\Delta X(\vec{r}) = U(\vec{r}) \cdot \bar{X} \quad (2.8)$$

donde $U(\vec{r})$ es un tensor de grado $2n$ si \bar{X} y $\Delta X(\vec{r})$ son tensores de grado n . Haciendo esta sustitución en la ecuación (2.7)

$$\bar{Y} = \left[\bar{E} + \frac{1}{V} \int_V \Delta E(\vec{r}) \cdot U(\vec{r}) dV \right] \cdot \bar{X} \quad (2.9)$$

se obtiene una relación entre las magnitudes macroscópicas similar a la correspondiente para el monocristal, pero el tensor que las relaciona

$$\bar{E} + \frac{1}{V} \int_V \Delta E(\vec{r}) \cdot U(\vec{r}) dV \quad (2.10)$$

es en general diferente del simple promedio aritmético \bar{E}

Si escribimos la ecuación inversa de (2.1)

$$X = E^{-1} \cdot Y \quad (2.11)$$

con el mismo razonamiento anterior se llega a

$$\bar{X} = \left[\bar{E}^{-1} + \frac{1}{V} \int_V \Delta E^{-1}(\vec{r}) \cdot U'(\vec{r}) dV \right] \cdot \bar{Y} \quad (2.12)$$

donde en general $\bar{E} \star (\bar{E}^{-1})^{-1}$

El cálculo de la integral en las ecuaciones (2.9) y (2.12) es sumamente dificultoso y no ha sido resuelto hasta el presente. Las dos aproximaciones límites para la propiedad real del policristal se obtienen despreciando en las ecuaciones (2.9) y (2.12) el término de la integral. En el primer caso (ec. 2.9) se supone que la magnitud X es constante en todos los granos del policristal. Esto significa violar las condiciones de contorno en los bordes de grano para la magnitud Y. En el segundo caso (ec. 2.12) la magnitud Y es considerada constante en todo el volumen originando una incompatibilidad en las condiciones de contorno en los bordes de grano para la magnitud X. Una tercera aproximación, más realista toma el promedio de las dos anteriores.

$$\bar{E} = \frac{\bar{E} + (\bar{E}^{-1})^{-1}}{2} \quad (2.13)$$

En la teoría de la elasticidad estas tres aproximaciones son conocidas como de Voigt, Reuss y Hill respectivamente.

Los modelos llamados autoconsistentes, desarrollados con posterioridad, tienen en cuenta las condiciones de equilibrio y las ecuaciones de compatibilidad en los bordes de grano. Morris [29] basándose en los trabajos de Eshelby [30], Kroner [31] y Kneer [32] aplica un modelo autoconsistente al cálculo de constantes elásticas en policristales texturados. Cada grano es considerado como una inclusión embebida en una matriz homogénea cuyas constantes elásticas son las correspondientes al policristal real. Los promedios son calculados en una forma iterativa, tomando como primera aproximación para el valor de las constantes elásticas reales del policristal, el dado por la ecuación (2.13), en la cual la FDOC es tomada como factor de peso, y calculando en forma autoconsistente el llamado "tensor de interacción" entre el grano y la matriz. El tiempo de cálculo requerido por estos

modelos y el hecho de que los resultados difieren muy poco de la aproximación de Hill [4] hacen que esta última sea la habitualmente utilizada.

2.2 CALCULO DEL PROMEDIO UTILIZANDO LA FDOC

El promedio en el volumen del policristal de la magnitud tensorial $E(\vec{r})$ cuyas componentes dependen solo de la orientación g del cristal ubicado en la posición \vec{r}

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \int E(\vec{r}) dV \quad (2.14)$$

puede hacerse en dos pasos: integrando primero sobre todos los elementos de volumen dV que poseen la orientación g y luego sobre todas las orientaciones g

$$\bar{E} = \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{g}} E(\mathbf{g}) \int_{V(\mathbf{g})} dV \quad (2.15)$$

utilizando la definición de la FDOC (ec. 1.1) y reemplazando en (2.15)

$$\bar{E} = \oint E(\mathbf{g}) F(\mathbf{g}) d\mathbf{g} \quad (2.16)$$

La FDOC aparece como una función de peso en el cálculo de los promedios de las magnitudes físicas que dependen de la orientación

El cálculo de la integral en la ec.(2.16) se puede simplificar si la dependencia angular del tensor E es desarrollable en una serie de esféricos armónicos generalizados, de la misma forma que la FDOC.

$$E(\mathbf{g}) = E(\alpha, \beta, \omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l G_{lmn} Z_{lmn}(\cos\beta) e^{-im\alpha} e^{-in\omega} \quad (2.17)$$

En este caso, aprovechando las propiedades de ortonormalidad de los esféricos armónicos, la integral (2.16) se transforma en una sumatoria

$$\bar{E} = 4\pi^2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l G_{lmn} f_{lmn} \quad (2.18)$$

La dependencia angular del tensor E está reflejada en las componentes de la matriz de la transformación de un sistema a otro de coordenadas. En efecto, si E representa las componentes del tensor en el sistema de coordenadas fijo al cristal las componentes del tensor E' en el sistema de coordenadas fijo a la muestra están dadas por:

$$E' = a(g).E \quad (2.19)$$

$$E'_{i_1 i_2 \dots i_r} = a_{i_1 j_1} \cdot a_{i_2 j_2} \dots a_{i_r j_r} E_{j_1 j_2 \dots j_r} \quad (2.20)$$

donde $a(g)$ es la matriz de la transformación que depende de los tres ángulos de Euler y cuya expresión en función de los mismos puede verse en el Apéndice I. El desarrollo de cada uno de los a_{ij} en serie de esféricos armónicos generalizados contiene solo términos de primer grado en l . Se demuestra [4], que el desarrollo en serie del producto de r a_{ij} solo contiene términos en l hasta el orden r y además, si r es par los términos con l impar se hacen cero [7]. Este resultado permite calcular los promedios de magnitudes tensoriales de orden par mediante la ecuación (2.18) utilizando solo los coeficientes de la FDOC de orden par, es decir basta conocer $\bar{F}(\sigma)$, determinable a partir de las figuras de polos.

CAPITULO III

COEFICIENTES DE DILATACION TERMICA

3.1 PROMEDIO DE UN TENSOR DE SEGUNDO ORDEN

El método de cálculo desarrollado en el capítulo II puede ser aplicado a magnitudes tensoriales de cualquier orden. En particular al tensor de coeficientes de dilatación térmica de segundo orden, que relaciona una variación pequeña de temperatura con las deformaciones que se producen en el cristal [34]

$$\varepsilon_{ij} = F_{ij}(T) \Delta T \quad (3.1)$$

donde ΔT : variación de temperatura

$F_{ij}(T)$: componentes del tensor de coeficientes de dilatación térmica

ε_{ij} : componentes del tensor de deformación

$F_{ij}(T)$ es una magnitud tensorial siempre y cuando $\Delta T = dT$. Para una dirección dada se define como:

$$F(T) = \frac{1}{L} \frac{dL}{dT} \quad (3.2)$$

donde dL y L son la variación de longitud y la longitud inicial respectivamente, medidas en esa dirección y la derivada se calcula a la temperatura T . Este tensor es el que se denomina tensor de coeficientes de dilatación térmica verdadero. Se definen también los coeficientes de dilatación térmica entre dos temperaturas

$$F_m \Big|_{T_1}^{T_2} = \frac{L_{T_2} - L_{T_1}}{L_{T_1}(T_2 - T_1)} \quad (3.3)$$

Estos coeficientes se relacionan con los verdaderos de acuerdo a la ecuación

$$F_m \Big|_{T_1}^{T_2} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} F(T) dT}{T_2 - T_1} \quad (3.4)$$

F_m no es una magnitud tensorial ya que la matriz de transformación de un sistema a otro de coordenadas es función de la temperatura.

El número de componentes independientes no nulas del tensor F esta condicionado por las simetrías del cristal. En el caso de simetría cúbica del cristal existe una sola componente independiente no nula, es decir es un tensor isótropo. Para simetría hexagonal existen dos, para la simetría ortotrópica tres [34].

Los materiales policristalinos texturados de estructura cristalina cúbica obviamente serán isótropos desde el punto de vista de la dilatación térmica, ya que los cristales que los componen lo son, pero en general no ocurrirá lo mismo en materiales con una estructura cristalina de menor simetría, siendo los cristales individuales anisótropos para esta propiedad. En particular se analizará como influye la textura en materiales con estructura cristalina hexagonal.

En este análisis se desprecian las interacciones entre granos, es decir suponiendo dT uniforme en todo el material se asume que cada grano del policristal se deforma según la ec. (3.1) independientemente de su entorno.

3.2 COEFICIENTES DE DILATACION TERMICA EN MATERIALES DE ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL Y SIMETRIA ORTOTROPICA DE LA MUESTRA

En el sistema de coordenadas fijo al cristal el tensor F toma la forma

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & 0 & 0 \\ 0 & F_{11} & 0 \\ 0 & 0 & F_{33} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

La ley de transformación (2.19) del tensor F es de la forma:

$$F'_{ij} = a_{ik} a_{jl} F_{kl} \quad (3.6)$$

donde a_{ij} es la matriz de pasaje del sistema de coordenadas del cristal al sistema muestra y esta expresada en función de los ángulos de Euler (Apéndice I).

La simetría ortotrópica de la muestra impone las siguientes condiciones sobre los coeficientes f_{lmn} de la FDOC

$$f_{lmn} = \begin{cases} f_{lmn} = (-1)^n f_{lm\bar{n}} & \text{si } m \text{ es par} \\ 0 & \text{si } m \text{ es impar} \end{cases} \quad (3.7)$$

Considerando las condiciones (3.7) y la forma del tensor F, los productos $a_{ij} \cdot a_{kl}$ cuyo desarrollo en serie de esféricos armónicos generalizados es necesario calcular son:

$$\begin{array}{lll} 1) a_{11}^2 + a_{12}^2 & 2) a_{13}^2 & 3) a_{21}^2 + a_{22}^2 \\ 4) a_{23}^2 & 5) a_{31}^2 + a_{32}^2 & 6) a_{33}^2 \end{array} \quad (3.8)$$

En función de los ángulos de Euler las expresiones anteriores toman la forma

$$\begin{aligned}
1) & \cos^2\alpha \cos^2\beta + \sin^2\alpha = 1 - \cos^2\alpha \sin^2\beta \\
2) & \cos^2\alpha \sin^2\beta \\
3) & \sin^2\alpha \cos^2\beta + \cos^2\alpha = 1 - \sin^2\alpha \sin^2\beta \\
4) & \sin^2\alpha \sin^2\beta \\
5) & \sin^2\beta = 1 - \cos^2\beta \\
6) & \cos^2\beta
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Es interesante notar que en estas expresiones no aparece el ángulo ω , como consecuencia de la isotropía del coeficiente de dilatación térmica en el plano basal.

El cálculo de los coeficientes del desarrollo en serie de las expresiones (3.9) se realiza en la manera habitual [4]

$$G_{lmn} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi h(\alpha \beta \omega) e^{im\alpha} Z_{lmn}^*(\cos\beta) e^{in\omega} \sin\beta \, d\beta \, d\alpha \, d\omega \tag{3.10}$$

donde $h(\alpha \beta \omega)$ es la función a desarrollar.

Los resultados se sintetizan en la tabla III.1

TABLA III.1
Coeficientes del desarrollo en serie de esféricos armónicos
generalizados de las funciones (3.9)

Función	G_{000}	G_{200}	G_{220}	$G_{2\bar{2}0}$
$\cos^2\alpha \sin^2\beta$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}$	$\frac{1}{\sqrt{15}}$	$\frac{1}{\sqrt{15}}$
$\sin^2\alpha \sin^2\beta$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}$	$-\frac{1}{\sqrt{15}}$	$-\frac{1}{\sqrt{15}}$
$\cos^2\beta$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}$	0	0

Utilizando estos valores en la ecuación general (2.18) se obtienen las componentes del tensor de dilatación térmica promedio para el policristal texturado

$$\bar{F}_{11} = F_{11} + (F_{33} - F_{11}) \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 [(-0.21081851)f_{200} + 0.51639778f_{220}] \right\} \quad (3.11)$$

$$\bar{F}_{22} = F_{11} + (F_{33} - F_{11}) \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 [(-0.21081851)f_{200} - 0.51639778f_{220}] \right\} \quad (3.12)$$

$$\bar{F}_{33} = F_{11} + (F_{33} - F_{11}) \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 [0.42163702]f_{200} \right\} \quad (3.13)$$

El policristal se comporta entonces, desde el punto de vista de sus coeficientes de dilatación térmica, como un monocristal equivalente de simetría ortotrópica (la supuesta para la muestra).

El cálculo del coeficiente de dilatación térmica en cualquier dirección de la muestra policristalina puede realizarse ahora a partir de \bar{F}_{11} , \bar{F}_{22} y \bar{F}_{33} , utilizando la rotación de coordenadas correspondiente. Usando la expresión dada por Nye [34]

$$\bar{F}(l_1, l_2, l_3) = \bar{F}_{11}l_1^2 + \bar{F}_{22}l_2^2 + \bar{F}_{33}l_3^2 \quad (3.14)$$

donde l_1 , l_2 y l_3 son los cosenos directores de la dirección en la que interesa conocer el valor del coeficiente de dilatación térmica.

En particular para conocer la variación del coeficiente de dilatación térmica en el plano de una chapa, tomando $X_1 \parallel DL$, $X_2 \parallel DT$ y $X_3 \parallel DN$

$$\bar{F}(\alpha) = \bar{F}_{11} + (\bar{F}_{22} - \bar{F}_{11}) \sin^2 \alpha \quad (3.15)$$

donde α es el ángulo entre DL y la dirección de medida en el plano de la chapa.

A este mismo resultado puede llegarse también si en la ec. de partida (3.11) se expresan los coeficientes de la FDOC en un sistema de coordenadas rotado en un ángulo α alrededor de la dirección DN según la ley de transformación [5]

$$f_{lmn} = \left(\frac{2}{2l+1} \right)^{1/2} \sum_{p=-l}^l f_{lpn} Z_{lpm}(\cos \beta) e^{-ip\alpha} e^{-im\omega} \quad (3.16)$$

en este caso $\omega = \beta = 0$ y α es el ángulo entre DL y el nuevo eje X_1 . Considerando además las siguientes relaciones [5]

$$\begin{aligned} Z_{lpm}(1) &= 0 & m \neq p \\ Z_{lpm}(1) &= \left(\frac{2l+1}{2} \right) & m = p \end{aligned} \quad (3.17)$$

la ecuación (3.11) se transforma en

$$\bar{F}(\alpha) = F_{11} + (F_{33} - F_{11}) \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 [(-0.21081851)f_{200} + 0.51639778f_{220} \cos 2\alpha] \right\} \quad (3.18)$$

Esta ecuación es equivalente a la (3.15) como puede verificarse si se reemplazan en (3.15) las expresiones de \bar{F}_{11} , \bar{F}_{22} y \bar{F}_{33} por las dadas en (3.11), (3.12) y (3.13)

Estas formulas permiten entonces, conociendo los coeficientes del desarrollo en serie de FDOC y los valores de los coeficientes de dilatación térmica verdaderos del monocristal, calcular los correspondientes al policristal texturado. Para calcular los coeficientes de dilatación promedio entre dos temperaturas es necesario utilizar la ec. (3.4). Se promedian entonces, en función de la textura, las magnitudes tensoriales (coeficientes de dilatación térmica verdaderos) para cada temperatura y luego se promedian en función de la temperatura (ec.(3.4)). Dado que en general los datos de coeficientes de dilatación térmica para monocristales aparecen en la literatura a intervalos discretos de temperatura, los

cálculos para policristales deben realizarse para esas mismas temperaturas y la integral en la ec. (3.4) debe reemplazarse por una sumatoria [35].

En este desarrollo hay implícitas dos aproximaciones:

- a) Se toma el valor del coeficiente de dilatación térmica correspondiente al monocristal, despreciando entonces posibles variaciones en la zonas de imperfecciones del policristal, bordes de grano, dislocaciones, etc.
- b) No se tienen en cuenta las interacciones entre granos: cada cristal se comporta como si estuviese aislado.

3.3 APLICACIONES AL Zr, Zircaloy-4 Y Ti

Los resultados obtenidos en 3.2 fueron aplicados a chapas de Ti comercial UT 40, Zr y Zircaloy-4 con la siguiente composición química:

Composición química del Zr (% en peso)

Zr + Hf	> 99.2
Hf	0.02
Fe + Cr	0.10
H	0.0005
N	0.005
C	0.013
O	0.12

Composición química del Zircaloy-4 (% en peso)

Zr	98.2
Sn	1.46
Fe	0.22
Cr	0.11

Composición química del Ti UT 40 (% en peso)

C	≤	0.08
N	≤	0.06
H	≤	0.01
O	≤	0.25
Fe	≤	0.25
Ti		resto

Los coeficientes del desarrollo en serie de esféricos armónicos de la FDOC fueron calculados a partir de las figuras de polos de los planos {002}, {100} y {011}, obtenidas experimentalmente por difracción de rayos X, utilizando la técnica en reflexión - transmisión de acuerdo a lo detallado en el capítulo I. Los valores obtenidos para los tres materiales figuran en la tabla III.2

TABLA III.2

Coeficientes de textura hasta el orden $l=2$ para Zr, Zircaloy-4 y Ti

Material	f_{200}	f_{220}
Circonio	0.0129580	-0.0052695
Zircaloy-4	0.0137103	-0.0034681
Titanio	0.0157623	-0.0044720

Los coeficientes de dilatación térmica fueron medidos en un dilatómetro diferencial Netzsch modelo 402.E, que permite trabajar con un vacío de 10^{-4} mm de Hg.

Las probetas fueron cortadas de la chapa original con dimensiones aproximadas de 0.5 cm de ancho y 5 cm de largo, formando la dirección de medida (la de mayor longitud)

distintos ángulos (α) con la dirección de referencia de la chapa (dirección de laminado DL).

El error de las mediciones se estima del orden del 4%

Los coeficientes de dilatación medios entre 20°C y 600°C obtenidos experimentalmente para los tres materiales figuran en las tablas III.3, III.4, y III.5

TABLA III.3.

Coeficientes de dilatación medios entre 20°C y 600°C, medidos en la chapa de Zr

α (°)	$F_m \times 10^6(1/^\circ\text{C})$
0	6.4 ± 0.3
45	6.7 ± 0.3
90	7.5 ± 0.3

TABLA III.4.

Coeficientes de dilatación medios entre 20°C y 600°C, medidos en la chapa de Zircaloy-4

α (°)	$F_m \times 10^6(1/^\circ\text{C})$
0	5.9 ± 0.3
45	6.4 ± 0.3
90	7.1 ± 0.3

TABLA III.5.

Coeficientes de dilatación medios entre 20°C y 600°C, medidos
en la chapa de Ti

α (°)	$F_m \times 10^6(1/^\circ\text{C})$
0	9.8 ± 0.4
22.5	9.9 ± 0.4
45	10.1 ± 0.4
67.5	10.3 ± 0.4
90	10.5 ± 0.4

En los gráficos III.1, III.2, y III.3 se muestran los puntos experimentales y las curvas teóricas (ec. 3.15) trazadas utilizando los valores de coeficientes de textura, dados en las tablas III.2 para cada material, y los valores de coeficientes de dilatación térmica para monocristales determinados experimentalmente por distintos autores.

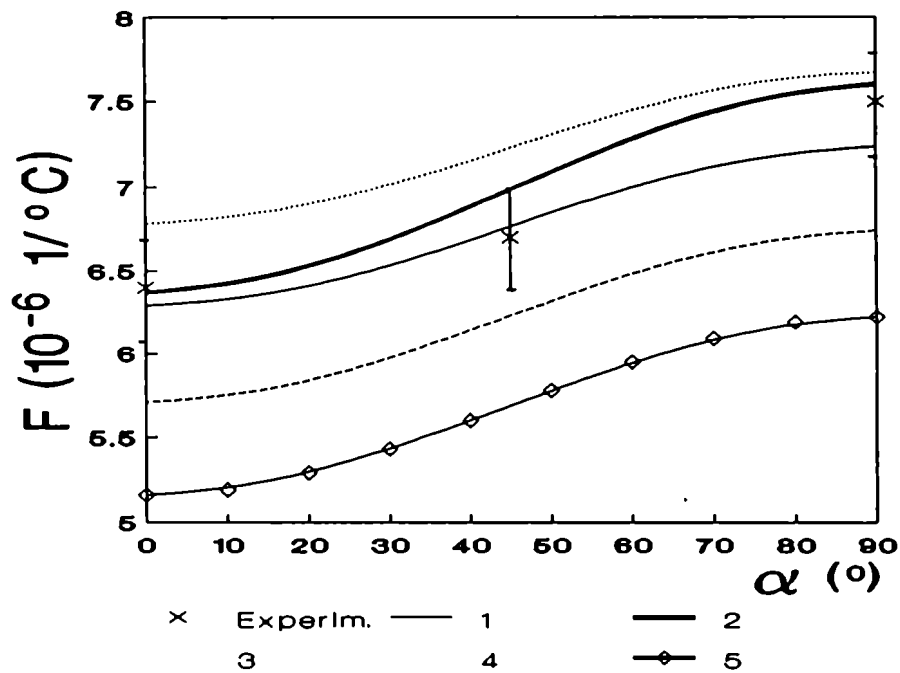
Es evidente la gran disparidad de datos que existen en la literatura para los coeficientes de dilatación térmica de monocristales de estos materiales, debido a los distintos parámetros que influyen en las mediciones: pureza del material, contaminación de las muestras con oxígeno y nitrógeno, mediciones dilatométricas en monocristales o determinaciones a partir de mediciones de parámetro de red con rayos X en muestras policristalinas, etc.

Para el Zircaloy-4 no se encontraron en la literatura valores de coeficientes de dilatación térmica para monocristales, por lo que se trazaron las curvas tomando los valo-

res correspondientes a monocristales de Zr [35] y Zircaloy-2 [36] (una aleación de Zr con Sn 1.2-1.7%, Fe 0.07-0.20%, Cr 0.05-0.15%, Ni 0.03- 0.08%, O 1400ppm)

FIGURA III.1.

Coeficiente medio de dilatación térmica entre 20°C y 600°C en el plano de la chapa de Zr.



Curvas calculadas usando valores de coeficientes de dilatación térmica del monocristal

dados por: 1) Couterne (monocrist.) [35]

2) MacEwen y colab. [36]

3) Russell [37]

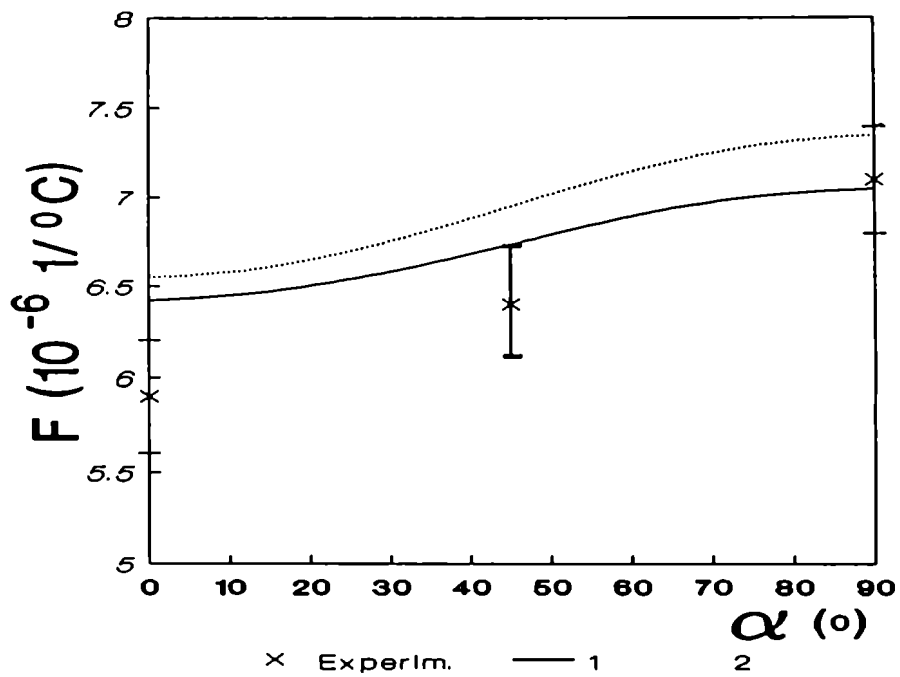
4) Goldak y colab. [38]

5) Couterne (policrist.) [35]

FIGURA III.2.

Coeficiente medio de dilatación térmica entre 20°C y 600°C en el plano de la chapa de

Zircaloy-4



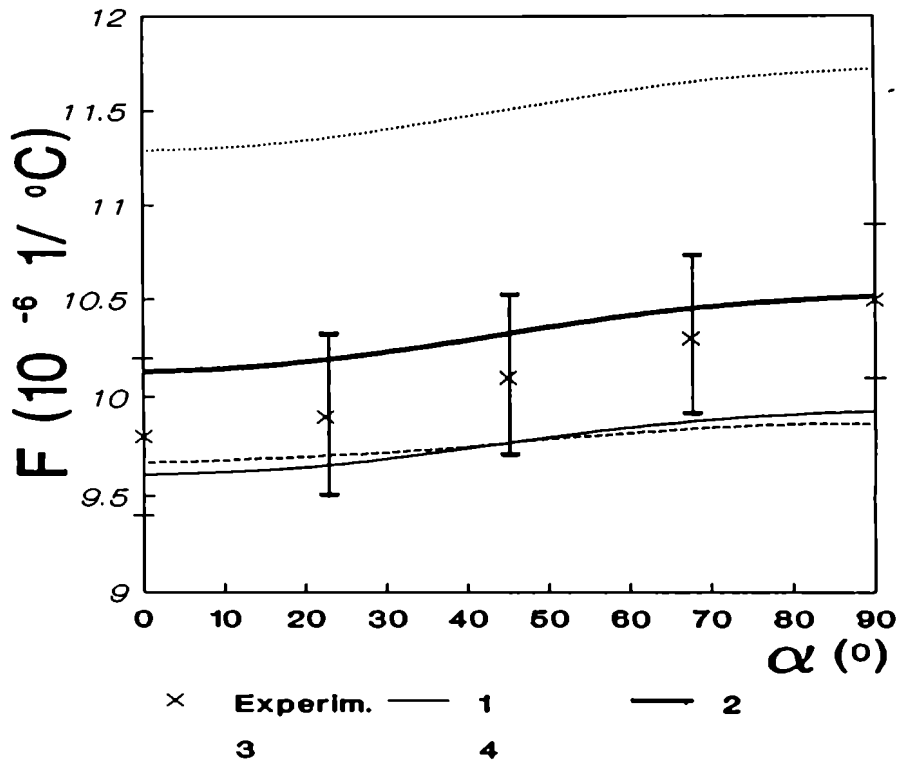
Curvas calculadas usando valores de coeficientes de dilatación térmica del monocristal

dados por: 1) Couterne (monocrist.) [35]

2) MacEwen y colab. [36]

FIGURA III.3.

Coefficiente medio de dilatación térmica entre 20°C y 600°C en el plano de la chapa de Ti.



Curvas calculadas usando valores de coeficientes de dilatación térmica del monocristal

dados por: 1) Willens [39]

2) Medoff [40]

3) Berry y colab. [41]

4) Spreadborough y col.[42]

En el caso de aleaciones, como el Zircaloy-4, muchas veces es difícil o prácticamente imposible la fabricación de monocristales para determinar sus coeficientes de dilatación térmica, u otras propiedades, para luego calcular las propiedades del policristal e

inferir si realmente es válida la aproximación de promediar la propiedad teniendo en cuenta solo la textura y despreciando las condiciones de contorno de cada cristal. Sin embargo este análisis puede ser útil en estos casos si se realiza el camino inverso: conociendo los coeficientes del desarrollo en serie de la FDOC y midiendo el coeficiente de dilatación térmica en varias direcciones (por ejemplo en el plano de una chapa) es posible utilizando la ecuación (3.18) calcular los coeficientes de dilatación térmica "aparentes" del monocristal en la muestra que se está estudiando. Esto posibilita predecir la propiedad de interés para cualquier dirección de la muestra, usando la ecuación (3.14).

En las muestras de Zircaloy-4, se tomaron los valores experimentales de la tabla III.4 y asumiendo constantes, en el rango de temperatura, los coeficientes de dilatación térmica se calcularon mediante un ajuste por cuadrados mínimos los coeficientes de dilatación térmica para el monocristal

$$F_{11} = 4.61 \times 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$$

$$F_{33} = 13.09 \times 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$$

Con estos valores el coeficiente de dilatación medio calculado para la chapa policristalina en la dirección normal a la misma es

$$\bar{F}_{33 \text{ cal.}} = 9.4 \times 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$$

El coeficiente medido [43] en esa misma dirección es

$$\bar{F}_{33 \text{ med.}} = 9.6 \times 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$$

La diferencia entre los dos valores (del orden del 2%) es pequeña y esta comprendida en el error proveniente de las dos mediciones involucradas: Mediciones de coeficientes de dilatación en el plano de la chapa y mediciones de la textura para determinar los coeficientes de la FDOC.

Si bien en este caso no pueden compararse valores absolutos de coeficientes de dilatación térmica en el monocristal y en el policristal, si es evidente que el modelo reproduce el comportamiento macroscópico del policristal con los valores de coeficientes de dilatación térmica "aparentes" calculados.

En las muestras de Zr los valores de coeficientes de dilatación térmica medidos en monocristales que mejor ajustan nuestros resultados son los reportados por Couterne [35] y por MacEwen [36] para Zircaloy-2. En el primer caso las mediciones se hicieron en monocristales de alta pureza, mediante dilatometría y en el segundo en muestras masivas policristalinas determinando las variaciones en los parámetros de red mediante difracción de neutrones.

Según lo señalan Goldak y colab. en su trabajo [38] el circonio es muy afectado en sus propiedades dilatométricas por la presencia de impurezas. Comparando sus valores de coeficientes de dilatación térmica, obtenidos en muestras monocristalinas masivas mediante dilatometría, con los obtenidos por Russell [37] en muestras policristalinas, mediante difracción de rayos X, donde es probable que las capas superficiales del material estén contaminadas con impurezas, se observa que estos últimos son mayores. Los valores obtenidos por Couterne [35] a partir de muestras policristalinas por dilatometría en circonio de alta pureza y con un vacío de 10^{-8} Torr son mucho más bajos, atribuyendoselo a la influencia de los bordes de grano.

En resumen: Los valores más bajos de coeficientes de dilatación térmica se obtienen para muestras masivas (método dilatométrico), policristalinas, de alta pureza y con una contaminación mínima durante el proceso de medición. Luego siguen los obtenidos en muestras monocristalinas de alta pureza, mediante medidas dilatométricas y los valores más altos corresponden a muestras policristalinas con posible contaminación durante la

experiencia de medición. Nuestras muestras eran policristalinas, con impurezas y posible contaminación durante la experiencia de medición debido al vacío con que se trabajó (10^{-4} Torr frente a 10^{-6} Torr de los otros autores). Evidentemente, habiendo dos parámetros en juego: impurezas e influencia de la policristalinidad no podemos decidir cual de los dos influye más en el comportamiento macroscópico del material, en cuanto a sus propiedades dilatométricas se refiere. Couterne, que atribuye una influencia grande a la policristalinidad, trabaja sin embargo con Zr monocristalino con un contenido de oxígeno un orden de magnitud superior al del Zr policristalino. Es muy probable que nuestros resultados se vean afectados entonces por dos efectos contrapuestos: la policristalinidad disminuiría los coeficientes de dilatación térmica y las impurezas los aumentarían (Russell)

En el trabajo de MacEwen y colab. [36] sobre Zircaloy-2 se pone de manifiesto la influencia de las condiciones de contorno en la dilatación de los cristales individuales. Al comparar los valores del espaciado de los planos $\{002\}$ y $\{100\}$, medidos por difracción de neutrones en un monocristal y en una muestra masiva policristalina muy texturada, en función de la temperatura, se observa además de una diferencia en los valores iniciales de los espaciados (indicativa de un estado de deformación residual), una dependencia distinta con la temperatura en el mono y en el policristal. De este trabajo, se desprende que hay un tercer factor a tener en cuenta al analizar el comportamiento dilatométrico del policristal: el estado inicial de microdeformación de los cristales. En efecto, en los materiales hexagonales con anisotropía dilatométrica muy marcada, los tratamientos térmicos dejan los cristales con deformaciones residuales, dependiendo de la relación de orientaciones con los granos vecinos.

3.4 CONCLUSIONES

El análisis de los resultados muestra que para las texturas analizadas, muy similares entre si

- a) El modelo predice, en forma bastante aproximada, la forma de la curva F vs α , independientemente de los corrimientos que se observan al utilizar los valores dados por distintos autores para los coeficientes correspondientes al monocristal. Es decir, la dilatación térmica de una muestra policristalina está dada, en primera aproximación, por el simple promedio de la dilatación térmica de los cristales individuales.

- b) A partir del conocimiento de la textura y de las mediciones del coeficiente de dilatación térmica en algunas direcciones del material policristalino, pueden calcularse los coeficientes de dilatación térmica "aparentes" del monocristal. Esto permite predecir, con buena precisión el coeficiente de dilatación térmica del policristal en cualquier otra dirección.

- c) Para poner de manifiesto el llamado efecto "policristal" (influencia de las interacciones entre granos) es necesario realizar experiencias muy cuidadosas, en lo referente a garantizar una muy baja contaminación de las muestras, o trabajar con un contenido de impurezas similar en el mono y en el policristal.

CAPITULO IV
ELASTICIDAD

4.1 ELASTICIDAD EN MONOCRISTALES

La elasticidad lineal en los monocristales esta descrita por la conocida ley de Hooke, que relaciona el tensor de las tensiones σ_{kl} con el tensor de las deformaciones ϵ_{ij} a través del tensor de módulos elásticos S_{ijkl}

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (4.1)$$

o la ecuación inversa

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (4.2)$$

donde $C_{ijkl} = S_{ijkl}^{-1}$ es el tensor de constantes elásticas.

Los tensores de cuarto orden C_{ijkl} y S_{ijkl} tienen en el espacio de tres dimensiones 81 componentes. Consideraciones de simetría en los tensores σ y ϵ y argumentos termodinámicos reducen el número máximo de componentes independientes no nulas a 21 [34]. Esto permite pasar a una notación matricial o reducida de dos índices, habitualmente utilizada: Los dos primeros subíndices son abreviados en uno solo de 1 a 6, y de la misma manera se abrevian los dos últimos

$$\begin{array}{ll} 11 \rightarrow 1 & 32,23 \rightarrow 4 \\ 22 \rightarrow 2 & 31,13 \rightarrow 5 \\ 33 \rightarrow 3 & 21,12 \rightarrow 6 \end{array} \quad (4.3)$$

Para escribir las ecuaciones en forma más compacta se introducen factores 2 y 4 en

la definición de los S_{ij} , de acuerdo a la siguiente convención:

$$\begin{aligned} S_{ijk} &= S_{mn} \quad \text{cuando } m \text{ y } n \text{ son } 1, 2 \text{ ó } 3 \\ 2S_{ijk} &= S_{mn} \quad \text{cuando } m \text{ o } n \text{ son } 4, 5 \text{ ó } 6 \\ 4S_{ijk} &= S_{mn} \quad \text{cuando } m \text{ y } m \text{ son } 4, 5 \text{ ó } 6 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Para los C_{ijkl} se aplican las relaciones (4.3) directamente. Las ecuaciones (4.1) y (4.2) se escriben entonces

$$\begin{aligned} \epsilon_i &= S_{ij} \sigma_j \quad (i,j=1,2,\dots,6) \\ \sigma_i &= C_{ij} \epsilon_j \quad (i,j=1,2,\dots,6) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Sin embargo debe tenerse en cuenta que S_{ij} y C_{ij} no son las componentes de un tensor y por lo tanto el pasaje de un sistema a otro de coordenadas debe realizarse con la notación de cuatro índices

$$S'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} S_{mnop} \quad (4.6)$$

$$C'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} C_{mnop} \quad (4.7)$$

donde a_{ij} es la matriz de pasaje de un sistema a otro de coordenadas y esta expresada en función de los ángulos de Euler (Apéndice I).

Las simetrías propias del cristal reducen aún más el número de componentes independientes no nulas de los tensores S y C : para cristales cúbicos solo son 3 y para cristales hexagonales 5. Para un material isótropo 2.

4.2 ELASTICIDAD EN POLICRISTALES

PROMEDIO DE UN TENSOR DE CUARTO ORDEN

El cálculo del promedio de los tensores S_{ijkl} o C_{ijkl} conduce, como fue señalado en 2.1, a las dos aproximaciones límites de Reuss y Voigt y permite, haciendo el promedio de ambos, calcular los valores de la llamada aproximación de Hill. Si bien la aproximación Reuss - Voigt - Hill es el promedio de dos suposiciones poco realistas, sin una buena base teórica, los resultados que se obtienen en materiales isótropos coinciden con los experimentales dentro de un margen de error relativamente pequeño [44]. Además, en las aproximaciones más elaboradas (modelos autoconsistentes) se toma este valor como punto de partida para las sucesivas iteraciones.

El promedio, de acuerdo a la ecuación (2.18), fue resuelto por Morris [19], quien calculó los valores de los coeficientes del desarrollo en serie del producto de los a_{ij} que aparecen en las ecuaciones (4.6) y (4.7), para simetría ortorrómbica o mayor del cristal y ortotrópica (chapa laminada) de la muestra. De acuerdo a lo señalado en 2.2 aparecen solo términos no nulos del desarrollo en serie para l par y hasta el orden $l=4$.

Si hacemos el siguiente cambio de notación

$$a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} = T_{ijklmnop}$$

y expresamos $T_{ijklmnop}$ en notación reducida (4.3), el promedio de T , tomando como función de peso la FDOC, puede escribirse como

$$\begin{aligned} \bar{T}_{ijkl} = & G_{000} + 4\pi^2(G_{200}f_{200} + G_{202}f_{202} + G_{220}f_{220} + G_{222}f_{222} \\ & + G_{400}f_{400} + G_{402}f_{402} + G_{422}f_{422} + G_{404}f_{404} + G_{440}f_{440} \\ & + G_{424}f_{424} + G_{442}f_{442} + G_{444}f_{444} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Los valores de G_{lmn} dados por Morris están tabulados en la tabla I del APENDICE II. En la tabla aparecen los G_{lmn} para 45 \bar{T}_{ijk} . Los restantes 36 se calculan por relaciones de la forma:

$$\bar{T}_{1144} = 2\bar{T}_{2223}, \quad \bar{T}_{2344} = 2\bar{T}_{4423}, \quad \bar{T}_{4411} = \bar{T}_{2311}, \quad \bar{T}_{4455} = \bar{T}_{2313} + \bar{T}_{4413}$$

4.3 POLICRISTALES CON ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA

El tensor de constantes elásticas promedio para muestras policristalinas con simetría ortotrópica tiene, en notación reducida, las siguientes componentes

$$\begin{aligned} \bar{C}_{11} &= C_{11} - 2C[0.2 + 4\pi^2(-0.0606092f_{400} - 0.1690308f_{440} + 0.1277753f_{420})] \\ \bar{C}_{22} &= C_{11} - 2C[0.2 + 4\pi^2(-0.0606092f_{400} - 0.1690308f_{440} - 0.1277753f_{420})] \\ \bar{C}_{33} &= C_{11} - 2C[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400})] \\ \bar{C}_{12} &= C_{12} + C[0.2 + 4\pi^2(0.0404049f_{400} - 0.3380616f_{440})] \\ \bar{C}_{13} &= C_{12} + C[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} + 0.2555505f_{420})] \\ \bar{C}_{23} &= C_{12} + C[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} - 0.2555505f_{420})] \\ \bar{C}_{44} &= C_{44} + C[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} - 0.2555505f_{420})] \\ \bar{C}_{55} &= C_{44} + C[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} + 0.2555505f_{420})] \\ \bar{C}_{66} &= C_{44} + C[0.2 + 4\pi^2(0.0404049f_{400} - 0.3380616f_{440})] \end{aligned} \tag{4.9}$$

donde C_{ij} son las constantes elásticas del monocristal y $C = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$

Expresiones similares se obtienen para las componentes promedio del tensor de módulos elásticos

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{11} &= S_{11} - 2S[0.2 + 4\pi^2(-0.0606092f_{400} - 0.1690308f_{440} + 0.1277753f_{420})] \\
\bar{S}_{22} &= S_{11} - 2S[0.2 + 4\pi^2(-0.0606092f_{400} - 0.1690308f_{440} - 0.1277753f_{420})] \\
\bar{S}_{33} &= S_{11} - 2S[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400})] \\
\bar{S}_{12} &= S_{12} + S[0.2 + 4\pi^2(0.0404049f_{400} - 0.3380616f_{440})] \\
\bar{S}_{13} &= S_{12} + S[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} + 0.2555505f_{420})] \\
\bar{S}_{23} &= S_{12} + S[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} - 0.2555505f_{420})] \\
\bar{S}_{44} &= S_{44} + 4S[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} - 0.2555505f_{420})] \\
\bar{S}_{55} &= S_{44} + 4S[0.2 + 4\pi^2(-0.1616244f_{400} + 0.2555505f_{420})] \\
\bar{S}_{66} &= S_{44} + 4S[0.2 + 4\pi^2(0.0404049f_{400} - 0.3380616f_{440})]
\end{aligned} \tag{4.10}$$

donde S_{ij} son los módulos elásticos del monocristal y $S = S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44}$

Para calcular las componentes del tensor de módulos elásticos en la aproximación de Hill

$$S^H = \frac{\bar{S} + \bar{C}^{-1}}{2} \tag{4.11}$$

4.3.1 CALCULO DEL MODULO DE YOUNG EN EL PLANO DE UNA CHAPA

Una vez calculadas las componentes de los tensores \bar{C} y \bar{S} para la muestra ortotrópica el módulo de Young (E) para cualquier dirección se calcula a partir de la fórmula [34]

$$\begin{aligned}\bar{E}(l_1, l_2, l_3) &= [\bar{S}_{11}(l_1, l_2, l_3)]^{-1} \\ &= [l_1^4 \bar{S}_{11} + l_2^4 \bar{S}_{22} + l_3^4 \bar{S}_{33} + l_1^2 l_2^2 (2\bar{S}_{12} + \bar{S}_{66}) + l_1^2 l_3^2 (2\bar{S}_{13} + \bar{S}_{55}) + l_2^2 l_3^2 (2\bar{S}_{23} + \bar{S}_{44})]^{-1}\end{aligned}\quad (4.12)$$

donde l_1 , l_2 y l_3 son los cosenos directores de la dirección en la cual se calcula el módulo de Young y \bar{S}_{ij} son los dados por las ecuaciones (4.10) en la aproximación de Reuss, por $(\bar{C}_{ij})^{-1}$ en la de Voigt o por la ecuación (4.11) en la de Hill.

En particular, si interesa la variación de módulo de Young en el plano de una chapa, tomando $X_1|DL$, $X_2|DT$, $X_3|DN$, se obtiene $l_1 = \cos\alpha$, $l_2 = \sin\alpha$, $l_3 = 0$, siendo α el ángulo entre la dirección longitudinal de la chapa (DL) y la dirección en la que se calcula el módulo de Young

$$\bar{E}(\alpha) = [\bar{S}_{11}\cos^4\alpha + \bar{S}_{22}\sin^4\alpha + \frac{1}{2}(\bar{S}_{12} + \frac{1}{2}\bar{S}_{66})\sin^2 2\alpha]^{-1}\quad (4.13)$$

El módulo de Young puede también escribirse, usando Reuss en función de los coeficientes de la FDOC utilizando las fórmulas (3.23) y (3.24)

$$\begin{aligned}\bar{E}^R(\alpha) &= [\bar{S}_{11}(\alpha)]^{-1} \\ &= \{S_{11} - 2S [0.2 + 4\pi^2(-0.0606092f_{400} - 0.1690308f_{440}\cos 4\alpha + 0.1277753f_{420}\cos 2\alpha)]\}^{-1}\end{aligned}\quad (4.14)$$

esta ecuación es la misma que la (4.13), como se verifica si se reemplazan las expresiones

de \bar{S}_{11} , \bar{S}_{22} , \bar{S}_{12} y \bar{S}_{66} por las dadas en (4.10).

La expresión del módulo de Young en el plano de la chapa en función de los coeficientes de textura no tiene una expresión tan sencilla en la aproximación de Voigt, ya que una vez calculadas las expresiones de los \bar{C}_{ij} para calcular los \bar{S}_{ij}^V , es necesario resolver las ecuaciones [34]:

$$\bar{S}_{ij}^V \bar{C}_{jk} = \bar{C}_{ij} \bar{S}_{jk} = \delta_{ik},$$

donde δ_{ik} es la delta de Kronecker

Se obtienen las siguientes igualdades

$$\bar{S}_{11}^V = \frac{\bar{C}_{22} \bar{C}_{33} - \bar{C}_{23}^2}{\Delta}$$

$$\bar{S}_{22}^V = \frac{\bar{C}_{11} \bar{C}_{33} - \bar{C}_{13}^2}{\Delta}$$

$$\bar{S}_{12}^V = \frac{\bar{C}_{23} \bar{C}_{13} - \bar{C}_{12} \bar{C}_{33}}{\Delta} \quad (4.15)$$

$$\bar{S}_{66}^V = \frac{1}{\bar{C}_{66}}$$

$$\Delta = \bar{C}_{11} \bar{C}_{22} \bar{C}_{33} + 2 \bar{C}_{12} \bar{C}_{23} \bar{C}_{13} - \bar{C}_{13}^2 \bar{C}_{22} - \bar{C}_{23}^2 \bar{C}_{11} - \bar{C}_{12}^2 \bar{C}_{33}$$

que expresadas en función de los coeficientes de textura y reemplazadas en la ecuación (4.13) permiten calcular el módulo de Young en el plano de una chapa.

En algunos trabajos [45], [46] se utiliza una fórmula aproximada para este cálculo:

$$\bar{E}^V(\alpha) = \frac{(C_{11} + 2C_{12})[C_{11} - C_{12} - 3C\gamma_m(\alpha)]}{C_{11} + C_{12} - C\gamma_m(\alpha)} \quad (4.16)$$

donde $\gamma_m(\alpha)$ es el promedio, usando la FDOC, de la función:

$$\gamma = (l_1 l_2)^2 + (l_2 l_3)^2 + (l_1 l_3)^2 = (\alpha_{11} \alpha_{12})^2 + (\alpha_{12} \alpha_{13})^2 + (\alpha_{11} \alpha_{13})^2$$

l_i son los cosenos directores entre una dirección de la muestra y los ejes X_i^C fijos al cristal. Si la dirección de referencia de la muestra es el eje X_1^M , los l_i coinciden con la fila α_{1j} de la matriz de pasaje del sistema de coordenadas cristal al sistema de coordenadas muestra definida en (2.20). La expresión de $\gamma_m(\alpha)$ usada por Davies y colab. [45] toma entonces la forma:

$$\gamma_m(\alpha) = 0.2 + 4\pi^2(-0.0606092f_{400} - 0.1690308f_{440}\cos 4\alpha + 0.12377753f_{420}\cos 2\alpha)$$

La ecuación (4.16) puede ser utilizada para muestras poco texturadas, es decir cuando los términos que dependen de los f_{lmn} en las ecuaciones (4.9) son todos pequeños, en valor absoluto, frente a 0.2 (en un material isótropo todos los f_{lmn} son 0, excepto f_{000}). En este caso, utilizando

$$\bar{S}_{11}^V = \frac{\bar{C}_{11} + \bar{C}_{12}}{(\bar{C}_{11} - \bar{C}_{12})(\bar{C}_{11} + 2\bar{C}_{12})} \quad (4.17)$$

fórmula válida para policristales isótropos y suponiendo, en una primera aproximación, que en el promedio la dependencia con la textura esta dada para todas las componentes del tensor C por la función γ , se llega a la ecuación (4.16).

Una forma de chequear la validez de las fórmulas anteriores es comparar los resultados que se obtienen en casos límites:

a) policristal isótropo

En este caso todos los coeficientes de la FDOC son nulos, salvo $f_{000} = \frac{\sqrt{2}}{8\pi^2}$, y el

módulo de Young a partir de la fórmula (4.14) para Reuss, y (4.15) o (4.16) para Voigt, dan los resultados clásicos [44]

$$E_{\text{isotr.}}^R = \frac{1}{S_{11} - 0.4S} \quad (4.18)$$

$$E_{\text{isotr.}}^V = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} - 0.6C)}{C_{11} + C_{12} - 0.2C} \quad (4.19)$$

b) monocristal cúbico con una orientación que presenta simetría ortotrópica

En este caso límite todos los cristales tienen la misma orientación: la del monocristal. Los coeficientes de textura fueron calculados por Morris [29] reemplazando en la ecuación (1.5) la función continua $F(g)$ por una función delta de Dirac con valores distintos de cero en todas las orientaciones (hkl) $[uvw]$ equivalentes. Las fórmulas (4.13) y (4.15) dan resultados exactos y coincidentes en este caso, ya que al ser un monocristal, en la ecuación (2.9) la propiedad que se quiere promediar no varía con la posición. El uso de la ecuación aproximada (4.16), en cambio conduce a resultados erróneos.

4.3.2 SIGNIFICADO FISICO DE LOS COEFICIENTES DE TEXTURA

Si bien los coeficientes del desarrollo en serie de la FDOC, son definidos en forma puramente matemática, no teniendo en sí ningún significado físico, es interesante analizar su conexión con la anisotropía elástica.

Si se expresa el módulo de Young en la aproximación de Hill utilizando la fórmula (4.14) y la fórmula aproximada (4.16) (texturas poco pronunciadas) se obtienen en primera

aproximación una dependencia lineal entre $\bar{E}^H(\alpha)$ y $\gamma_n(\alpha)$. Un valor medio de E en el plano de la chapa, E^1 , se puede entonces escribir como

$$E^1 = \frac{1}{4} [\bar{E}^H(0^\circ) + 2\bar{E}^H(45^\circ) + \bar{E}^H(90^\circ)] \approx \frac{A + B(0.2 - 4\pi^2 \cdot 0.0606092f_{400})}{D} \quad (4.20)$$

donde A, B y D son constantes que dependen de los módulos elásticos del monocristal.

La representación gráfica de E^1 vs. f_{400} es una recta cuya ordenada-al origen es el valor de E^1 correspondiente a una muestra isótropa en la aproximación de Hill. El valor del coeficiente de textura f_{400} es el que fija entonces el valor medio del módulo de Young en el plano de la chapa. Valores positivos de f_{400} implican un valor de E^1 menor que el correspondiente a una chapa isótropa y viceversa, valores negativos de f_{400} se traducen en un módulo promedio mayor.

De la misma forma se definen dos expresiones que ponen de manifiesto la anisotropía elástica en el plano de la chapa

$$E^2 = \frac{1}{2} [\bar{E}^H(90^\circ) - \bar{E}^H(0^\circ)] \approx -\frac{B}{D} 4\pi^2 0.1277753f_{420} \quad (4.21)$$

$$E^3 = \frac{1}{4} [\bar{E}^H(0^\circ) - 2\bar{E}^H(45^\circ) + \bar{E}^H(90^\circ)] \approx -\frac{B}{D} (4\pi^2 0.1690308f_{440}) \quad (4.22)$$

El valor numérico y el signo de los coeficiente f_{420} y f_{440} están vinculados en forma directa con la anisotropía del módulo de Young en el plano de la chapa.

4.3.3 CALCULO DEL MODULO DE YOUNG EN ALAMBRES CON SIMETRIA DE REVOLUCION

En el caso particular en que la muestra presente, desde el punto de vista de la

textura, un eje con simetría de revolución, como sucede en alambres trefilados, se simplifica la relación entre el módulo de Young y los coeficientes de textura. Tomando el eje de revolución como eje X_3 de la muestra y los ejes X_1 y X_2 en el plano perpendicular al mismo, la simetría de la muestra impone que el único coeficiente de textura no nulo hasta el orden $l=4$ sea f_{400} . El módulo de Young en la dirección del eje del alambre tiene las siguientes expresiones en función del coeficiente de textura

$$\frac{1}{E^R} = S_{11} - 0.4S + 8\pi^2 S 0.1616244f_{400} \quad (4.23)$$

$$\frac{1}{E^V} = \frac{(C_{11} + C_{12} - 0.2C) + 4\pi^2 C 0.1616244f_{400}}{C_{11}(C_{11} + C_{12} - 0.6C) - 2C_{12}(0.6C + C_{12}) + 12\pi^2 C(C_{11} + 2C_{12})0.1616244f_{400}} \quad (4.24)$$

Estas ecuaciones pueden invertirse y midiendo el valor del módulo de Young, calcular el valor del coeficiente de textura f_{400} , que evidentemente dependerá de cual de las dos aproximaciones se utilice.

El rango de validez de estas ecuaciones esta dado por los valores límites del módulo de Young en el monocristal. Para cristales cúbicos con $S = S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44} > 0$ (la mayoría), el mínimo valor de E corresponde a la dirección $\langle 100 \rangle$ y el máximo a la dirección $\langle 111 \rangle$, por lo tanto los valores límites para f_{400} resultan

$$\frac{1}{E_{\langle 100 \rangle}^R} = \frac{1}{E_{\langle 100 \rangle}^V} = S_{11} \rightarrow f_{400} = 0.0313446 \quad (4.25)$$

$$\frac{1}{E_{\langle 111 \rangle}^R} = \frac{1}{E_{\langle 111 \rangle}^V} = S_{11} - \frac{2}{3}S \rightarrow f_{400} = -0.020896 \quad (4.26)$$

Esta expresiones son válidas para cualquier material de estructura cristalina cúbica, en forma independiente del valor de las constantes elásticas del mismo.

En los metales en que $S < 0$ los valores límites de f_{400} son los mismos, pero en este caso el valor máximo del módulo de Young corresponde a la dirección $\langle 100 \rangle$ y el mínimo a la dirección $\langle 111 \rangle$.

En las ecuaciones (4.25) y (4.26) se ve que para las direcciones $\langle 100 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$ las dos aproximaciones límites coinciden. Esto es una consecuencia de que ambas direcciones son ejes de simetría de revolución para las constantes elásticas que podrían generar incompatibilidades en los bordes de grano. En forma más explícita, si particularizamos la ecuación general (2.9) para el problema que estamos analizando:

$$\bar{\epsilon} = \left[\bar{S} + \frac{1}{V} \int_V \Delta S(\bar{r}) \cdot U(\bar{r}) dV \right] \cdot \bar{\sigma} = \bar{S}^{\bar{\sigma}} \quad (4.27)$$

$$\bar{S}_{3333}^{\bar{\sigma}} = \bar{S}_{3333} + \frac{1}{V} \int_V \Delta S_{3333}(\bar{r}) U_{3333}(\bar{r}) dV \quad (4.28)$$

Para las dos fibras ideales $\langle 100 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$ se verifica que:

$$\Delta S_{3333}(\bar{r}) = \Delta C_{3333}(\bar{r}) = 0 \quad (4.29)$$

resultando entonces:

$$\bar{S}_{3333}^{\bar{\sigma}} = \bar{S}_{3333}^R = S_{3333}^C = \frac{1}{E}$$

donde $S_{\mu\nu}^C$ son los módulos elásticos en el sistema cristal.

Por otra parte, teniendo en cuenta la simetría de la muestra, es válida la relación:

$$\frac{1}{E^V} = \bar{S}_{3333}^V = \frac{\bar{C}_{1111} + \bar{C}_{1122}}{\bar{C}_{3333}(\bar{C}_{1111} + \bar{C}_{1122}) - 2\bar{C}_{1133}^2} \quad (4.30)$$

Para ambas fibras se cumple que:

$$\begin{aligned}
 \bar{C}_{1111} + \bar{C}_{1122} &= C_{1111}^C + C_{1122}^C \\
 \bar{C}_{3333} &= C_{3333}^C \\
 \bar{C}_{1133} &= C_{1133}^C
 \end{aligned}
 \tag{4.31}$$

Reemplazando estas igualdades en la ec.(4.30) se llega a:

$$\frac{1}{E^V} = \bar{S}_{3333}^V = S_{3333}^C = \bar{S}_{3333}^R$$

La coincidencia de las dos aproximaciones (Voigt - Reuss), consecuencia de las simetrías de los cristales cúbicos, solo se verifica en los promedios de los módulos o constantes elásticas de la forma $S_{33\mu}$ y $C_{33\mu}$.

4.3.4 APLICACIONES A CHAPAS DE COBRE Y ACEROS

Se aplicaron los desarrollos anteriores a distintos materiales de estructura cristalina cúbica:

- acero calmado al Al en distintos estados metalúrgicos:
 - a) chapa laminada
 - b) chapa a) más un laminado en frío adicional del 50%
 - c) chapa a) más un recocido industrial a una temperatura del orden de 700°C
- acero inoxidable ferrítico AISI 409
- cobre de pureza comercial

Las composiciones químicas de los aceros se detallan en la tabla IV.1

TABLA IV.1

Composición química de los aceros calmado al Al e inoxidable

AISI 409

Elemento	C	S	Al	Mn	Si	P	Cr	Ti
Acero calmado al Al % en peso	0.06	0.022	0.06	1.54	0.03	0.005		
Acero inoxidable % en peso	0.03	0.004	0.03		0.68		11.5	0.4

Se calcularon los coeficientes de textura de las muestras a partir de las figuras de polos experimentales {200} y {110} en los aceros y {111} y {200} en el cobre. Se utilizó la técnica en reflexión - transmisión (Cap. I). En la tabla IV.2 figuran los coeficientes hasta el orden $l=4$

TABLA IV.2

Coeficientes de textura determinados a partir de las figuras de polos

Material	f_{400}	f_{420}	f_{440}
Calmado (a)	-0.00078352	-0.00126730	-0.00027342
Calmado (b)	-0.00320550	-0.00138950	-0.00200400
Calmado (c)	-0.00743600	-0.00022341	0.00154180
Inoxidable	-0.00491060	-0.00379960	-0.00092615
Cobre	-0.00030290	-0.00207690	-0.00090925

Las mediciones de módulo de Young se efectuaron en muestras de 10cm de largo por 0.5cm de ancho, cortadas de forma tal que la dirección longitudinal de la muestra (la de mayor longitud) formara distintos ángulos (ángulo de corte: α) respecto de la dirección de laminación de la chapa. El espesor de la chapa original de acero calmado era de $\approx 2\text{mm}$, el de la chapa de acero inoxidable de $\approx 0.5\text{mm}$ y el de la chapa de cobre de $\approx 0.5\text{mm}$. Se utilizó un método dinámico, midiendo la frecuencia de resonancia de ondas flexurales con condiciones de contorno "libre - libre". La descripción del equipo utilizado y la teoría correspondiente a este tipo de vibraciones se detallan en el Apéndice III. Los valores de densidad utilizados en el cálculo del módulo de Young para cada material son los siguientes:

acero calmado	$\rho = 7.87 \text{ gr/cm}^3$
acero inoxidable	$\rho = 7.75 \text{ gr/cm}^3$
cobre	$\rho = 8.96 \text{ gr/cm}^3$

En la tabla IV.3 se dan los valores de módulo de Young medidos experimentalmente para las distintas muestras. Cada valor corresponde al promedio de por lo menos tres muestras distintas cortadas en la misma dirección de la chapa.

En las figuras IV.1, IV.2, IV.3, IV.4 y IV.5 se representan en función del ángulo α (ángulo entre la dirección de medida y la dirección de laminación DL) los valores experimentales del módulo de Young y los calculados con la ecuación (4.13) utilizando las tres aproximaciones (Voigt - Reuss - Hill). El error experimental en los valores de módulo de Young no está graficado, por ser muy pequeño en la escala del gráfico.

TABLA IV.3

Módulo de Young en función del ángulo α con la dirección de laminado

	Acero Calmado (a)	Acero Calmado (b)	Acero Calmado (c)	Acero Inoxidable AISI 409	Cobre
$\alpha(^{\circ})$	E (10^5 MPa)				
0	2.16 ± 0.02	2.29 ± 0.02	2.17 ± 0.02	2.22 ± 0.02	1.26 ± 0.01
10					1.27 ± 0.01
15	2.14 ± 0.02	2.22 ± 0.02	2.17 ± 0.02	2.22 ± 0.02	
20					1.26 ± 0.01
30	2.11 ± 0.02	2.11 ± 0.02	2.22 ± 0.02	2.18 ± 0.02	1.25 ± 0.01
40					1.24 ± 0.01
45	2.10 ± 0.02	2.07 ± 0.02	2.24 ± 0.02	2.19 ± 0.02	1.26 ± 0.01
50					1.26 ± 0.01
60	2.13 ± 0.02	2.13 ± 0.02	2.22 ± 0.02	2.26 ± 0.02	1.27 ± 0.01
70					1.30 ± 0.01
75	2.19 ± 0.02	2.24 ± 0.02	2.18 ± 0.02	2.36 ± 0.02	
80					1.33 ± 0.01
90	2.19 ± 0.02	2.35 ± 0.02	2.15 ± 0.02	2.43 ± 0.02	1.33 ± 0.01

Para el acero calmado al Al se tomaron los valores de módulos elásticos del monocristal de Fe dadas por Barrett [47]

$$S_{11} = 0.757 \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

$$S_{12} = -0.282 \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

$$S_{44} = 0.862 \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

Con estos datos los valores de módulo de Young para una muestra isótropa son:

$$E^R = 1.946 \times 10^5 \text{ MPa}$$

$$E^V = 2.275 \times 10^5 \text{ MPa}$$

$$E^H = 2.098 \times 10^5 \text{ MPa}$$

Los valores correspondientes al Cu fueron tomados de Nye [34]

$$S_{11} = 1.49 \times 10^{-5} \text{ MPa}$$

$$S_{12} = -0.63 \times 10^{-5} \text{ MPa}$$

$$S_{44} = 1.33 \times 10^{-5} \text{ MPa}$$

El módulo de Young para una muestra isótropa tiene los siguientes valores:

$$E^R = 1.101 \times 10^5 \text{ MPa}$$

$$E^V = 1.454 \times 10^5 \text{ MPa}$$

$$E^H = 1.253 \times 10^5 \text{ MPa}$$

En el caso del acero inoxidable no se encontraron en la literatura los valores de los módulos elásticos del monocristal con esa composición. En las figuras IV.5 y IV.6 se ve que las curvas trazadas tomando los valores de constantes elásticas del monocristal de Fe y las dadas por Masumoto y Kikuchi [48] para monocristales de Fe-19.43%Cr no ajustan con los valores medidos de módulo de Young.

Dado que la forma de las curvas provenientes de las tres aproximaciones (Voigt - Reuss - Hill) es prácticamente la misma, utilizando la aproximación de Reuss, que es matemáticamente más manejable, se calcularon con un programa de regresión no lineal los

dos parámetros S_{11} y S que mejor ajustan los puntos experimentales, obteniéndose

$$S_{11} = (0.73 \pm 0.04) \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

$$2S = (1.20 \pm 0.17) \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

Se observa en la figura IV.7 que una pequeña variación en los módulo elásticos respecto de los valores del Fe (3.7% en S_{11} y 1.3% en S) produce un aumento del orden del 5% en los valores de E , pero es muy pequeño el cambio en la forma de la curva.

A partir solo de mediciones de módulo de Young, no es posible calcular las tres constantes elásticas del monocristal de Fe. Como puede verse en la ecuación (4.14), el módulo de Young depende de S_{11} y de S , que es una combinación lineal de las tres constantes. Sería necesario medir también el módulo de corte $G = 1/\bar{S}_{44}$ en distintas direcciones para determinar S_{44} y despejar S_{12} de la formula de S .

FIGURA IV.1

E vs α . Acero Calmado (a)

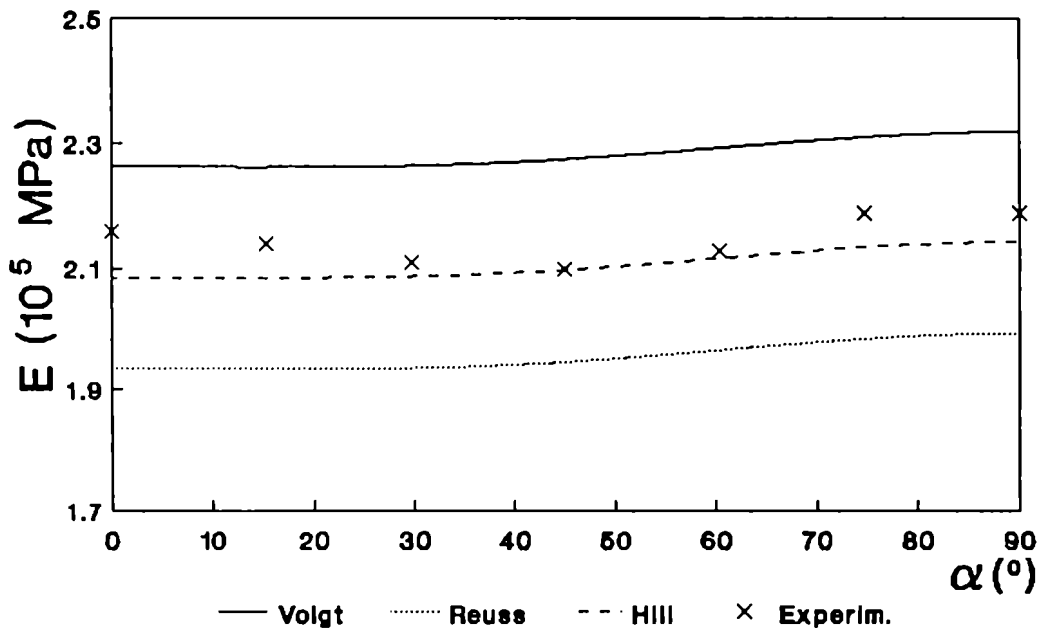


FIGURA IV.2

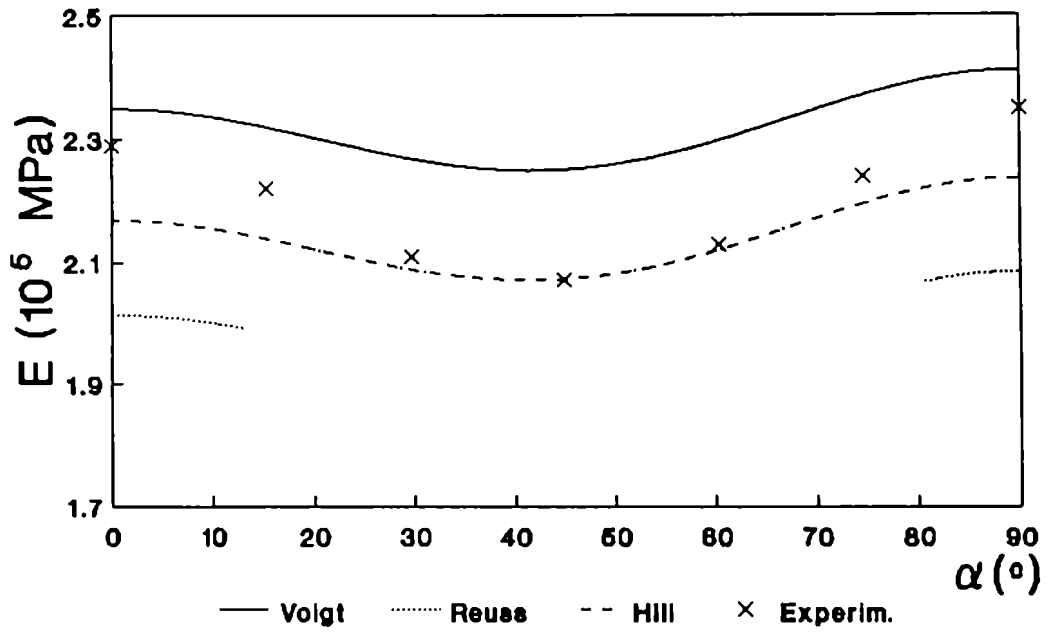
E vs α . Acero Calmado (b)

FIGURA IV.3

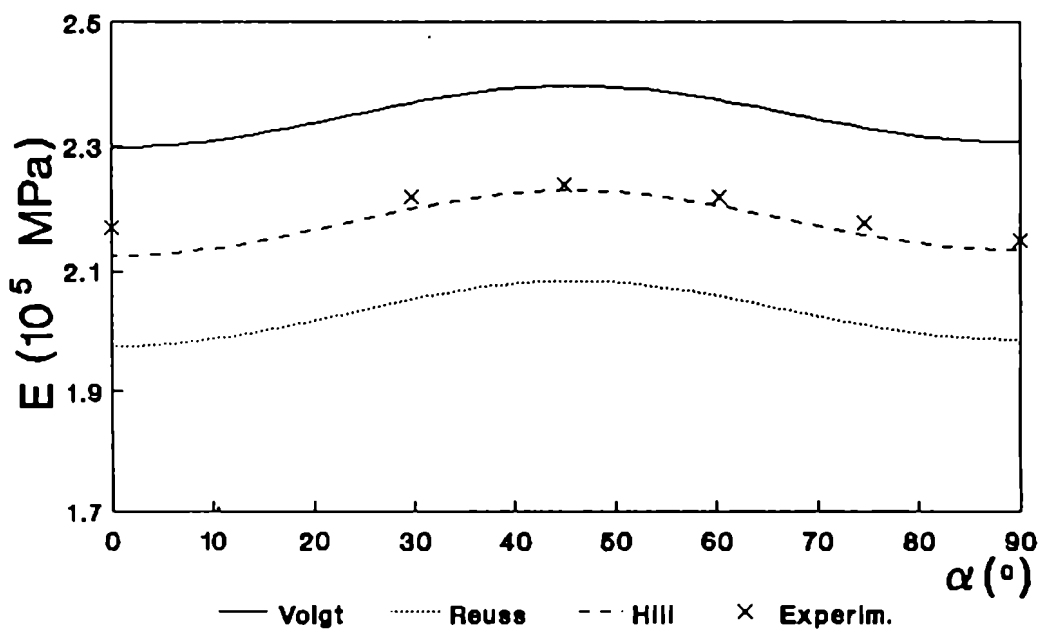
E vs α . Acero Calmado (c)

FIGURA IV.4

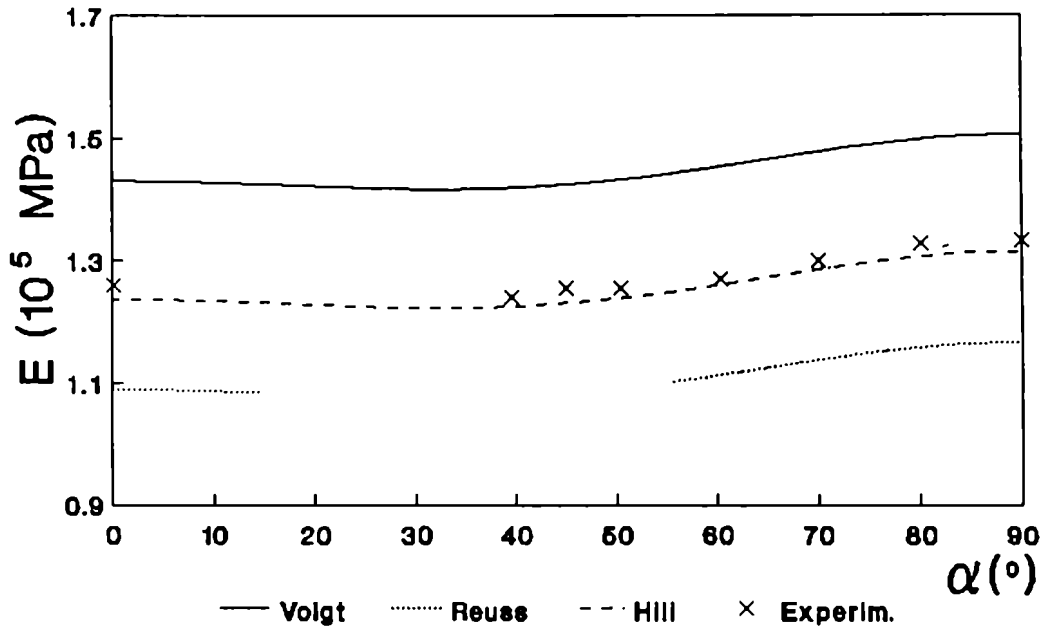
E vs α . Cobre

FIGURA IV.5

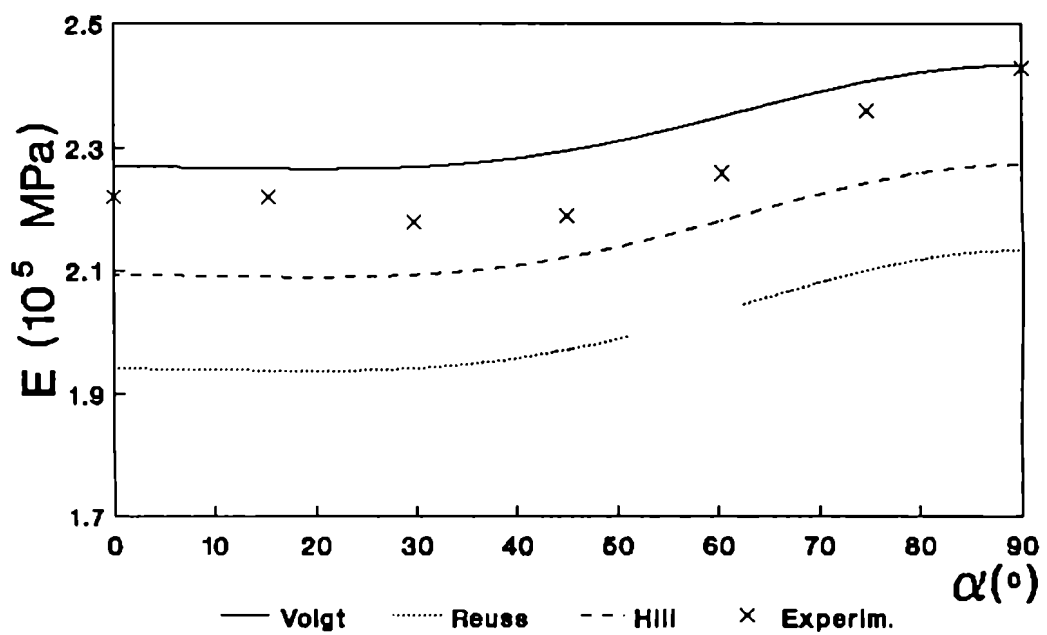
E vs α . Acero Inoxidable. (Ctes elást. del monocristal de Fe)

FIGURA IV.6

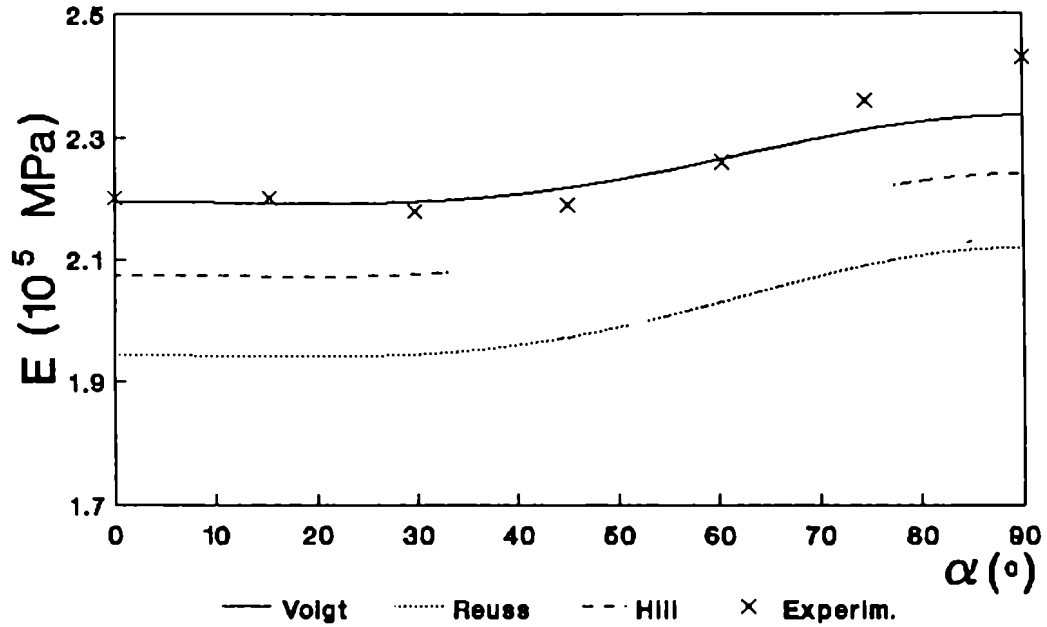
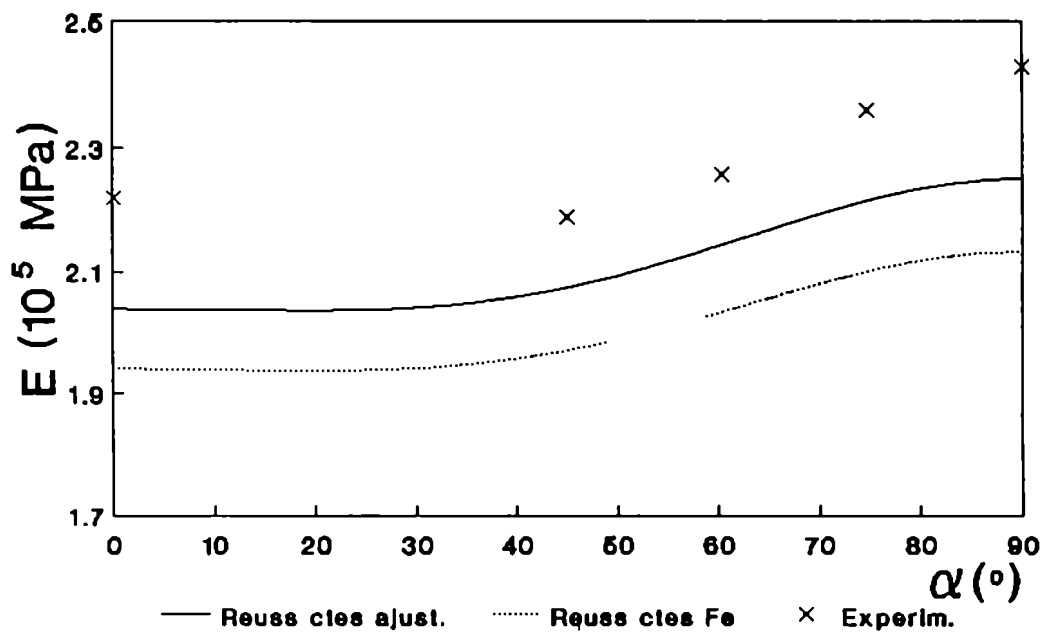
E vs α . Acero Inoxidable. (Ctes elást. Masumoto y colab. [48])

FIGURA IV.7

E vs α . Acero Inoxidable. Aproximación de Reuss, usando las ctes. elást. del Fe y las calculadas por ajuste de los puntos experimentales.

En las aceros calmados el ajuste de los valores medidos del módulo de Young con las curvas calculadas a partir de las mediciones de textura es particularmente bueno en el caso (c) correspondiente al material recocido. El mayor apartamiento se observa para el material que fue sometido a una deformación mayor. Esto está poniendo de manifiesto la influencia, no tomada en cuenta en el modelo, de la microestructura: imperfecciones de la red, presencia de tensiones internas, etc. Para el acero inoxidable, al no conocerse con precisión los valores de las constantes elásticas del monocristal con esa composición, no pueden compararse valores calculados y experimentales. Puede señalarse que variaciones relativamente pequeñas en las constantes elásticas del monocristal introducen cambios significativos en el valor calculado del módulo de Young del policristal. Por otra parte, mediciones adicionales del módulo de corte G , permitirían determinar con bastante precisión las constantes elásticas "aparentes" del monocristal con esa composición.

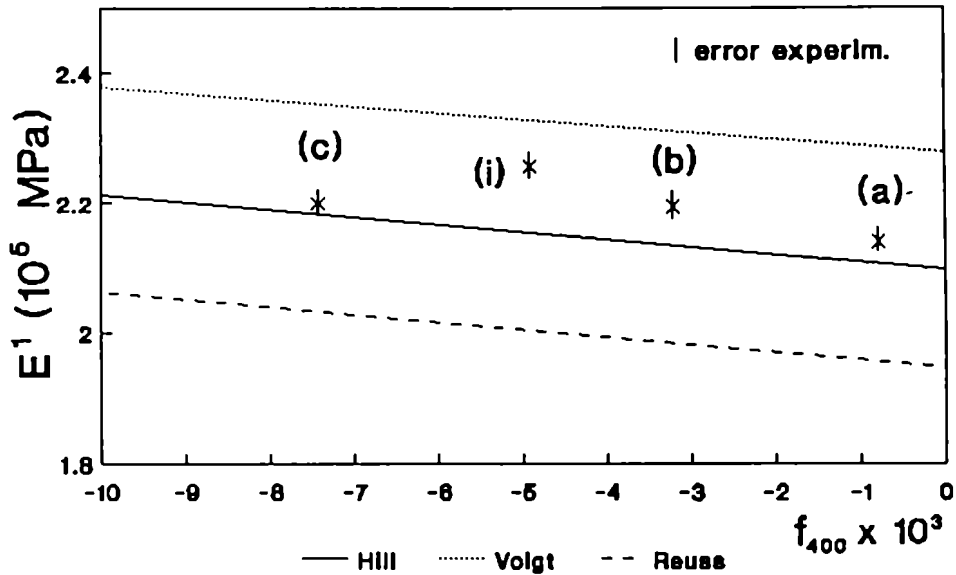
En el Cu, cuya textura indica que el material está parcialmente recristalizado [28], se observa una buena concordancia, como en el caso del acero calmado (c).

Con el objeto de comprobar la validez de las fórmulas deducidas en 4.3.2, que relacionan los coeficientes de textura con parámetros que caracterizan la anisotropía elástica en chapas texturadas, se graficaron en las figuras IV.8, IV.9 y IV.10 las ecuaciones (4.20), (4.21) y (4.22) para las constantes del Fe y los puntos experimentales correspondientes a las tres muestras de acero calmado y al acero inoxidable.

En la figura IV.8 se grafican también los valores de E^1 calculados usando las aproximaciones de Reuss y Voigt, para poder comparar el apartamiento de los puntos experimentales respecto de la aproximación de Hill con las dos aproximaciones límites. Los parámetros E^2 y E^3 , por la forma en que están definidos como diferencias de valores de módulo de Young, no son sensibles a la aproximación que se utilice, obteniéndose valores

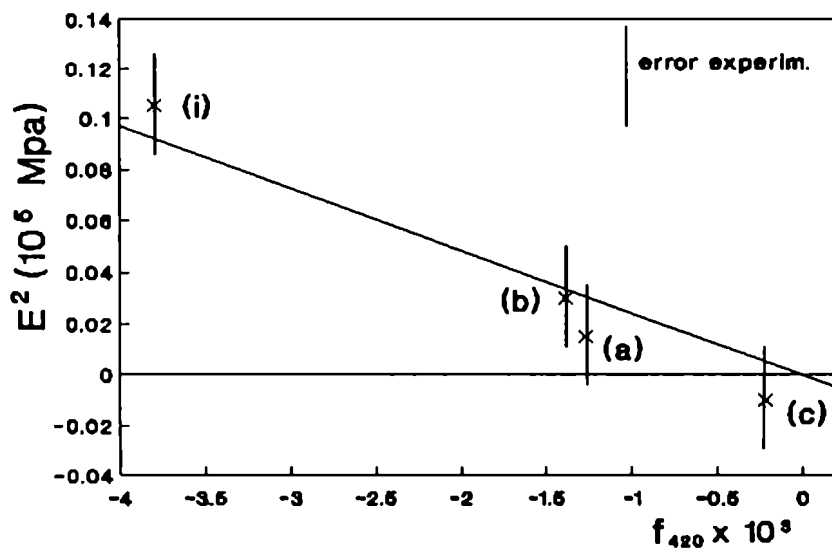
coincidentes para las tres aproximaciones.

FIGURA IV.8
E¹ en función de f₄₀₀



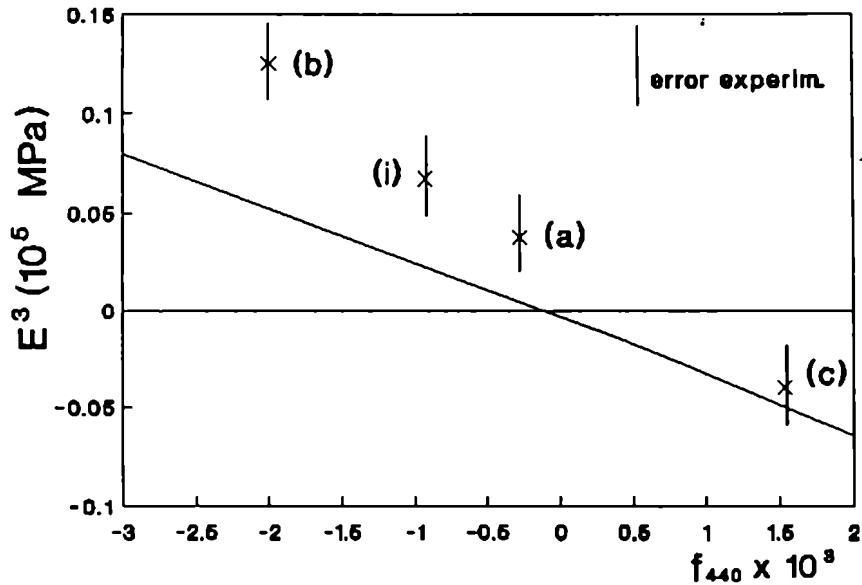
(a), (b), (c) aceros calmados (a), (b) y (c) respectivamente
(i) acero inoxidable

FIGURA IV.9
E² en función de f₄₂₀



(a), (b), (c) aceros calmados (a), (b) y (c) respectivamente
(i) acero inoxidable

FIGURA IV.10
 E^3 en función de f_{440}



(a), (b), (c) aceros calmados (a), (b) y (c) respectivamente
 (i) acero inoxidable

En el caso de E^1 , que representa el valor promedio del módulo de Young en el plano de la chapa, hay un buen ajuste de la relación entre el coeficiente de textura f_{400} y los valores medidos de módulo para el acero calmado. El valor correspondiente al acero inoxidable muestra un apartamiento mayor, como ya fue observado, debido a la variación de las constantes elásticas por la presencia del Cr. Haciendo un ajuste por cuadrados mínimos de los tres puntos correspondientes al acero calmado se obtienen una ordenada al origen (valor correspondiente al módulo de Young de una muestra isótropa) de $(2.15 \pm 0.03) \times 10^5$ MPa frente a 2.10×10^5 MPa que es el valor correspondiente a la aproximación de Hill y 2.082×10^5 MPa que es valor experimental del Fe no texturado reportado por Speich y colab. [49].

En la relación entre los coeficientes de textura f_{420} y f_{440} y la anisotropía en el plano de la chapa (E^2 y E^3) dada por las tres aproximaciones (Voigt - Reuss - Hill) el apartamiento de los valores experimentales respecto de la curva teórica está poniendo de manifiesto las limitaciones de las aproximaciones utilizadas, fundamentalmente el efecto de haber despreciado las interacciones entre granos y la existencia de microtensiones en el material. En efecto, analizando, como se hizo anteriormente la aproximación de Reuss que es la más sencilla desde el punto de vista matemático, en el caso del acero calmado (b), que es el que presenta una mayor diferencia entre los valores medidos y los predichos por la aproximación de Hill, se calcularon las constantes S_{11} y S que mejor ajustan los puntos experimentales, obteniéndose

$$S_{11} = (0.88 \pm 0.06) \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

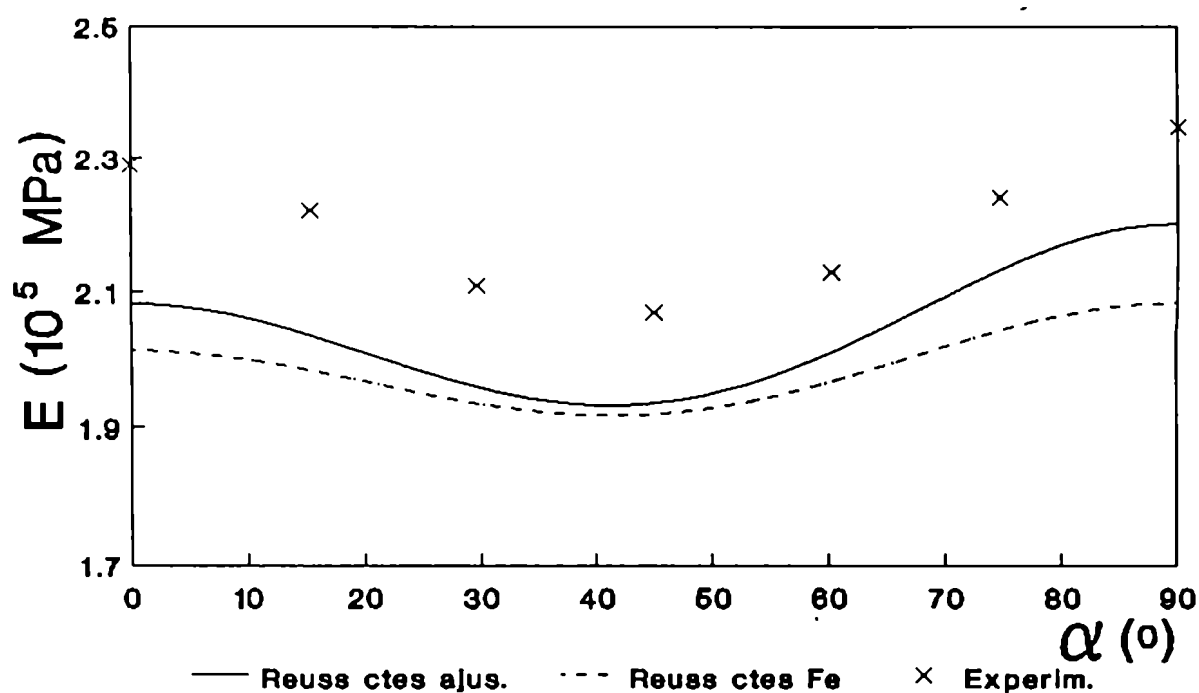
$$2S = (0.923 \pm 0.29) \times 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$$

En la figura IV.11 se grafican las curvas obtenidas con la aproximación de Reuss utilizando las constantes del Fe y las obtenidas por ajuste para el acero calmado (b).

Si bien es razonable pensar que en un material muy deformado, como el acero calmado (b), los módulos elásticos de los cristales individuales varían debido a la presencia de distintos defectos en la estructura cristalina, la variación de las constantes elásticas del monocristal necesaria para obtener un mejor ajuste de la curva teórica, manteniendo la hipótesis de no interacción entre granos, con los valores medidos de módulo de Young, es demasiado grande (15% en S_{11} y 50% en S) como para pensar que esta sea la causa preponderante de la discrepancia entre los valores experimentales y los calculados.

FIGURA IV.11

E vs α . Acero calmado (b). Aproximación de Reuss, usando las ctes. elást. del Fe y las calculadas por ajuste de los puntos experimentales.



4.3.5 APLICACIONES A ALAMBRES DE COBRE TREFILADOS

Se estudió una serie de alambres de distintos diámetros, trefilados a partir de una barra de 0.591cm de radio original obtenida por colada continua, con un contenido de impurezas de 12ppm de oxígeno y 20ppm de azufre. En la tabla IV.4 figuran los radios, la deformación $\epsilon = \ln \frac{A_0}{A}$ y el módulo de Young, en la dirección del eje del alambre, determinado experimentalmente (ver Apéndice III) de cada muestra.

TABLA IV.4

Características de la muestras de alambres trefilados

Muestra	A ₁	A ₁ [*]	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆
Radio(cm)	0.3259	0.3259	0.2900	0.2050	0.1440	0.1025	0.0570
Deformación	1.19		1.41	2.108	2.817	3.497	4.658
Módulo de Young (GPa)	128.4 ±0.3	123.8 ±0.3	129.9 ±0.3	134.8 ±0.3	138.8 ±0.4	138.7 ±0.4	130.2 ±0.8

La muestra A₁ fue sometida a un recocido de recristalización de 30 min. a 500°C, figurando en la tabla como A₁^{*}.

En la tabla IV.5 figuran los coeficientes de textura determinados experimentalmente a partir de las figuras de polos {200} y {111}, referidos al sistema de coordenadas en los que se midió la textura (Figura I.10 del Cap. I).

TABLA IV.5

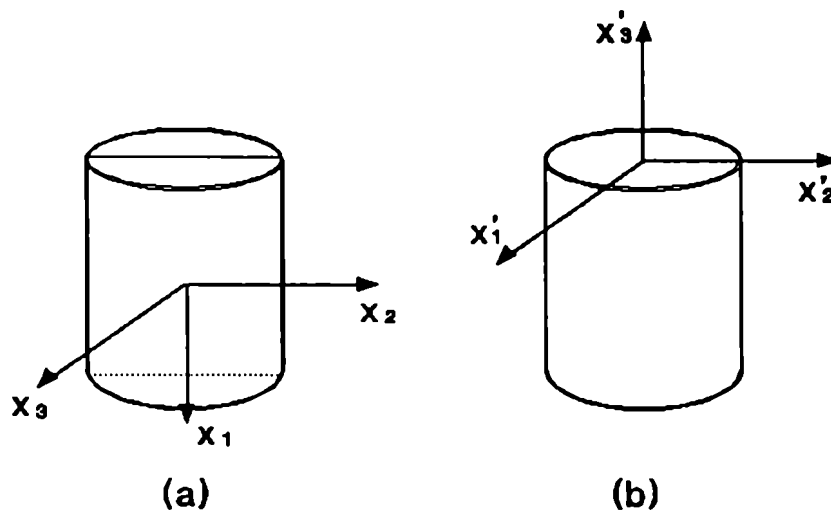
Coeficientes de textura hasta el orden l=4 de las muestras de alambres de Cu

Muestra	f ₄₀₀	f ₄₂₀	f ₄₄₀
A ₁ [*]	-0.0001933	-0.00026425	0.000056163
A ₂	-0.0018642	0.0017036	-0.0021161
A ₄	-0.0027019	0.0020688	-0.0023681
A ₅	-0.0028880	0.0024996	-0.0019326
A ₆	-0.0008721	0.0012203	-0.0024704

Los coeficientes de textura que se utilizaron en 4.3.3 para calcular el módulo de Young promedio en la dirección del eje del alambre están referidos a un sistema de coordenadas rotado respecto del que se midió la textura: en el cálculo de los promedios se tomo el eje X_3 coincidente con la dirección axial de los alambres, mientras que para la determinación de los coeficientes de textura el eje X_3 se consideró paralelo a la dirección radial de los mismos (Fig. IV.12).

FIGURA IV.12

Sistemas de coordenadas en el que se midió la textura (a) y en el que se calculó el módulo de Young promedio (b)



Los coeficientes de textura referidos a los ejes X'_1, X'_2, X'_3 , utilizados en el cálculo de los promedios, se calculan usando las ecuaciones (3.23) y (3.24) tomando

$$\alpha = \omega = 0$$

$$\beta = \pi/2$$

En la tabla IV.6 figuran los coeficientes de textura referidos a este sistema de coordenadas.

TABLA IV.6

Coeficientes de textura hasta el orden $l=4$ de las muestras de alambres de Cu referidos al sistema X'_1, X'_2, X'_3

Muestra	f'_{400}	f'_{420}	f'_{440}
A_1^*	0.0001951	-0.0000185	-0.000258
A_2	-0.0042589	-0.000189	-0.000180
A_4	-0.0051253	0.0005361	-0.000423
A_5	-0.0038753	0.0011130	-0.000199
A_6	-0.0052516	-0.000679	-0.000007

En la tabla IV.6 se observa que los coeficientes f'_{420} y f'_{440} , aunque un orden de magnitud menores que los correspondientes al primer sistema de coordenadas (donde no existe simetría de revolución alrededor del eje X_3), son distintos de cero. Esto se debe a lo ya mencionado en el Cap. I al hacer el análisis de la textura de los alambres: existe un pequeño efecto de cilinderización, y por lo tanto los planos cristalinos no están orientados totalmente al azar alrededor de la dirección axial del alambre. Siendo este efecto muy pequeño, no se lo tuvo en cuenta, utilizándose las ecuaciones (4.23) y (4.24), que suponen una simetría de rotación perfecta.

En la figura IV.13 se grafican las ecuaciones (4.23) y (4.24) usando las constantes elásticas de Cu dadas por Nye [34], y algunos puntos experimentales. En la figura IV.14 se muestran todos los puntos experimentales. Contrariamente a lo supuesto generalmente [50], los valores experimentales se acercan a las predicciones de la aproximación de Hill a pesar de que la forma muy alargada de los granos (ver Fig IV.15, IV.16 y IV.17) indicaría que la aproximación de Voigt sería la más indicada para las muestras trefiladas.

FIGURA IV.13

1/E vs f_{400} . Alambres de Cu

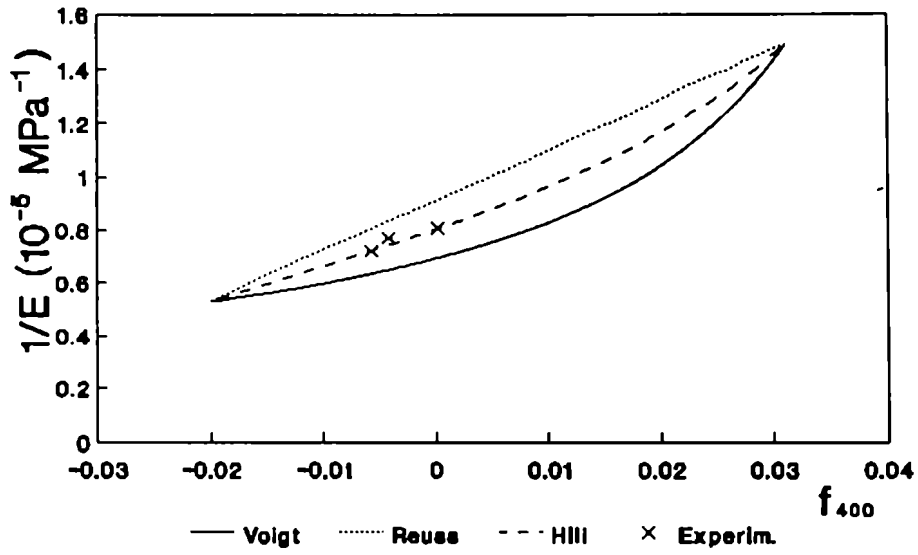


FIGURA IV.14

1/E vs f_{400} . Alambres de Cu

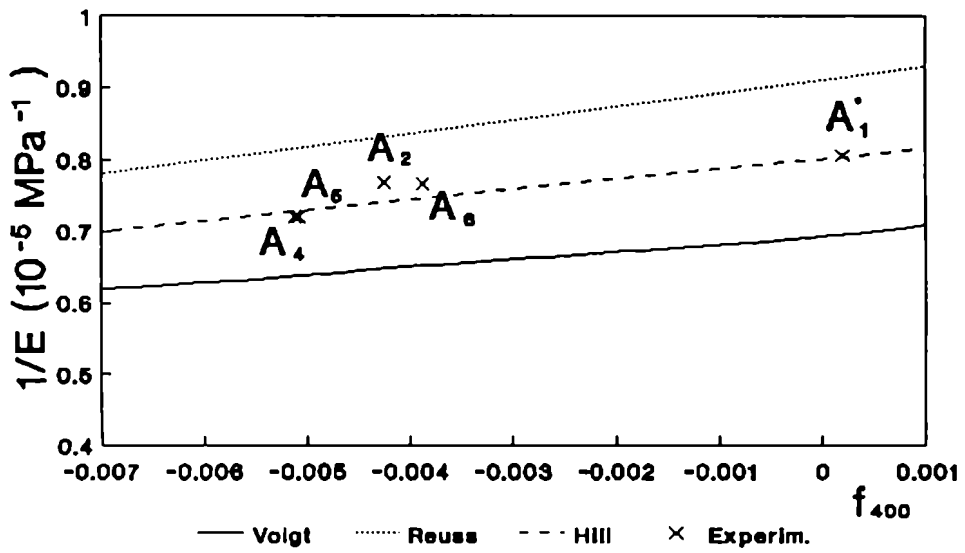


FIGURA IV.15

Micrografía óptica de la muestra de Cu trefilado A₂
($r=0.2900\text{cm}$). 50x



FIGURA IV.16

Micrografía óptica de la muestra de Cu trefilado A₅
($r=0.1025\text{cm}$). 500x

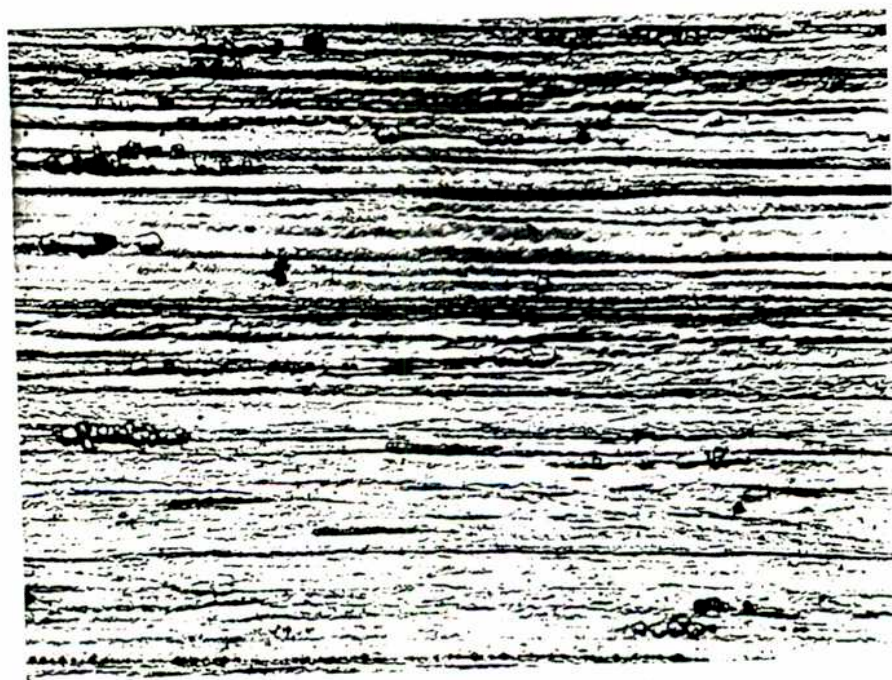


FIGURA IV.17

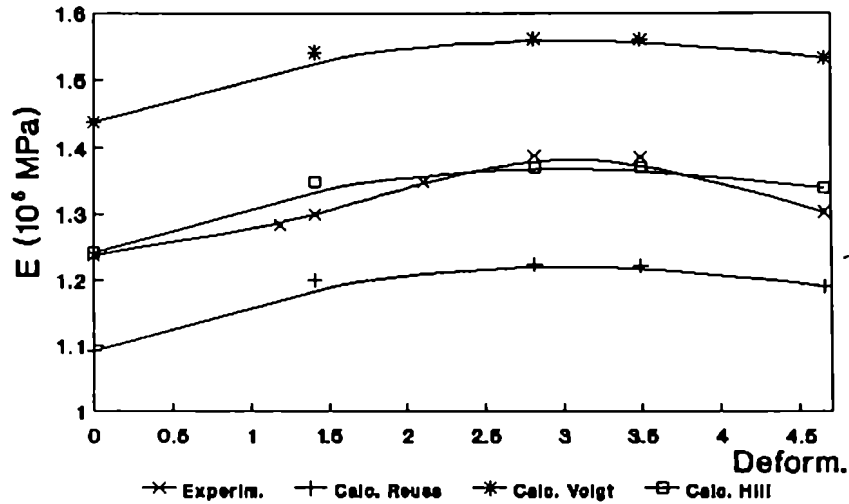
Micrografía óptica de la muestra de Cu recristalizado A_1^*
($r=0.3259\text{cm}$). 500x



Un análisis cualitativo de los resultados muestra que el módulo de Young de los alambres trefilados crece con la deformación hasta llegar a un máximo alrededor de una deformación de 3 y luego disminuye para una deformación mayor. Sabiendo por las figuras de polos que la textura de los alambres es una textura de fibra formada por una componente $\langle 111 \rangle$ mayoritaria y otra $\langle 100 \rangle$ de menor peso, el crecimiento del módulo de Young esta evidentemente asociado con un crecimiento de la componente de textura $\langle 111 \rangle$ en detrimento de la componente $\langle 100 \rangle$, hasta llegar a una saturación. Esta correlación es corroborada por los resultados experimentales de textura. En la figura IV.18 se grafica el módulo de Young medido experimentalmente y el calculado, utilizando el coeficiente de textura f_{400} obtenido a partir de las figuras de polos, en función de la deformación de cada alambre.

FIGURA IV.18

E vs Deformación. Alambres de Cu



El acuerdo entre los valores de módulo obtenidos por el método directo y el indirecto, a través de la textura, es muy bueno. La microestructura del material, para la textura que presentan los alambres, no parece tener mucha influencia sobre el comportamiento elástico del policristal. La aproximación de Hill, no obstante la forma muy alargada de los granos, es la que mejor ajusta los puntos experimentales.

4.4 POLICRISTALES CON ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL

Las expresiones que se obtienen para las constantes elásticas promedio en el caso de materiales policristalinos hexagonales y simetría ortotrópica de la muestra son las siguientes:

$$\begin{aligned} \bar{C}_{11} = & C_{11} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 [a_1 f_{200} - a_2 f_{220} + a_3 f_{400} - a_4 f_{420} + a_5 f_{440}] \right\} + \\ & (C_{13} + 2C_{44}) \left\{ \frac{4}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{4} a_1 f_{200} + \frac{1}{4} a_2 f_{220} - \frac{1}{2} a_3 f_{400} + \frac{1}{2} a_4 f_{420} - \frac{1}{2} a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & C_{33} \left\{ \frac{1}{5} + 4\pi^2 \left[-\frac{3}{4} a_1 f_{200} + \frac{3}{4} a_2 f_{220} + a_3 f_{400} - a_4 f_{420} + a_5 f_{440} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{22} = & C_{11} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 [a_1 f_{200} + a_2 f_{220} + a_3 f_{400} + a_4 f_{420} + a_5 f_{440}] \right\} + \\ & (C_{13} + 2C_{44}) \left\{ \frac{4}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{4} a_1 f_{200} - \frac{1}{4} a_2 f_{220} - \frac{1}{2} a_3 f_{400} - \frac{1}{2} a_4 f_{420} - \frac{1}{2} a_5 f_{440} \right] \right\} \\ & C_{33} \left\{ \frac{1}{5} + 4\pi^2 \left[-\frac{3}{4} a_1 f_{200} - \frac{3}{4} a_2 f_{220} + a_3 f_{400} + a_4 f_{420} + a_5 f_{440} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{33} = & C_{11} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[-2a_1 f_{200} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} \right] \right\} + \\ & (C_{13} + 2C_{44}) \left\{ \frac{4}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{2} a_1 f_{200} - \frac{8}{3} a_3 f_{400} \right] \right\} + \\ & C_{33} \left\{ \frac{1}{5} + 4\pi^2 \left[\frac{3}{2} a_1 f_{200} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} \right] \right\}\end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{23} = & (C_{11} + C_{33} - 4C_{44}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{8} a_1 f_{200} - \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} - a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{13} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{5}{8} a_1 f_{200} - \frac{5}{8} a_2 f_{220} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} + 2a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{12} \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 \left[-\frac{7}{8} a_1 f_{200} + \frac{7}{8} a_2 f_{220} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{13} = & (C_{11} + C_{33} - 4C_{44}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{8} a_1 f_{200} + \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} + a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{13} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{5}{8} a_1 f_{200} + \frac{5}{8} a_2 f_{220} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} - 2a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{12} \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 \left[-\frac{7}{8} a_1 f_{200} - \frac{7}{8} a_2 f_{220} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{12} = & (C_{11} + C_{33} - 4C_{44}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{4} a_1 f_{200} + \frac{1}{3} a_3 f_{400} - a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & C_{13} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{5}{4} a_1 f_{200} - \frac{2}{3} a_3 f_{400} + 2a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & C_{12} \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 \left[\frac{7}{4} a_1 f_{200} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{44} = & C_{11} \left\{ \frac{7}{30} + 4\pi^2 \left[-\frac{5}{16} a_1 f_{200} + \frac{5}{16} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} - a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & (C_{33} - 2C_{13}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{8} a_1 f_{200} - \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} - a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{44} \left\{ \frac{2}{5} + 4\pi^2 \left[\frac{3}{8} a_1 f_{200} - \frac{3}{8} a_2 f_{220} + \frac{16}{3} a_3 f_{400} + 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{12} \left\{ -\frac{1}{6} + 4\pi^2 \left[\frac{7}{16} a_1 f_{200} - \frac{7}{16} a_2 f_{220} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{55} = & C_{11} \left\{ \frac{7}{30} + 4\pi^2 \left[-\frac{5}{16} a_1 f_{200} - \frac{5}{16} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} + a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & (C_{33} - 2C_{13}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{8} a_1 f_{200} + \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} + a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{44} \left\{ \frac{2}{5} + 4\pi^2 \left[\frac{3}{8} a_1 f_{200} + \frac{3}{8} a_2 f_{220} + \frac{16}{3} a_3 f_{400} - 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & C_{12} \left\{ -\frac{1}{6} + 4\pi^2 \left[\frac{7}{16} a_1 f_{200} + \frac{7}{16} a_2 f_{220} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{C}_{66} = & C_{11} \left\{ \frac{7}{30} + 4\pi^2 \left[\frac{5}{8} a_1 f_{200} + \frac{1}{3} a_3 f_{400} - a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & (C_{33} - 2C_{13}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{4} a_1 f_{200} + \frac{1}{3} a_3 f_{400} - a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & C_{44} \left\{ \frac{2}{5} + 4\pi^2 \left[-\frac{3}{4} a_1 f_{200} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} + 4a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & C_{12} \left\{ -\frac{1}{6} + 4\pi^2 \left[-\frac{7}{8} a_1 f_{200} \right] \right\}\end{aligned}$$

donde

$a_1 = 0.2409354$	$a_4 = 0.0851835$
$a_2 = 0.5901689$	$a_5 = 0.1126872$
$a_3 = 0.0404061$	

Expresiones similares se obtienen para las componentes promedio del tensor de

módulos elásticos:

$$\begin{aligned}\bar{S}_{11} = & S_{11} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 [a_1 f_{200} - a_2 f_{220} + a_3 f_{400} - a_4 f_{420} + a_5 f_{440}] \right\} + \\ & (2S_{13} + S_{44}) \left\{ \frac{2}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{8} a_1 f_{200} + \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{1}{4} a_3 f_{400} + \frac{1}{4} a_4 f_{420} - \frac{1}{4} a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & S_{33} \left\{ \frac{1}{5} + 4\pi^2 \left[-\frac{3}{4} a_1 f_{200} + \frac{3}{4} a_2 f_{220} + a_3 f_{400} - a_4 f_{420} + a_5 f_{440} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{S}_{22} = & S_{11} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 [a_1 f_{200} + a_2 f_{220} + a_3 f_{400} + a_4 f_{420} + a_5 f_{440}] \right\} + \\ & (2S_{13} + S_{44}) \left\{ \frac{2}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{8} a_1 f_{200} - \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{1}{2} a_3 f_{400} - \frac{1}{4} a_4 f_{420} - \frac{1}{4} a_5 f_{440} \right] \right\} + \\ & S_{33} \left\{ \frac{1}{5} + 4\pi^2 \left[-\frac{3}{4} a_1 f_{200} - \frac{3}{4} a_2 f_{220} + a_3 f_{400} + a_4 f_{420} + a_5 f_{440} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{S}_{33} = & S_{11} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[-2a_1 f_{200} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} \right] \right\} + \\ & (2S_{13} + S_{44}) \left\{ \frac{2}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{4} a_1 f_{200} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} \right] \right\} + \\ & S_{33} \left\{ \frac{1}{5} + 4\pi^2 \left[\frac{3}{2} a_1 f_{200} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{S}_{23} = & (S_{11} + S_{33} - S_{44}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{8} a_1 f_{200} - \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} - a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & S_{13} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{5}{8} a_1 f_{200} - \frac{5}{8} a_2 f_{220} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} + 2a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & S_{12} \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 \left[-\frac{7}{8} a_1 f_{200} + \frac{7}{8} a_2 f_{220} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{S}_{13} = & (S_{11} + S_{33} - S_{44}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{8} a_1 f_{200} + \frac{1}{8} a_2 f_{220} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} + a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & S_{13} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{5}{8} a_1 f_{200} + \frac{5}{8} a_2 f_{220} + \frac{8}{3} a_3 f_{400} - 2a_4 f_{420} \right] \right\} + \\ & S_{12} \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 \left[-\frac{7}{8} a_1 f_{200} - \frac{7}{8} a_2 f_{220} \right] \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{12} = & (S_{11} + S_{33} - S_{44}) \left\{ \frac{1}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{1}{4} a_1 f_{200} + \frac{1}{3} a_3 f_{400} - a_5 f_{440} \right] \right\} + \\
& S_{13} \left\{ \frac{8}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{5}{4} a_1 f_{200} - \frac{2}{3} a_3 f_{400} + 2a_5 f_{440} \right] \right\} + \\
& S_{12} \left\{ \frac{1}{3} + 4\pi^2 \left[\frac{7}{4} a_1 f_{200} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{44} = & S_{11} \left\{ \frac{14}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{5}{4} a_1 f_{200} + \frac{5}{4} a_2 f_{220} - \frac{16}{3} a_3 f_{400} - 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\
& (S_{33} - 2S_{13}) \left\{ \frac{4}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{2} a_1 f_{200} - \frac{1}{2} a_2 f_{220} - \frac{16}{3} a_3 f_{400} - 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\
& S_{44} \left\{ \frac{2}{5} + 4\pi^2 \left[\frac{3}{8} a_1 f_{200} - \frac{3}{8} a_2 f_{220} + \frac{16}{3} a_3 f_{400} + 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\
& S_{12} \left\{ -\frac{2}{3} + 4\pi^2 \left[\frac{7}{4} a_1 f_{200} - \frac{7}{4} a_2 f_{220} \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{55} = & S_{11} \left\{ \frac{14}{15} + 4\pi^2 \left[-\frac{5}{4} a_1 f_{200} - \frac{5}{4} a_2 f_{220} - \frac{16}{3} a_3 f_{400} + 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\
& (S_{33} - 2S_{13}) \left\{ \frac{4}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{1}{2} a_1 f_{200} + \frac{1}{2} a_2 f_{220} - \frac{16}{3} a_3 f_{400} + 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\
& S_{44} \left\{ \frac{2}{5} + 4\pi^2 \left[\frac{3}{8} a_1 f_{200} + \frac{3}{8} a_2 f_{220} + \frac{16}{3} a_3 f_{400} - 4a_4 f_{420} \right] \right\} + \\
& S_{12} \left\{ -\frac{2}{3} + 4\pi^2 \left[\frac{7}{4} a_1 f_{200} + \frac{7}{4} a_2 f_{220} \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{S}_{66} = & S_{11} \left\{ \frac{14}{15} + 4\pi^2 \left[\frac{5}{2} a_1 f_{200} + \frac{4}{3} a_3 f_{400} - 4a_5 f_{440} \right] \right\} + \\
& (S_{33} - 2S_{13}) \left\{ \frac{4}{15} + 4\pi^2 \left[-a_1 f_{200} + \frac{4}{3} a_3 f_{400} - 4a_5 f_{440} \right] \right\} + \\
& S_{44} \left\{ \frac{2}{5} + 4\pi^2 \left[-\frac{3}{4} a_1 f_{200} - \frac{4}{3} a_3 f_{400} + 4a_5 f_{440} \right] \right\} + \\
& S_{12} \left\{ -\frac{2}{3} + 4\pi^2 \left[-\frac{7}{2} a_1 f_{200} \right] \right\}
\end{aligned}$$

donde a_1, a_2, a_3, a_4, a_5 son los definidos previamente.

A partir de estas expresiones es inmediato el cálculo de las constantes elásticas promedio de un policristal isótropo de estructura cristalina hexagonal, haciendo cero todos los valores de los f_{lmn} , salvo f_{000} . En particular las expresiones para el módulo de Young son:

$$E_{isotr.}^R = \frac{15}{8S_{11} + 3S_{33} + 4S_{13} + 2S_{44}}$$

$$E_{isotr.}^V = \frac{(7C_{11} - 4C_{13} + 12C_{44} + 2C_{33} - 5C_{12})(2C_{11} + 4C_{13} + C_{33} + 2C_{12})}{3(9C_{11} + 12C_{13} + 4C_{44} + 4C_{33} + 5C_{12})}$$

Una vez calculadas las constantes elásticas promedio de la muestra de simetría ortotrópica, el tratamiento del problema es totalmente análogo al caso de materiales de estructura cristalina cúbica. Son válidas, entonces las ecuaciones (4.12), (4.13) y (4.15) que permiten calcular el módulo de Young en el plano de una chapa.

No es posible hallar una relación tan directa, como en el caso de los materiales de estructura cristalina cúbica, entre la anisotropía elástica en el plano de una chapa y los coeficientes de textura.

4.4.1 APLICACIONES A CHAPAS DE Zr, Zircaloy-4 Y Ti

Se utilizaron chapas de Zr, Zircaloy-4 y Ti cuya composición química se detalla en el capítulo III. Los coeficientes de textura, obtenidos a partir de las figuras de polos experimentales, hasta el orden $l=4$, para los tres materiales, figuran en la tabla IV.7

TABLA IV.7

Coeficientes de textura para chapas de Zr, Zircaloy 4 y Ti.

Material	f_{200}	f_{220}	f_{400}	f_{420}	f_{440}
Circonio	0.0129580	-0.0052695	0.0027892	-0.0044008	0.0025203
Zircaloy-4	0.0137103	-0.0034681	0.0056775	-0.0007910	0.0020190
Titanio	0.0157623	-0.0044720	0.0011492	-0.0057149	0.0016607

Los valores de las constantes elásticas del Zr y del Ti, que figuran en la tabla IV.8, fueron tomados del trabajo de Fisher y Renken [51]. Para el Zircaloy-4 se tomaron los valores de las constantes elásticas del Zr.

TABLA IV.8

Constantes elásticas y módulos elásticos del Zr y Ti monocristalinos (10^5 MPa)

	C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{13}	C_{12}	S_{11}	S_{33}	S_{44}	S_{13}	S_{12}
Zr	1.434	1.648	0.320	0.653	0.728	1.009	0.798	3.120	-0.242	-0.400
Ti	1.624	1.807	0.467	0.690	0.920	0.958	0.698	2.141	-0.189	-0.462

Los valores del módulo de Young del material isótropo calculados con estas constantes son:

$$E^R (\text{Zr}) = 0.953 \times 10^5 \text{MPa} \quad E^R (\text{Ti}) = 1.129 \times 10^5 \text{MPa}$$

$$E^V (\text{Zr}) = 0.969 \times 10^5 \text{MPa} \quad E^V (\text{Ti}) = 1.163 \times 10^5 \text{MPa}$$

$$E^H (\text{Zr}) = 0.961 \times 10^5 \text{MPa} \quad E^H (\text{Ti}) = 1.146 \times 10^5 \text{MPa}$$

Las mediciones de módulo de Young se realizaron con la técnica detallada en el Apéndice III, tomándose para la densidad de las muestras los siguientes valores

$$\text{circonio } \rho = 6.505 \text{ gr/cm}^3$$

$$\text{titanio } \rho = 4.506 \text{ gr/cm}^3$$

En la tabla IV.9 figuran los valores de módulo de Young medidos para los tres materiales en muestras cortadas a distintos ángulos (α) respecto de la dirección de laminado. Los valores que figuran en la tabla corresponden al promedio de mediciones efectuadas en tres muestras distintas, observándose una dispersión entre los valores del orden del 2%, mayor que la correspondiente al error de medición y atribuible a inhomogeneidades en las chapas.

TABLA IV.9

Módulo de Young en función del ángulo α con la dirección de laminado

	Circonio	Zircaloy-4	Titanio
$\alpha(^{\circ})$	E (10^5 MPa)		
0	0.97 ± 0.02	0.95 ± 0.02	1.08 ± 0.02
22.5			1.08 ± 0.02
45	0.93 ± 0.02	0.95 ± 0.02	1.09 ± 0.02
67.5			1.11 ± 0.02
90	0.97 ± 0.02	0.97 ± 0.02	1.13 ± 0.02

En las figuras IV.19, IV.20 y IV.21 se grafican las curvas teóricas de la variación

del módulo de Young en el plano de la chapa y los valores experimentales.

FIGURA IV.19

E vs α . Circonio

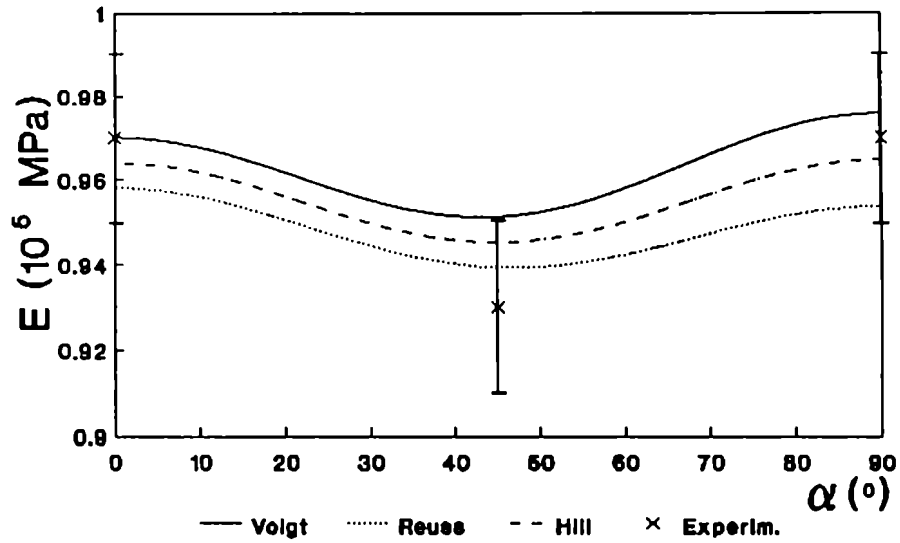


FIGURA IV.20

E vs α . Titanio

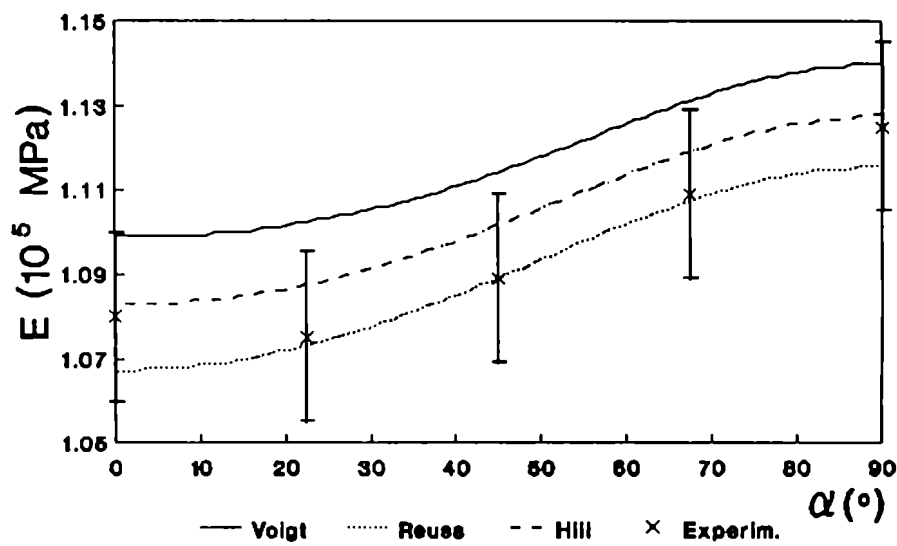
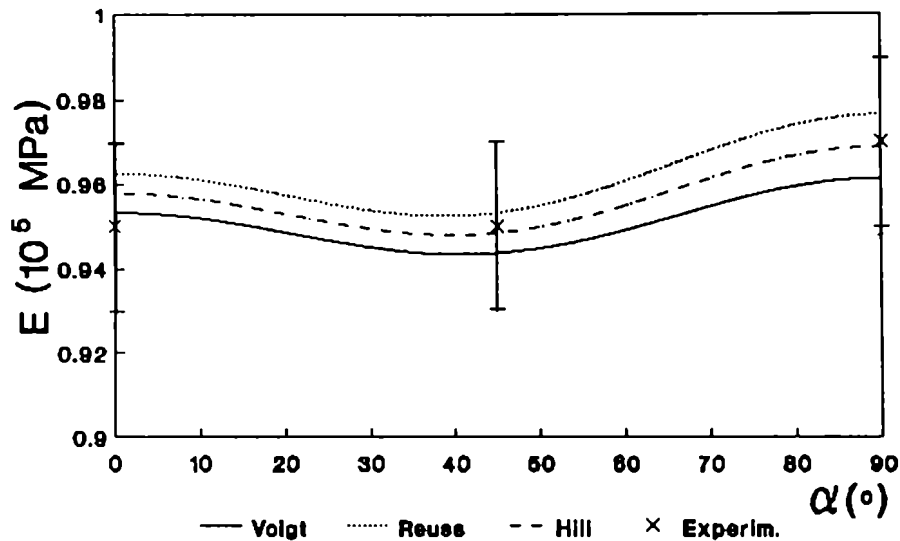


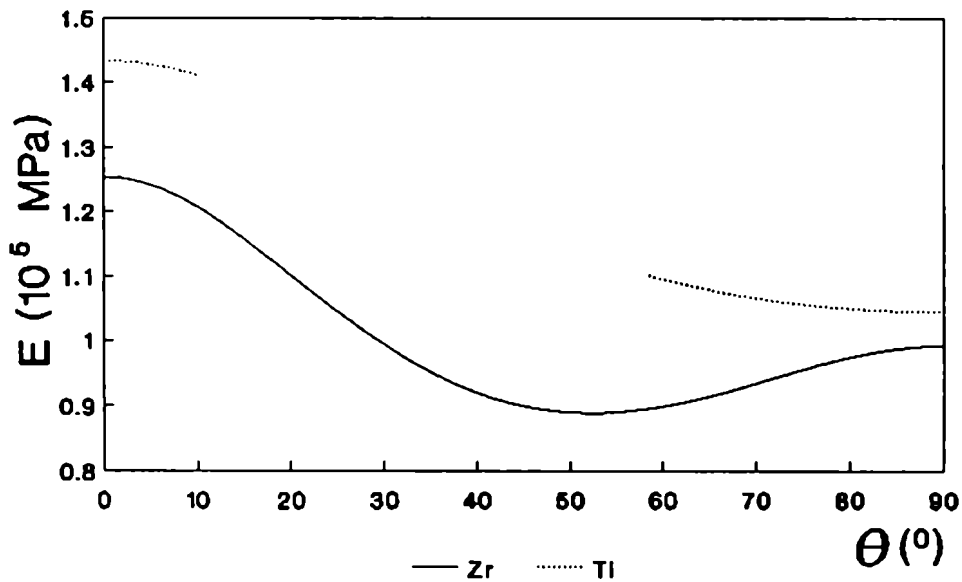
FIGURA IV.21

E vs α . Zircaloy-4

Los resultados muestran que en las chapas de Zr, Zircaloy-4 y Ti, con la textura de polo oblicuo, la variación del módulo de Young, en el plano de la chapa es muy pequeña (menor del 4%). La dependencia angular de módulo de Young, a pesar que la textura es similar, es distinta en el Zr y Zircaloy-4 de la del Ti: en el primer caso el módulo de Young es mínimo alrededor de 45° de la dirección de laminado y en el segundo el módulo crece en forma monótona con el ángulo respecto de la dirección de laminado. La causa de este distinto comportamiento esta en los diferentes valores de constantes elásticas de los monocristales respectivos. En la figura IV.22 se grafica el módulo de Young para los dos monocristales (Zr y Ti) en función del ángulo θ formado entre el eje c y la dirección en la cual se calcula el módulo de Young. En las muestras policristalinas cortadas a 0° de la dirección de laminado, como puede verse en las figuras de polos $\{002\}$ del cap.I, la mayoría de los cristales están orientados de forma tal que el eje c forma un ángulo de aproximadamente 90° con la dirección de medida del módulo de Young. En las muestras cortadas a

ángulos mayores, el eje c de los cristales esta orientado en forma preferencial con un ángulo, respecto de la dirección de medida del módulo, menor de 90° . En el Ti policristalino, por lo tanto, la dirección de laminado corresponde a un mínimo para el módulo de Young, mientras que para el Zr y Zircaloy-4 policristalinos, el valor mínimo corresponde a una dirección de medida intermedia entre la dirección de laminado y la dirección transversal de la chapa, para la cual el promedio, ponderado por la FDOC, del módulo de Young de los cristales, es mínimo.

FIGURA IV.22

E vs θ . Monocristales de Zr y Ti

4.5 CONCLUSIONES

- a) En las chapas de materiales de estructura cristalina cúbica la aproximación de Hill da un acuerdo razonable con los valores experimentales de módulo de Young, sobre todo en el caso en que el material está total o parcialmente recristalizado (acero c, Cu). En el material muy deformado (acero b) se observa una mayor discrepancia entre los valores experimentales y los calculados. Los parámetros que diferencian los dos estados del material (recristalizado - deformado) son fundamentalmente: textura, micro y macrotensiones, imperfecciones en la estructura cristalina, correlación de orientaciones entre granos vecinos, forma de los granos. Dado que la aproximación de Hill solo tiene en cuenta uno de estos parámetros (la textura) se hace evidente la necesidad de introducir modelos más elaborados, que tengan en cuenta los otros parámetros, si se pretende describir en forma más realista el comportamiento macroscópico del policristal. No obstante, dada la complejidad matemática que involucra la utilización de modelos tales como el autoconsistente, es de utilidad contar con una primera aproximación como la obtenida al usar la de Hill.
- b) Los resultados obtenidos en los alambres de Cu trefilado, donde la aproximación de Hill ajusta bien los valores experimentales, tanto en el caso del material recristalizado (granos equiaxiados) como en el del material muy deformado (granos alargados), llevan a pensar que la forma de los granos y la deformación no son los factores preponderantes a tener en cuenta en la modelización de la respuesta elástica del material. La diferencia entre las texturas del acero deformado y los alambres trefilados se traduce también en una diferente distribución de desorientaciones entre

granos vecinos en el policristal, siendo este factor el que tendría que introducirse en los cálculos.

- c) En los materiales de estructura cristalina hexagonal analizados, con textura de polo oblicuo, la variación del módulo de Young en el plano de la chapa es muy pequeña con respecto a los errores de medición. Los valores calculados usando Hill ajustan con los resultados experimentales.

CAPITULO V

TENSIONES RESIDUALES

Las tensiones residuales (TR) son tensiones elásticas estáticas multiaxiales que existen en un sistema aislado no sometido a ninguna fuerza o momento exterior y que se encuentra en equilibrio mecánico.

Estas tensiones se producen en el material como consecuencia de la respuesta elástica del material a distribuciones inhomogéneas de deformaciones generadas por deformaciones plásticas, precipitación, transformaciones de fase, expansión térmica, etc. Por ejemplo, procesos de deformación mecánica como granallado, maquinado, etc, que introducen deformación plástica en capas superficiales de un material, causan tensiones residuales en dichas capas dado que el resto de la muestra queda tensionada al haber sufrido deformaciones mínimas.

El conocimiento de las tensiones residuales presentes en una estructura o componente es imprescindible para predecir su comportamiento frente a distintas sollicitaciones, ya que a las tensiones externas aplicadas deben sumarse las internas, ya presentes en el material. Por otra parte las tensiones residuales juegan un rol importante en temas tales como corrosión bajo tensiones, fragilización por hidrógeno, fatiga, precipitación de hidruros, soldadura etc. No siempre la presencia de TR se traduce en un elemento nocivo para el comportamiento del material: en los tratamientos de mejoramiento de superficies, tales como el granallado y la implantación iónica, se busca crear fuertes tensiones superficiales en compresión.

Dado el carácter policristalino y heterogéneo de los materiales metálicos el origen

de las tensiones puede ubicarse en el rango macro, micro o submicroscópico. Esto lleva a una clasificación de las tensiones residuales en tres órdenes (Fig. 5.1)

Tensiones Residuales de 1^{er} orden (σ^I): Son homogéneas en un dominio grande del material (muchos granos, $\approx 1\text{mm}$). Estas tensiones son de suma importancia desde el punto de vista ingenieril pues poseen una gran influencia sobre las propiedades funcionales de los materiales.

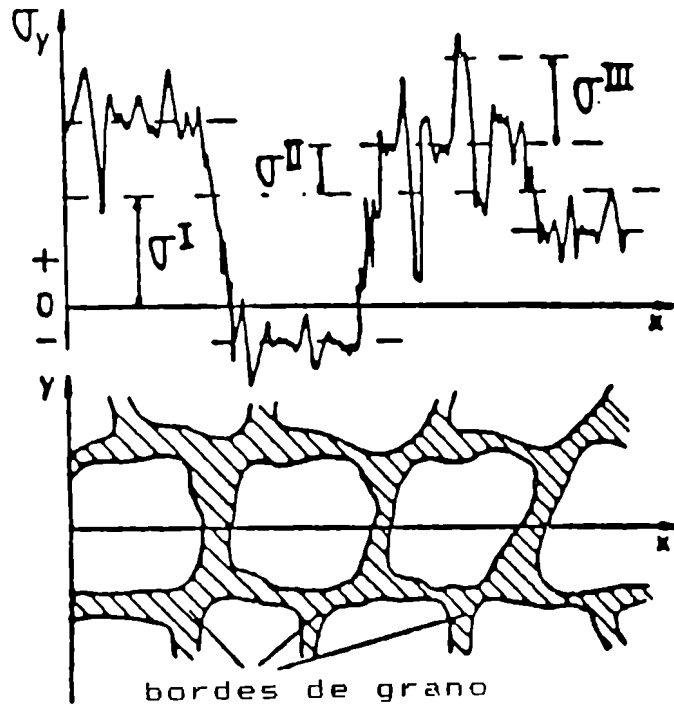
Tensiones residuales de 2^{do} orden (σ^{II}): Son homogéneas en dominios pequeños del material (un grano o una fase, $\approx 10\mu\text{m}$). Ellas ponen en evidencia, entre otros ejemplos, la existencia de diferencias en la respuesta mecánica de las componentes de un material bifásico después de su deformación o bien la existencia de una fuerte anisotropía en el coeficiente de dilatación térmica de un agregado policristalino de estructura hexagonal compacta.

Tensiones residuales de 3^{er} orden (σ^{III}): Son homogéneas en dominios muy pequeños del material (algunas distancias interatómicas, $\approx 10\text{nm}$) y están asociadas a todas las deformaciones existentes a nivel de la red cristalina: apilamiento de dislocaciones, defectos puntuales, precipitación, bordes de grano, etc.

Las tensiones residuales de 1^{er} orden son llamadas macrotensiones y las de 2^{do} y 3^{er} orden, cuyos efectos son difíciles de distinguir en general, son agrupadas con el nombre de microtensiones.

FIGURA V.I

Definición esquemática de los distintos órdenes de tensiones
residuales en un material monofásico



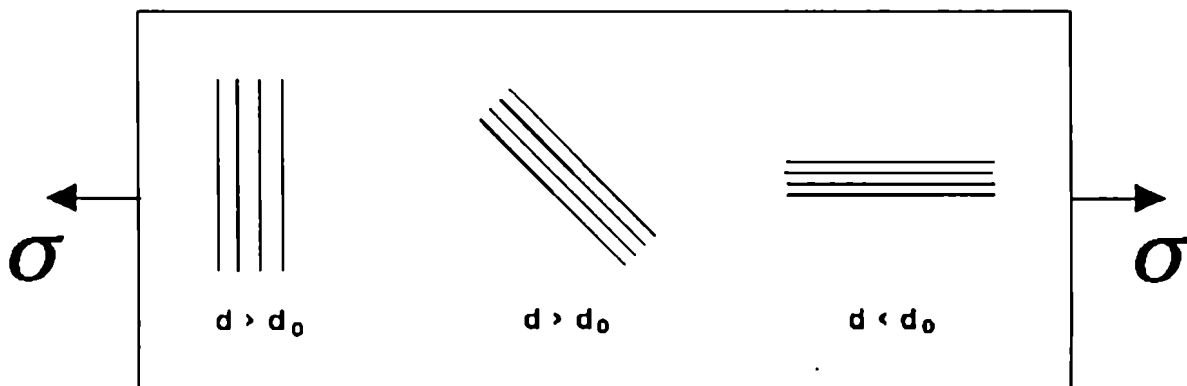
5.1 PRINCIPIO DE MEDIDA DE TENSIONES RESIDUALES POR DIFRACCION DE RAYOS X

Las TR son determinadas en forma indirecta: se miden deformaciones y se calculan las tensiones utilizando la teoría de la elasticidad. La variación relativa de la distancia interreticular d_{hkl} entre planos cristalinos es utilizada como medida de la deformación. En

un material sin tensiones el valor d_{hkl} del espaciado de una familia de planos $\{hkl\}$ dada es independiente de la orientación de estos planos con respecto a la muestra (deformación $\varepsilon=0$). En cambio en un material tensionado la deformación será función de la orientación del plano (Fig V.2).

FIGURA V.2

Variación del espaciado de un plano cristalino en función de su orientación respecto de la tensión.



Utilizando la ley de Bragg

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} \quad (5.1)$$

se puede escribir diferenciando la ecuación

$$\frac{\Delta d}{d_{hkl}} = -\cot \theta_{hkl} \Delta \theta_{hkl} = \varepsilon \quad (5.2)$$

o bien

$$\Delta \theta_{hkl} = \frac{\Delta d_{hkl}}{d_{hkl}} \operatorname{tg} \theta_{hkl} \quad (5.3)$$

Es decir una variación del espaciado cristalino Δd_{hkl} se traduce en un desplazamiento angular del pico de difracción $\Delta \theta_{hkl}$, tanto mayor cuanto mayor sea el ángulo de difracción, debido al factor $\operatorname{tg} \theta_{hkl}$. La variación del espaciado d_{hkl} puede ser debida ya sea a la presencia de TR en el material o a un estado de tensiones aplicado externamente al mismo.

La vinculación entre las deformaciones medidas y las tensiones se hace a través de la teoría de la elasticidad, teniendo en cuenta, además, las características del proceso de medición.

Los tres órdenes de TR descritos previamente afectan de manera distinta los picos de difracción: En el caso de TR de 1^{er} orden la deformación uniforme de un conjunto grande de granos implica un corrimiento neto del pico de difracción. En el caso de TR de 2^{do} y 3^{er} orden, donde la deformación varía grano a grano, o dentro de un mismo grano, se produce un ensanchamiento de los picos de difracción. En un material real en general están superpuestos los dos efectos: corrimiento y ensanchamiento del pico de difracción.

Es importante señalar algunas características del método de medición de TR mediante difracción de rayos-X:

- a) Es un método no destructivo.
- b) Solo puede aplicarse a materiales cristalinos
- c) Dada la penetración de los rayos-X en el material (10 - 100 μ m), la información que se obtiene es relativa a las capas superficiales del mismo.

Otro método utilizado para la determinación de TR es el que utiliza la difracción de neutrones. El principio de medida es básicamente el mismo que en la técnica de difracción

de Rayos X [52], pero dada la mayor penetración de los neutrones en el material ($\approx 3-4\text{cm}$) la información que se obtiene corresponde al promedio de las TR en el volumen del material. Esta es también una técnica no destructiva, que puede considerarse como complementaria de la técnica por difracción de Rayos X.

En este trabajo se analizarán en particular las macro tensiones, realizando el cálculo teórico y las mediciones experimentales para determinar las llamadas constantes elásticas radiocristalográficas (CER) que vinculan el tensor de deformaciones medido por difracción de rayos-X con el tensor de tensiones, en el caso de materiales texturados de estructura cristalina hexagonal.

5.2 CONSTANTES ELASTICAS RADIOCRISTALOGRAFICAS

Las CER, tal como fueron definidas en 5.1, son los factores de proporcionalidad entre las deformaciones elásticas, derivadas de mediciones del espaciado de algún plano cristalino, y las tensiones que están actuando en el policristal. No son iguales, por lo tanto, a las constantes mecánicas macroscópicas del policristal, ya que para una dirección particular de medida de la deformación (dada por los ángulos φ, ψ en la Fig. V.3) los rayos X "ven" solo los cristales que están en condiciones de difractar. Si, por ejemplo, consideramos que sobre todos los cristales que difractan actúa la misma tensión (aproximación de Reuss), la deformación en la dirección perpendicular al plano $\{hkl\}$ elegido, esta determinada por las constantes elásticas anisotrópicas correspondientes a esa orientación particular del cristal y por lo tanto no es necesariamente igual a la deformación elástica, en esa dirección φ, ψ , promediando sobre todos los cristales.

Para hallar expresiones analíticas que vinculen las CER, definidas a nivel macros-

cópico, con las constantes elásticas de los cristales individuales que componen el policristal definimos los siguientes sistemas de coordenadas:

Macroscópicos (Fig V.3):

- X_i^M : Sistema de coordenadas fijo a la superficie de la muestra (Sistema Muestra)
- X_i^L : Sistema de coordenadas rotado en los ángulos φ y ψ respecto de X_i^M de manera que X_3^L coincida con la dirección en la cual se mide la deformación (Sistema de Laboratorio)

Microscópicos (Fig V.4):

- X_i^C : Sistema de coordenadas fijo al cristal
- X_i^O : Sistema de coordenadas rotado respecto de X_i^C de manera que X_3^O coincida con la normal al plano $\{hkl\}$

Los sistemas X_i^O y X_i^L tienen $X_3^O \parallel X_3^L$ ya que ambas direcciones son perpendiculares al plano $\{hkl\}$ difractante. Queda una indeterminación respecto del ángulo entre X_1^O y X_1^L ya que una rotación del cristal alrededor de X_3^O no afecta las condiciones de difracción.

FIGURA V.3

Sistemas de coordenadas macroscópicos

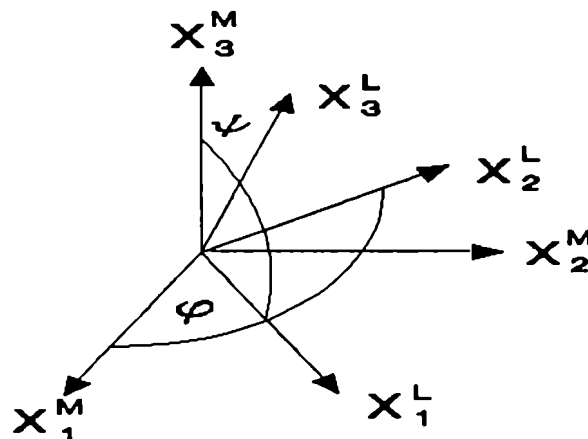
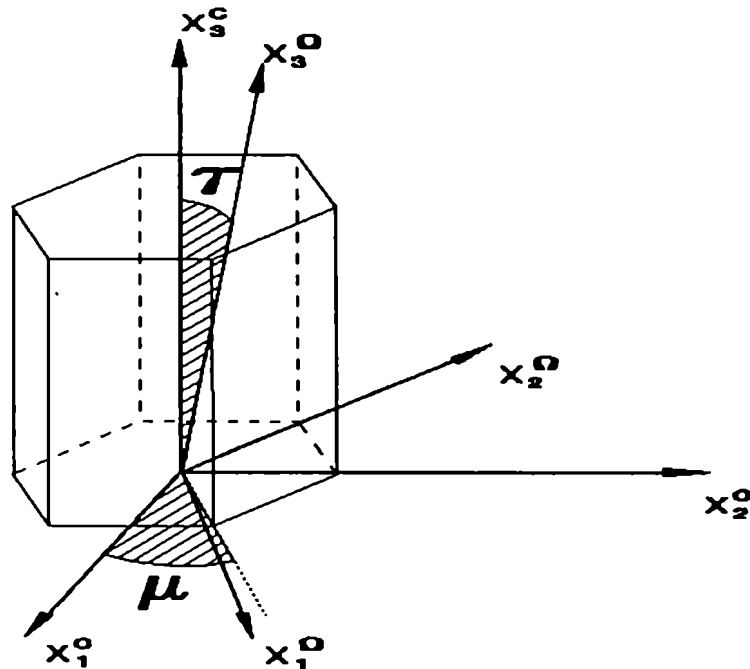


FIGURA V.4

Sistemas de coordenadas microscópicos



Las matrices de pasaje de un sistema a otro de coordenadas se definen con la siguiente notación

$$\begin{array}{lll}
 X_i^L = \Gamma_{ij} X_j^M & \text{siendo} & \Gamma_{ij} = \Psi_{ik} \cdot \Phi_{kj} \\
 X_i^O = b_{ij} X_j^C & \text{siendo} & b_{ij} = \tau_{ik} \cdot \mu_{kj} \\
 X_i^L = \Lambda_{ij} X_j^O & & \\
 X_i^L = \delta_{ij} X_j^C & \text{siendo} & \delta_{ij} = \Lambda_{ik} b_{kj} \\
 X_i^C = a_{ij} X_j^M & &
 \end{array}$$

La matriz a_{ij} puede expresarse de dos maneras diferentes: pasando directamente del Sistema Muestra al Sistema Cristal utilizando los tres ángulos de Euler

$$a_{ij} = \omega_{il} \cdot \beta_{lk} \cdot \alpha_{kj}$$

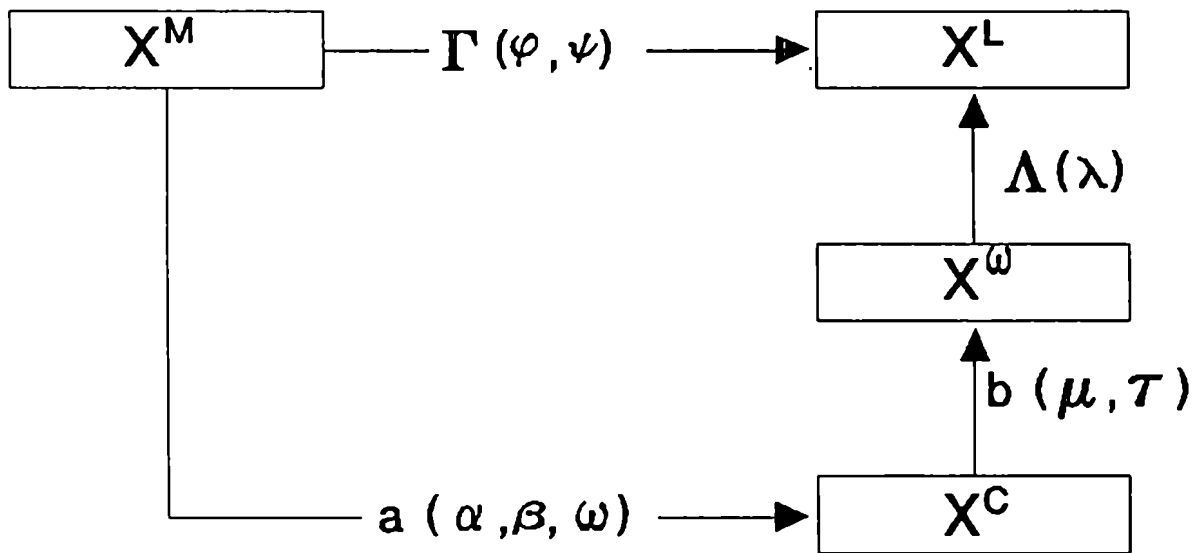
o bien pasando a través del Sistema de Laboratorio

$$a_{ij} = b_{il}^{-1} \cdot \Lambda_{lk}^{-1} \cdot \Gamma_{kj}$$

En el esquema de la Figura V.5 se resumen las diferentes rotaciones y en el Apéndice I se dan las expresiones de las distintas matrices.

FIGURA V.5

Esquema de las rotaciones entre los distintos sistemas de coordenadas



La deformación $\varepsilon_{\varphi\psi}$ medida representa el promedio de las deformaciones del subconjunto de granos dentro del material que están en condiciones de difractar, es decir de

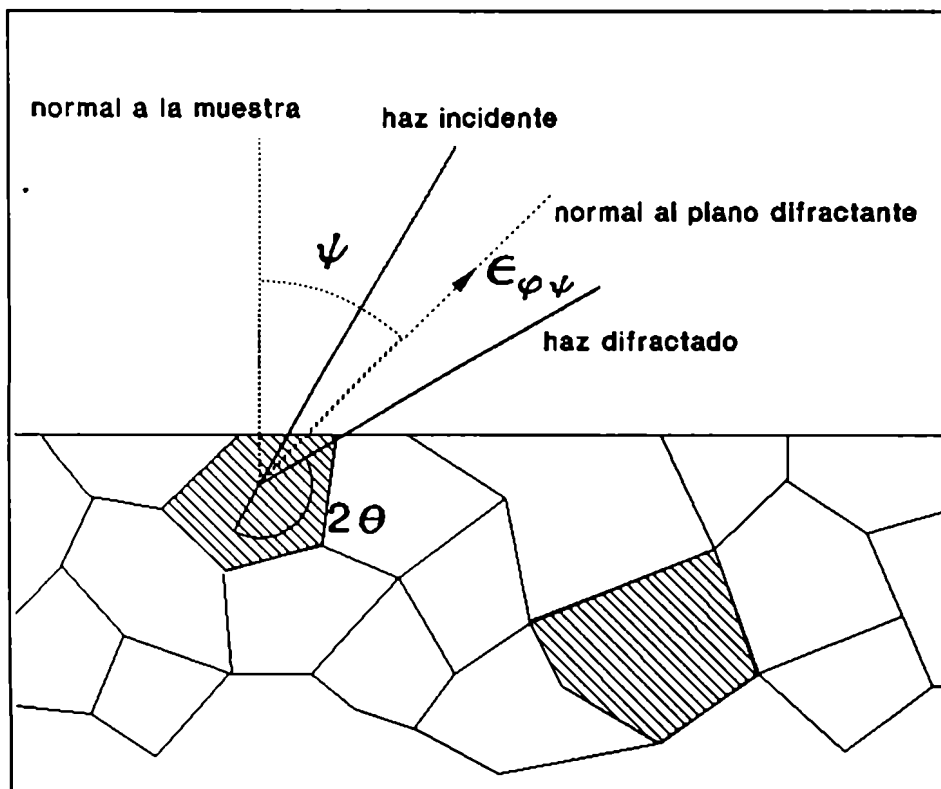
aquellos orientados de forma tal que la normal al plano $\{hkl\}$ elegido coincida con X_3^L
(Fig V.6)

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \langle \varepsilon_{33}^0 \rangle = \langle \varepsilon_{33}^L \rangle = \frac{1}{V_d} \int_{V_d} \varepsilon_{33}^L d(V_d) \quad (5.4)$$

donde ε_{33}^L es la deformación de cada cristal que difracta en el sistema X_i^L y V_d es el volumen difractante.

FIGURA V.6

Esquema de la difracción



La relación entre el tensor promedio de las microdeformaciones y el tensor promedio de las tensiones que se desea calcular es un caso particular de la ec. (2.9)

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = R_{33kl}^L \sigma_{kl}^L \quad (5.5)$$

o expresando las tensiones en el Sistema Muestra

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = R_{33kl}^L \Gamma_k \Gamma_l \sigma_{ij}^M = F_{ij} \sigma_{ij}^M \quad (5.6)$$

R_{33kl}^L son componentes del tensor de las llamadas constantes elásticas radiocristalográficas (CER) en el sistema de laboratorio y F_{ij} son las constantes elásticas en el sistema muestra y no forman un tensor. La forma del tensor R_{ijkl}^L esta dada por la ecuación (2.10) particularizando la propiedad tensorial E por el tensor S de módulos elásticos. La expresión matemática de R_{33kl}^L depende del plano difractante, de los módulos elásticos del monocristal, de los ángulos de medida φ y ψ , de la distribución de orientaciones cristalinas en el material (textura) y de las interacciones elásticas entre granos. Para su cálculo es necesario utilizar alguna de las aproximaciones discutidas en el capítulo IV. El modelo de Reuss puede utilizarse en una primera aproximación ya que es el más simple que tiene en cuenta la anisotropía radiocristalográfica. Con este modelo las CER toman la forma

$$R_{33kl}^L = \frac{1}{V_d} \int_{V_d} S_{33kl}^L d(V_d) \quad (5.7)$$

5.3 CALCULO DE LAS CER EN EL CASO DE MATERIALES ISOTROPOS

Dentro del esquema de Reuss, que el material sea isótropo implica que en el Sistema de Laboratorio los cristales están orientados al azar respecto de una rotación alrededor de la normal a los planos difractantes. El cálculo de las CER en la ecuación (5.6) dará entonces como resultado el promedio de las constantes elásticas de un policristal con un eje

de simetría de revolución coincidente con la normal al plano $\{hkl\}$, independientemente de los ángulos φ y ψ . La simetría del problema lleva a la solución inmediata

$$R_{3333}^L = \frac{1}{V_d} \int_{V_d} S_{3333}^L d(V_d) = S_{3333}^0 \quad (5.8)$$

$$R_{3311}^L = R_{3322}^L = \frac{1}{V_d} \int_{V_d} S_{3311}^L d(V_d) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} S_{3311}^0 d\lambda \quad (5.9)$$

$$(5.10)$$

$$R_{3312}^L = R_{3313}^L = R_{3323}^L = 0$$

En el caso de materiales isótropos, el comportamiento del material puede describirse por dos componentes no nulas del tensor R_{ijkl}^L . En la literatura las dos constantes habitualmente utilizadas se definen como

$$S_1(hkl) = R_{3311}^L = R_{3322}^L$$

$$\frac{1}{2}S_2(hkl) = R_{3333}^L - R_{3311}^L$$

Si se reemplazan estas expresiones en las correspondientes a los F_{kl} se obtiene para los materiales isótropos

$$F_{11} = \frac{1}{2} S_2 \cos^2 \varphi \sin^2 \psi + S_1$$

$$F_{22} = \frac{1}{2} S_2 \sin^2 \varphi \sin^2 \psi + S_1$$

$$F_{33} = \frac{1}{2} S_2 \cos^2 \psi + S_1$$

$$(5.11)$$

$$F_{23} = \frac{1}{4} S_2 \sin \varphi \sin 2\psi$$

$$F_{13} = \frac{1}{4} S_2 \cos \varphi \sin 2\psi$$

$$F_{12} = \frac{1}{4} S_2 \sin 2\varphi \sin^2 \psi$$

Reemplazando en la ecuación (5.6) y considerando que el sistema muestra coincide con el sistema de ejes principales del tensor de las tensiones y que en la capa superficial del material donde se están determinando las tensiones $\sigma_{33}^M = 0$, se obtiene la clásica ley del $\sin^2 \psi$ para materiales isótropos

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \frac{1}{2} S_2 (\sigma_{11}^M \cos^2 \varphi + \sigma_{22}^M \sin^2 \varphi) \sin^2 \psi + (\sigma_{11}^M + \sigma_{22}^M) S_1 \quad (5.12)$$

Las ec (5.8) y (5.9) permiten el cálculo por integración de las dos constantes para materiales con distinta estructura cristalina.

Utilizando los desarrollos del Capítulo IV también puede realizarse el cálculo de las dos constantes para materiales de estructura cristalina cúbica y hexagonal, en forma menos engorrosa que en el método por integración. El subconjunto de todos los cristales que difractan forman desde el punto de vista de sus constantes elásticas un monocristal equivalente con simetría de rotación alrededor del eje X_3^L (normal al plano {hkl} elegido), siendo este un caso particular de simetría ortotrópica y, por lo tanto, pueden aplicarse para el cálculo de sus constantes elásticas promedio las ecuaciones (4.10) para materiales cúbicos, o (4.26) para materiales hexagonales. En cada posición del eje X_3^L este coincide con la normal a la "muestra" de la cual se quieren calcular los promedios. Si bien este cálculo no aporta un resultado nuevo, ya que las expresiones de las CER para materiales isótropos cúbicos y hexagonales fueron obtenidas por integración por distintos autores [53], [54], la comparación de los resultados sirve para mostrar la validez de los desarrollos realizados en

el Capítulo IV

5.3.1 MATERIALES CON ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA

La simetría de revolución, definida anteriormente, impone $f_{420}=f_{440}=0$. El único coeficiente de textura no nulo es f_{400} . Las expresiones para los R_{33ij}^L son por lo tanto:

$$R_{3333}^L = S_{11} - 2S(0.2 - 4\pi^2 \cdot 0.1616244 f_{400}) \quad (5.13)$$

$$R_{3311}^L = S_{12} + S(0.2 - 4\pi^2 \cdot 0.1616244 f_{400}) \quad (5.14)$$

Para calcular el coeficiente de textura ficticio f_{400} en función del plano $\{hkl\}$ elegido se utilizó la formula dada por Nye [34] para el valor de S_{3333}^0

$$S_{3333}^0 = S_{11} - 2(S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44}) \frac{(h^2k^2 + h^2l^2 + k^2l^2)}{(h^2 + k^2 + l^2)^2} \quad (5.15)$$

donde S_{ij} son las constantes elásticas del monocristal en notación reducida.

Teniendo en cuenta que en este caso $R_{3333}^L = S_{3333}^0$, puede entonces calcularse f_{400} para cualquier plano $\{hkl\}$ igualando las ecuaciones (5.13) y (5.15).

$$f_{400} = \frac{1}{4\pi^2 \cdot 0.1616244} \left[0.2 - \frac{h^2k^2 + h^2l^2 + k^2l^2}{(h^2 + k^2 + l^2)^2} \right] \quad (5.16)$$

Los valores de f_{400} depende solo del plano $\{hkl\}$. Una vez calculados para todos los plano de interés, las CER para cada material se obtienen de las ecuaciones (5.13) y (5.14)

Si se reemplaza la ecuación (5.16) en las ecuaciones (5.13) y (5.14) y se define

$$\gamma = \frac{(h^2k^2 + h^2l^2 + k^2l^2)}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}$$

se llega a resultados coincidentes a los obtenidos por integración [53] :

$$\frac{1}{2}S_2 = S_{11} - S_{12} - 3S\gamma$$

$$S_1 = S_{12} + S\gamma$$

En la figura V.7 están graficados los valores de f_{400} en función del parámetro γ y en la tabla V.1 se dan los valores para los planos habitualmente utilizados. De la ecuación (5.16) resulta evidente que a todos los planos paralelos entre sí les corresponde el mismo valor de f_{400} ya que poseen el mismo valor de γ y, por otro parte, refleja el hecho de que corresponden a la misma orientación del cristal.

FIGURA V.7

f_{400} vs. γ para muestras ideales con textura de fibra $\langle hkl \rangle$
perfecta en materiales cúbicos

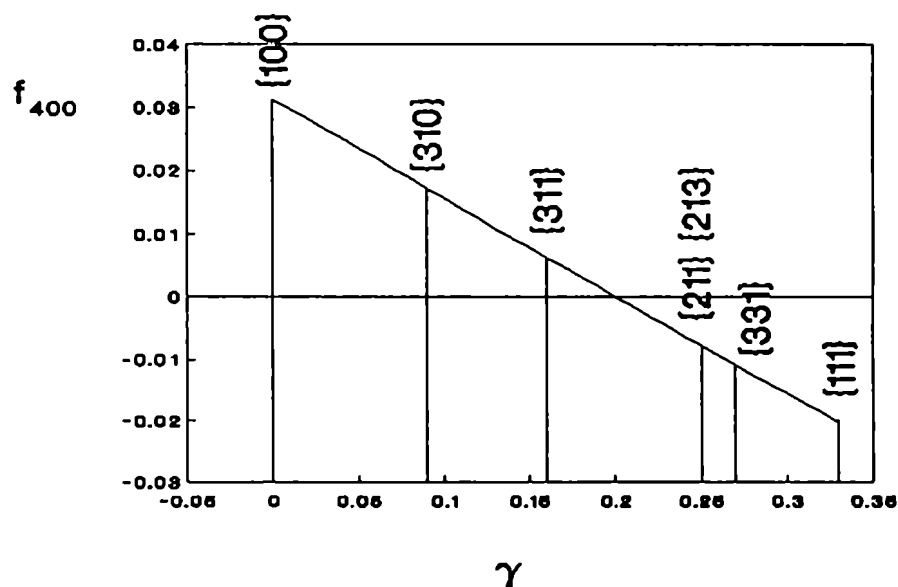


TABLA V.I

Coeficientes de textura f_{400} para muestras ideales con textura de fibra $\langle hkl \rangle$ perfecta en materiales cúbicos

{hkl}	f_{400}
100	0.03134464
310	0.01723955
411	0.01538209
311	0.00673521
420	0.00673521
211	-0.00783616
213	-0.00783616
331	-0.01163485
111	-0.02089643

5.3.2 MATERIALES CON ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL

Siguiendo un esquema totalmente similar al utilizado para materiales cúbicos, en este caso la simetría de revolución impone

$$f_{220} = f_{420} = 0$$

Teniendo en cuenta [34]

$$R_{3333}^L = S_{3333}^Q = S_{11}\sin^2\theta + S_{33}\cos^4\theta + (2S_{13} + S_{44})\cos^2\theta\sin^2\theta \quad (5.17)$$

donde θ es el ángulo entre el eje c y la normal al plano $\{hkl\}$ y puede calcularse en función de los índices de Miller del plano

$$\cos\theta = \frac{l}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2} + l^2}} \quad (5.18)$$

$$\sin\theta = \frac{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}}}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2} + l^2}}$$

igualando los coeficientes de S_{11} , S_{33} y S_{44} de la ecuación (5.17) con los de la ecuación (4.33) pueden despejarse los valores de f_{200} y f_{400}

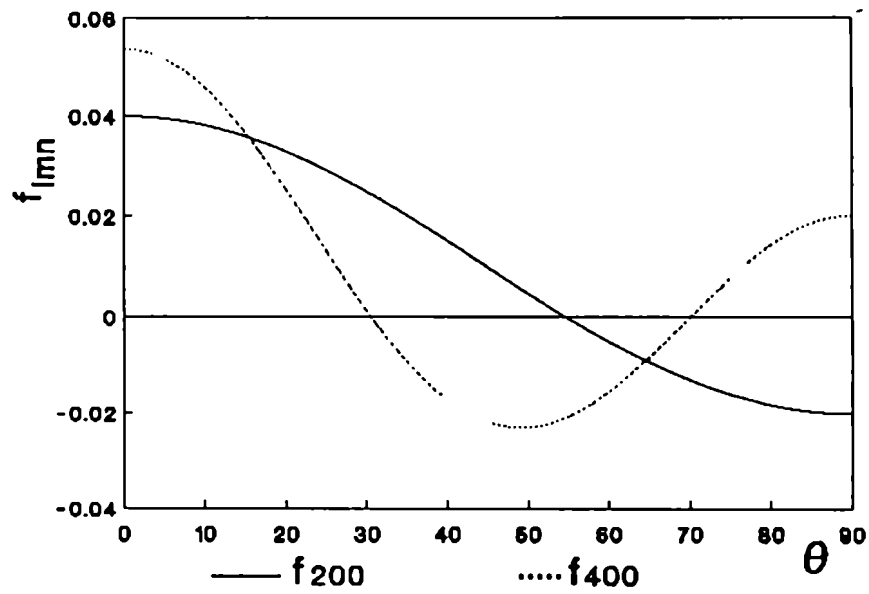
$$f_{200} = 0.040050716 - 0.060076073(\sin^4\theta + \sin^2\theta\cos^2\theta) \quad (5.19)$$

$$f_{400} = 0.278776302(0.48187088\cos^4\theta + 0.361403161\sin^4\theta - 0.289122528)$$

En la figura (V.8) aparecen estos coeficientes graficados en función del ángulo θ . Dado que este ángulo depende de la relación c/a , planos con los mismos índices tendrán distinto valor de θ dependiendo del material.

FIGURA V.8

f_{200} y f_{400} vs. θ para muestras ideales con textura de fibra $\langle uvw \rangle$ perfecta en materiales hexagonales. El eje de fibra $\langle uvw \rangle$ es la dirección normal al plano $\{hkl\}$



Las CER se calculan con las ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 R_{3333}^L = & S_{11} \left[\frac{8}{15} + 4\pi^2 (-0.48187088f_{200} + 0.107749604f_{400}) \right] + \\
 & S_{33} [0.2 + 4\pi^2 (0.36140316f_{200} + 0.107749604f_{400})] + \\
 & (2S_{13} + S_{44}) \left[\frac{2}{15} + 4\pi^2 (0.06023386f_{200} - 0.107749606f_{400}) \right]
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

$$\begin{aligned}
R_{3311}^L &= (S_{11} + S_{33}) \left[\frac{1}{15} + 4\pi^2(0.03011693f_{200} - 0.0538748f_{400}) \right] + \\
&S_{13} \left[\frac{8}{15} + 4\pi^2(0.15058565f_{200} + 0.107749604f_{400}) \right] + \\
&S_{44} \left[-\frac{1}{15} + 4\pi^2(-0.03011693f_{200} + 0.0538748f_{400}) \right] + \\
&S_{12} \left[\frac{1}{3} + 4\pi^2(-0.21081851f_{200}) \right]
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Nuevamente, si se reemplazan en las ecuaciones (5.20) y (5.21) las expresiones de f_{200} y f_{400} dadas por las ecuaciones (5.19) se obtienen los mismos resultados que por integración [54]:

$$\frac{1}{2}S_2 = \frac{1}{2}(2S_{11} - S_{12} - S_{13}) - \frac{1}{2}(5S_{11} + S_{33} - 3S_{44} - S_{12} - 5S_{13})\cos^2\theta + \frac{3}{2}(S_{11} + S_{33} - S_{44} - 2S_{13})\cos^4\theta$$

$$S_1 = \frac{1}{2}(S_{12} + S_{13}) + \frac{1}{2}(S_{11} + S_{33} - S_{13} - S_{12} - S_{44})\cos^2\theta - \frac{1}{2}(S_{11} + S_{33} - S_{44} - 2S_{13})\cos^4\theta$$

5.4 CALCULO DE LAS CER EN MATERIALES TEXTURADOS CON ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL

El cálculo de las CER en materiales texturados de estructura cristalina cúbica fue estudiado por Barral [55], Siguiendo un esquema similar, se analizará como influye la textura en las CER para materiales hexagonales.

En el caso de materiales texturados, para cada par de ángulos de medida φ, ψ elegidos, los planos $\{hkl\}$ que difractan ya no presentan simetría de revolución alrededor de su normal como en el caso isótropo, es decir para cada valor del ángulo λ , al realizar el promedio habrá que multiplicar las constantes del cristal S_{33kl}^0 por una función de peso que

indique la fracción de volumen de los cristales con esa orientación λ . Esto puede realizarse utilizando la FDOC.

$$R_{3kl}^L(\varphi, \psi, (hkl)) = \frac{\int_0^{2\pi} S_{mnop}^C \delta_{3m} \delta_{3n} \delta_{ko} \delta_{lp} g(\alpha, \beta, \omega) d\lambda}{\int_0^{2\pi} g(\alpha, \beta, \omega) d\lambda} \quad (5.22)$$

Para resolver esta ecuación hay que tener en cuenta que los ángulos de Euler son función de todos los otros ángulos involucrados en las rotaciones esquematizadas en la fig V.7.

Para cada valor de λ se calculan a partir de la matriz a_{ij} (ver Apéndice I) y sus valores están comprendidos entre 0 y 2π .

Debido a la simetría del cristal (hexagonal) y de la muestra (ortotrópica) los valores de la FDOC están dados en el cuadrante

$$\begin{aligned} 0 &\leq \alpha' \leq \frac{\pi}{2} \\ 0 &\leq \beta' \leq \frac{\pi}{2} \\ 0 &\leq \omega' \leq \frac{\pi}{3} \end{aligned}$$

Es necesario transformar cada uno de los tres ángulos de Euler obtenidos en el rango 0, 2π al dominio en el cual esta definida la FDOC. Para esto se utiliza [56]:

- a) La propiedad de simetría de los ángulos de Euler. Por la forma en que están definidos es fácilmente verificable que

$$(\alpha, \beta, \omega) \equiv (\alpha + \pi, 2\pi - \beta, \omega + \pi)$$

Aplicando esta propiedad , si $\beta > \pi$ se utiliza la transformación:

$$\begin{aligned}\alpha' &= \alpha + \pi \\ \beta' &= 2\pi - \beta \\ \omega' &= \omega + \pi\end{aligned}\tag{5.23}$$

- b) Las propiedades de simetría propias del cristal hexagonal (12 operaciones de simetría) y las correspondientes a la simetría ortotrópica de la muestra (4 operaciones de simetría). El número de orientaciones equivalentes combinando ambas simetrías es entonces de 48 [56].

Las ecuaciones a resolver son entonces

$$a_i^c . a(\alpha, \beta, \omega) . a_j^m = a'(\alpha^\psi, \beta^\psi, \omega^\psi)$$

donde a_j^m es una operación de simetría de la muestra ($1 \leq j \leq 4$)

a_i^c es una operación de simetría del cristal ($1 \leq i \leq 12$)

$\alpha^\psi, \beta^\psi, \omega^\psi$ son los ángulos equivalentes luego de aplicar las operaciones de simetría

En la tabla V.2 están tabulados los ángulos α^ψ, β^ψ y ω^ψ para las 48 combinaciones posibles.

En base a las equivalencias definidas en la tabla V.2 y en el punto a), se construyó la tabla V.3 en la cual se presentan las relaciones para llevar los ángulos de Euler al cuadrante donde esta definida la FDOC.

TABLA V.2. Conjunto de orientaciones equivalentes $\alpha^i, \beta^j, \omega_{ij}$, para simetría hexagonal ortotrópica.

MUESTRA		j=1	j=2	j=3	j=4
CRISTAL		$\alpha_i, \beta_j, \omega_i$	$\alpha_j, \beta_j, \omega_j$	$\alpha_i, \beta_j, \omega_j$	$\alpha_i, \beta_j, \omega_j$
i	$\alpha_i, \beta_i, \omega_i$	0,0,0	$\pi, 0, 0$	0, $\pi, 0$	$3\pi/2, \pi, \pi/2$
1	0,0,0	α, β, ω	$\alpha + \pi, \beta, \omega$	$\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + \pi$	$2\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + \pi$
2	$\pi/3, 0, 0$	$\alpha, \beta, \omega + \pi/3$	$\alpha + \pi, \beta, \omega + \pi/3$	$\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + 4\pi/3$	$2\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + 4\pi/3$
3	$2/3\pi, 0, 0$	$\alpha, \beta, \omega + 2\pi/3$	$\alpha + \pi, \beta, \omega + 2\pi/3$	$\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + 5\pi/3$	$2\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + 5\pi/3$
4	$\pi, 0, 0$	$\alpha, \beta, \omega + \pi$	$\alpha + \pi, \beta, \omega + \pi$	$\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega$	$2\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega$
5	$4/3\pi, 0, 0$	$\alpha, \beta, \omega + 4\pi/3$	$\alpha + \pi, \beta, \omega + 4\pi/3$	$\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + \pi/3$	$2\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + \pi/3$
6	$5/3\pi, 0, 0$	$\alpha, \beta, \omega + 5\pi/3$	$\alpha + \pi, \beta, \omega + 5\pi/3$	$\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + 2\pi/3$	$2\pi - \alpha, \pi - \beta, \omega + 2\pi/3$
7	0, $\pi, 0$	$\alpha + \pi, \pi - \beta, \pi - \omega$	$\alpha, \pi - \beta, \pi - \omega$	$2\pi - \alpha, \beta, 2\pi - \omega$	$\pi - \alpha, \beta, 2\pi - \omega$
8	0, $\pi, \pi/3$	$\alpha + \pi, \pi - \beta, 4\pi/3 - \omega$	$\alpha, \pi - \beta, 4\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha, \beta, \pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha, \beta, \pi/3 - \omega$
9	0, $\pi, 2/3\pi$	$\alpha + \pi, \pi - \beta, 5\pi/3 - \omega$	$\alpha, \pi - \beta, 5\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha, \beta, 2\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha, \beta, 2\pi/3 - \omega$
10	0, π, π	$\alpha + \pi, \pi - \beta, 2\pi - \omega$	$\alpha, \pi - \beta, 2\pi - \omega$	$2\pi - \alpha, \beta, \pi - \omega$	$\pi - \alpha, \beta, \pi - \omega$
11	0, $\pi, 4/3\pi$	$\alpha + \pi, \pi - \beta, \pi/3 - \omega$	$\alpha, \pi - \beta, \pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha, \beta, 4\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha, \beta, 4\pi/3 - \omega$
12	0, $\pi, 5/3\pi$	$\alpha + \pi, \pi - \beta, 2\pi/3 - \omega$	$\alpha, \pi - \beta, 2\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha, \beta, 5\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha, \beta, 5\pi/3 - \omega$

TABLA V.3

Relaciones para calcular los ángulos de Euler equivalentes en
el dominio en que esta definida la FDOC

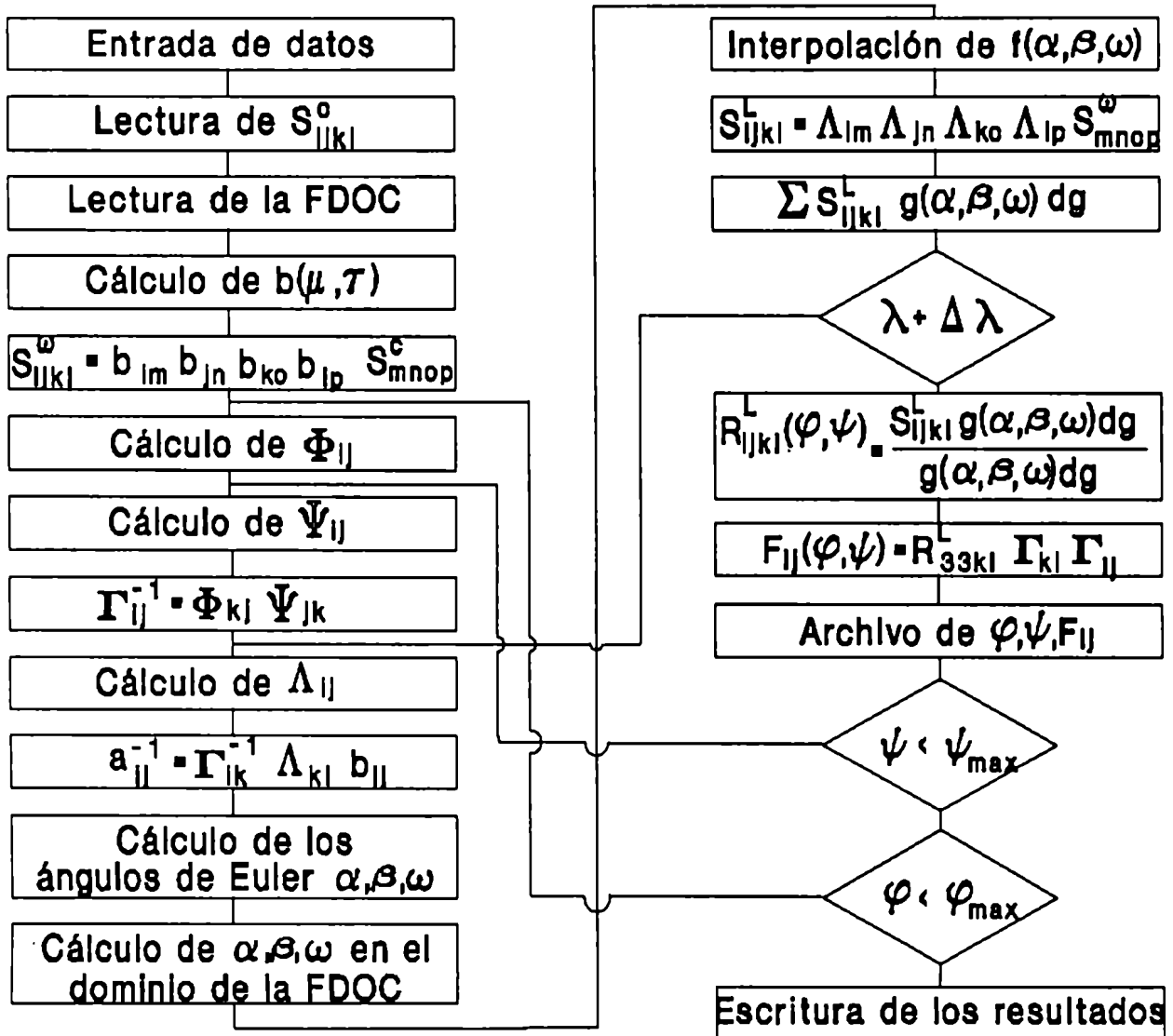
$0 \leq \beta \leq \pi/2$						
$\alpha \backslash \omega$	$0, \pi/3$	$\pi/3, 2\pi/3$	$2\pi/3, \pi$	$\pi, 4\pi/3$	$4\pi/3, 5\pi/3$	$5\pi/3, 2\pi$
$0, \pi/2$	α β ω	α β $\omega + 5\pi/3$	α β $\omega + 4\pi/3$	α β $\omega + \pi$	α β $\omega + 2\pi/3$	α β $\omega + \pi/3$
$\pi/2, \pi$	$\pi - \alpha$ β $\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha$ β $2\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha$ β $\pi - \omega$	$\pi - \alpha$ β $4\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha$ β $5\pi/3 - \omega$	$\pi - \alpha$ β $2\pi - \omega$
$\pi, 3\pi/2$	$\pi + \alpha$ β ω	$\pi + \alpha$ β $\omega + 5\pi/3$	$\pi + \alpha$ β $\omega + 4\pi/3$	$\pi + \alpha$ β $\omega + \pi$	$\pi + \alpha$ β $\omega + 2\pi/3$	$\pi + \alpha$ β $\omega + \pi/3$
$3\pi/2, 2\pi$	$2\pi - \alpha$ β $\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha$ β $2\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha$ β $\pi - \omega$	$2\pi - \alpha$ β $4\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha$ β $5\pi/3 - \omega$	$2\pi - \alpha$ β $2\pi - \omega$

$\pi/2 \leq \beta \leq \pi$						
$\alpha \backslash \omega$	$0, \pi/3$	$\pi/3, 2\pi/3$	$2\pi/3, \pi$	$\pi, 4\pi/3$	$4\pi/3, 5\pi/3$	$5\pi/3, 2\pi$
$0, \pi/2$	α $\pi - \beta$ $\pi/3 - \omega$	α $\pi - \beta$ $2\pi/3 - \omega$	α $\pi - \beta$ $\pi - \omega$	α $\pi - \beta$ $4\pi/3 - \omega$	α $\pi - \beta$ $5\pi/3 - \omega$	α $\pi - \beta$ $2\pi - \omega$
$\pi/2, \pi$	$\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ ω	$\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + 5\pi/3$	$\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + 4\pi/3$	$\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + \pi$	$\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + 2\pi/3$	$\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + \pi/3$
$\pi, 3\pi/2$	$\pi + \alpha$ $\pi - \beta$ $\pi/3 - \omega$	$\pi + \alpha$ $\pi - \beta$ $2\pi/3 - \omega$	$\pi + \alpha$ $\pi - \beta$ $\pi - \omega$	$\pi + \alpha$ $\pi - \beta$ $4\pi/3 - \omega$	$\pi + \alpha$ $\pi - \beta$ $5\pi/3 - \omega$	$\pi + \alpha$ $\pi - \beta$ $2\pi - \omega$
$3\pi/2, 2\pi$	$2\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ ω	$2\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + 5\pi/3$	$2\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + 4\pi/3$	$2\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + \pi$	$2\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + 2\pi/3$	$2\pi - \alpha$ $\pi - \beta$ $\omega + \pi/3$

El esquema del programa utilizado para el cálculo de las CER en materiales hexagonales texturados puede verse en la Figura V.9

FIGURA V.9

Diagrama del programa de cálculo de las CER para materiales hexagonales



5.4.1 APLICACIONES A Zr, Zircaloy-4, Ti Y Zn

Utilizando el programa de cálculo desarrollado, se calcularon los F_{ij} para estos cuatro materiales de estructura cristalina hexagonal, utilizando las FDOC calculadas a partir de las mediciones experimentales detalladas en el Capítulo I y tomando los valores de constantes elásticas de los monocristales dados por Fisher y Renken [51] para el Zr y el Ti y los dados por Ledbetter [57] para el Zn. Para el Zircaloy-4 se tomaron, como en el Capítulo IV, las mismas constantes elásticas que para el Zr.

Para el Zr se utilizó la FDOC correspondiente a la textura de la chapa (textura P.O.) identificándola como textura A. Para el Zircaloy-4 se utilizó la FDOC correspondiente al tubo extrudado, pero referida a ejes rotados de manera tal que la dirección tangencial del tubo coincidiera con la dirección normal a la muestra. A esta textura se la identifica como textura C. Se hizo esta rotación de ejes para poder comparar los resultados calculados con los resultados de las CER medidas experimentalmente, según se detalla en 5.5. En el caso del Ti se utilizó la FDOC correspondiente a la chapa (textura P.O.), identificándola como textura A y la FDOC correspondiente a la textura de tubo extrudado obtenida para el Zircaloy-4, referida al sistema de coordenadas original (eje X_3 normal a la muestra coincidente con la dirección radial del tubo), identificándola como textura B.

En la tabla V.4 se muestran, como ejemplo, los resultados de los F_{ij} en función de $\sin^2\psi$ para el plano $\{104\}$ y tres ángulos φ : $\varphi=0^\circ$, $\varphi=48^\circ$ y $\varphi=90^\circ$ en el caso de la chapa de Zr.

Teniendo en cuenta que en el caso isotrópico, los F_{ij} son lineales en $\sin^2\psi$, para hacer un análisis del grado de anisotropía de los valores de F_{ij} , en función de la dirección de medida, es conveniente tener una representación gráfica de los mismos en función del

$\sin^2\psi$, en particular de F_{11} y F_{22} , que vinculan las tensiones σ_1^M y σ_2^M (caso de tensiones planas) con las deformaciones medidas. En las Figuras V.10, V.11, V.12, V.13 y V.14. se muestran los puntos calculados, utilizando la FDOC, para los cuatro materiales y distintos planos cristalinos. Se grafican también las rectas correspondientes al material isótropo para $\varphi=0^\circ$ y 90° .

TABLA V.4

F_{ij} (10^{-5} Mpa $^{-1}$) vs $\sin^2\psi$ para Zr con textura P.O. Plano {104}

Aproximación de Reuss

$\varphi = 0^\circ$

$\psi(^{\circ})$	$\sin^2\psi$	F_{11}	F_{22}	F_{33}	F_{12}	F_{13}	F_{23}
-42.1	0.45	0.2906	-0.3025	0.3352	0.0000	-0.6419	0.0000
-36.3	0.35	0.1795	-0.3045	0.4482		-0.6286	
-30.0	0.25	0.0623	-0.3109	0.5718		-0.5881	
-22.8	0.15	-0.0681	-0.3189	0.7103		-0.5044	
-12.9	0.05	-0.2157	-0.3303	0.8692		-0.3183	
0.0	0.00	-0.2934	-0.3371	0.9537		0.0000	
18.4	0.10	-0.1397	-0.3239	0.7868		0.4326	
26.6	0.20	-0.0010	-0.3149	0.6390		0.5534	
33.2	0.30	0.1233	-0.3075	0.5074		0.6127	
39.2	0.40	0.2354	-0.3028	0.3906		0.6381	
45.0	0.50	0.3488	-0.3044	0.2788		0.6400	

$\varphi = 48$

$\psi(^{\circ})$	$\sin^2\psi$	F_{11}	F_{22}	F_{33}	F_{12}	F_{13}	F_{23}
-42.1	0.45	0.0053	-0.0168	0.3348	0.3215	-0.4748	-0.4230
-36.3	0.35	-0.0557	-0.0917	0.4705	0.2561	-0.4673	-0.4047
-30.0	0.25	-0.1232	-0.1673	0.6137	0.1854	-0.4302	-0.3650
-22.8	0.15	-0.1932	-0.2390	0.7554	0.1124	-0.3556	-0.2971
-12.9	0.05	-0.2614	-0.3057	0.8903	0.0371	-0.2158	-0.1774
0.0	0.00	-0.2939	-0.3366	0.9537	0.0000	0.0000	0.0000
18.4	0.10	-0.2276	-0.2730	0.8238	0.0751	0.2987	0.2472
26.6	0.20	-0.1582	-0.2036	0.6850	0.1493	0.3984	0.3354
33.2	0.30	-0.0887	-0.1295	0.5415	0.2213	0.4530	0.3879
39.2	0.40	-0.0244	-0.0540	0.4016	0.2894	0.4740	0.4164
45.0	0.50	0.0339	0.0195	0.2698	0.3525	0.4708	0.4247

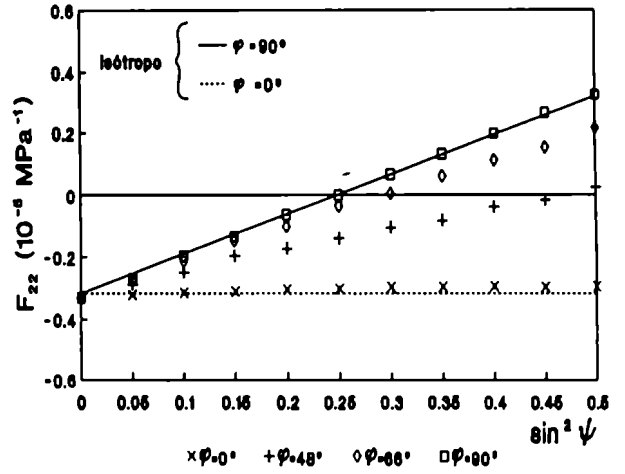
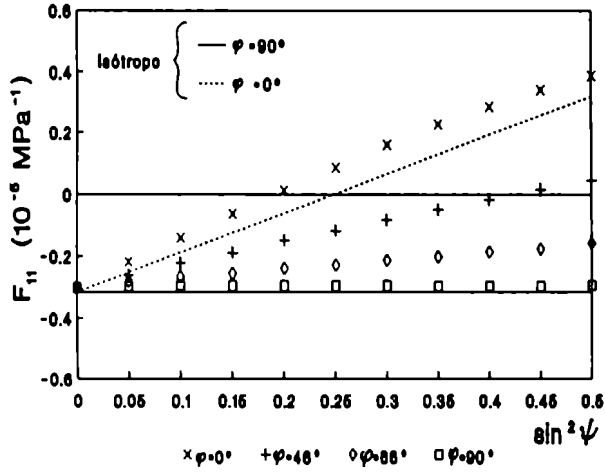
 $\varphi = 90^{\circ}$

$\psi(^{\circ})$	$\sin^2\psi$	F_{11}	F_{22}	F_{33}	F_{12}	F_{13}	F_{23}
-42.1	0.45	0.3010	0.2818	0.3423	0.0000	0.0000	-0.6418
-36.3	0.35	-0.3015	0.1246	0.5001			-0.6133
-30.0	0.25	-0.3000	-0.0315	0.6547			-0.5434
-22.8	0.15	-0.2974	-0.1735	0.7941			-0.4268
-12.9	0.05	-0.2965	-0.2869	0.9067			-0.2449
0.0	0.00	-0.2936	-0.3369	0.9537			-0.0022
18.4	0.10	-0.2969	-0.2340	0.8541			0.3474
26.6	0.20	-0.2985	-0.1055	0.7272			0.4913
33.2	0.30	-0.3010	0.0458	0.5785			0.5838
39.2	0.40	-0.3015	0.2037	0.4210			0.6324
45.0	0.50	-0.3002	0.3575	0.2659			0.6420

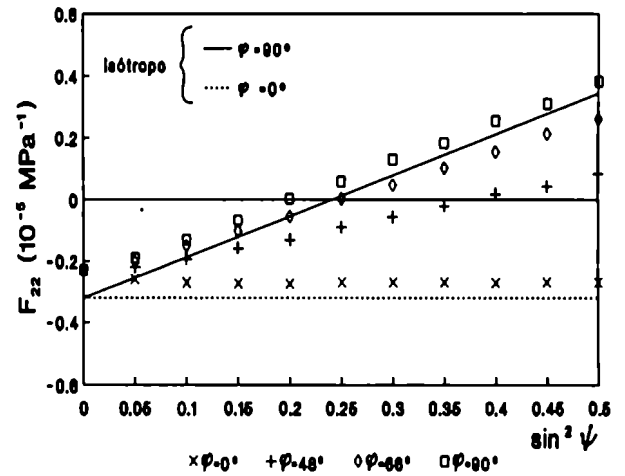
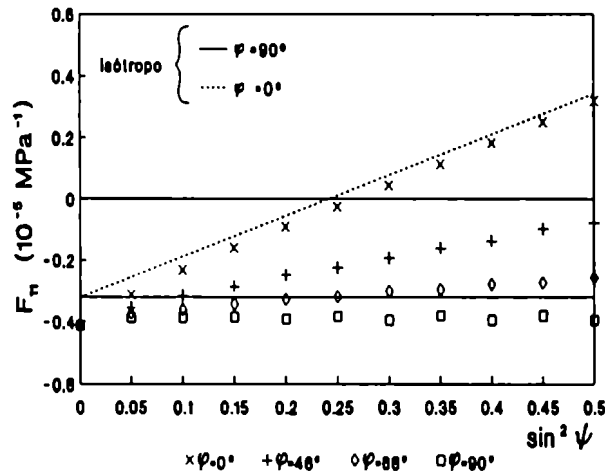
FIGURA V.10

F_{ij} vs $\sin^2\psi$. Zyrcaoy 4. Textura C

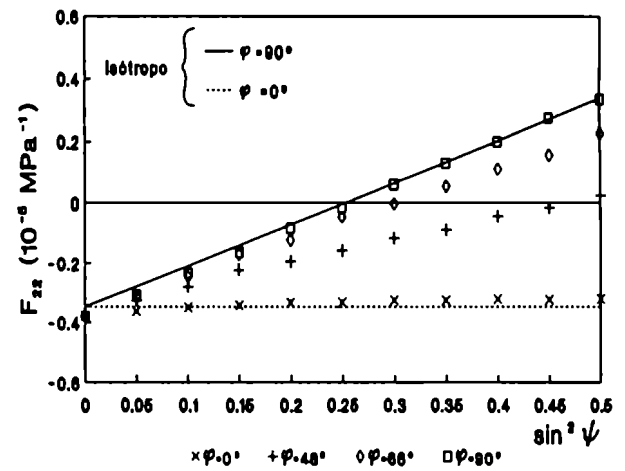
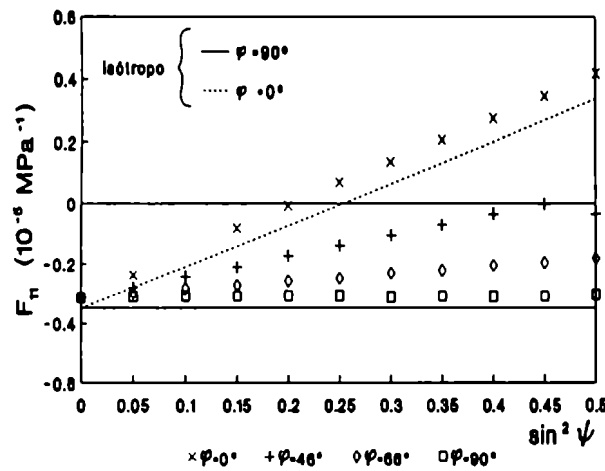
Plano {104}



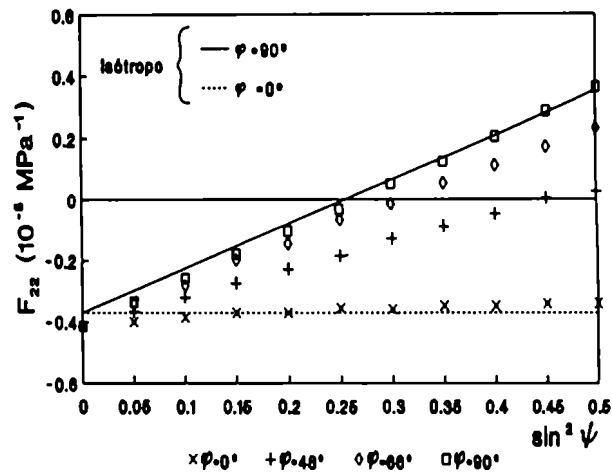
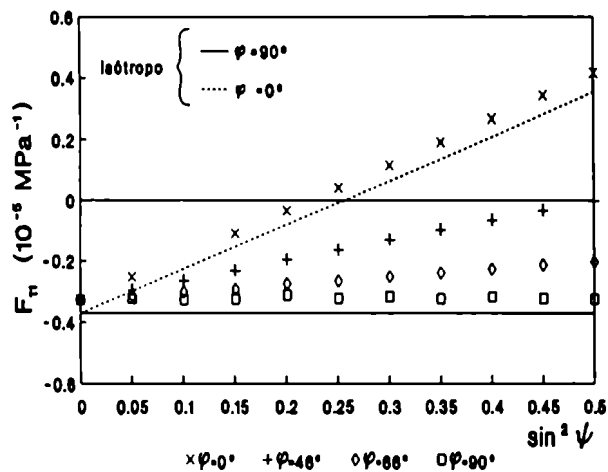
Plano {200}



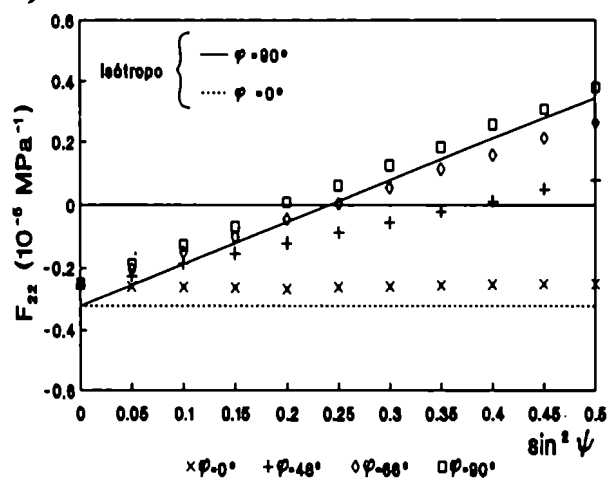
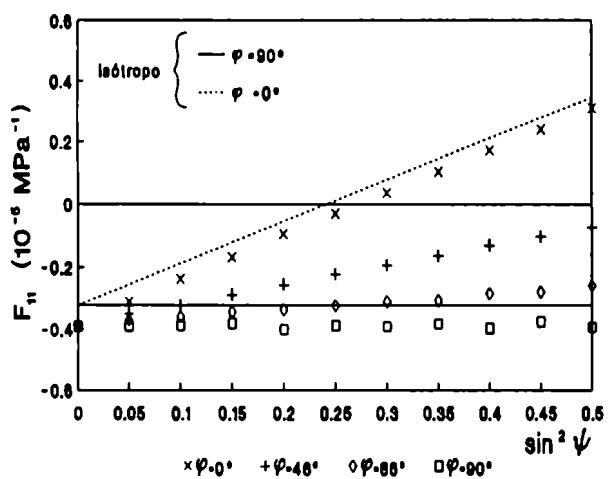
Plano {103}



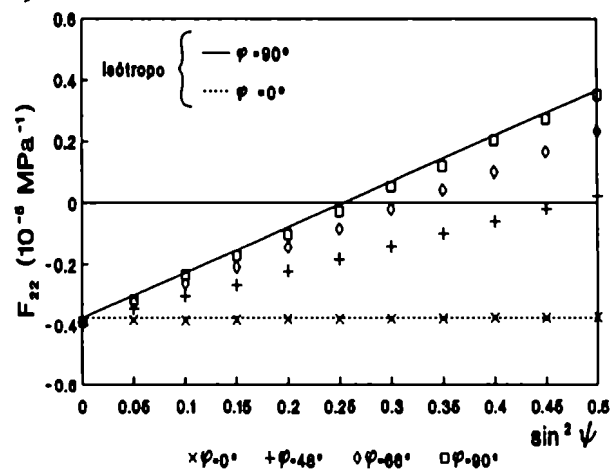
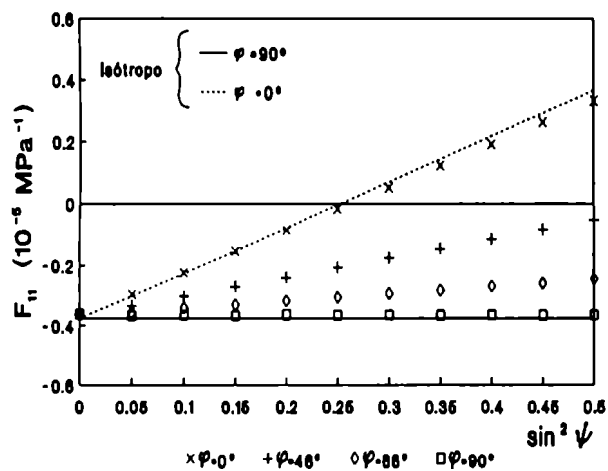
Plano {114}



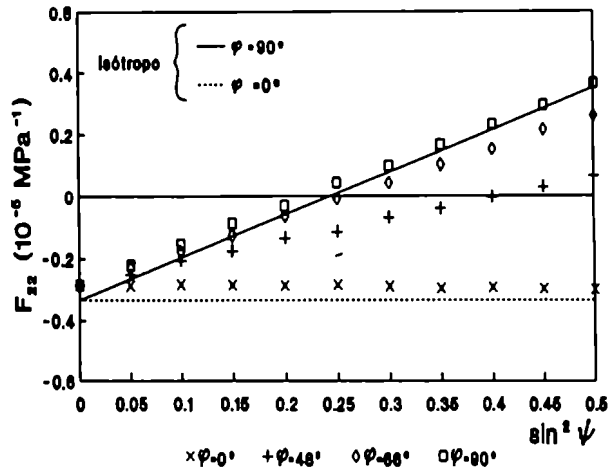
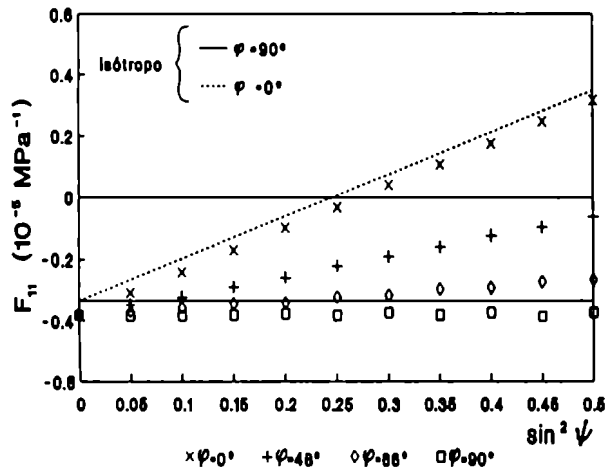
Plano {220}



Plano {202}



Plano {211}



Plano {203}

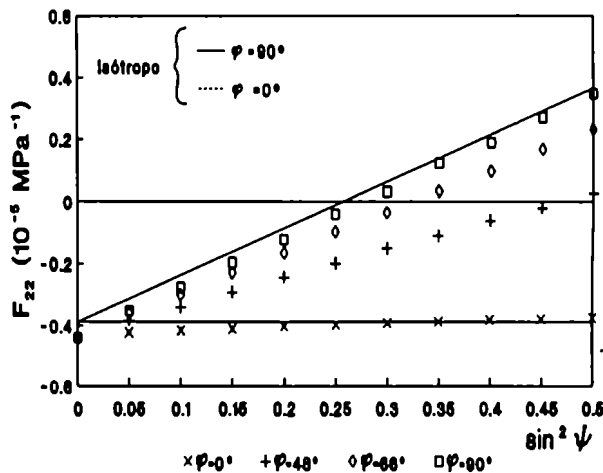
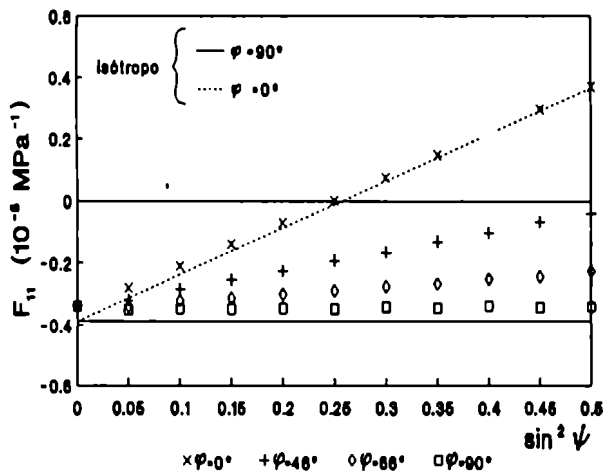
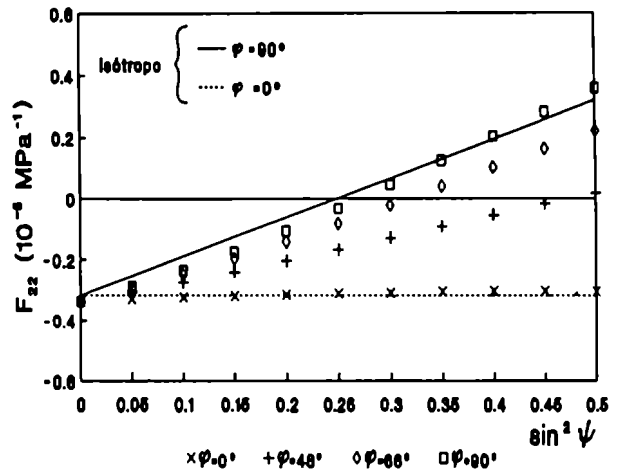
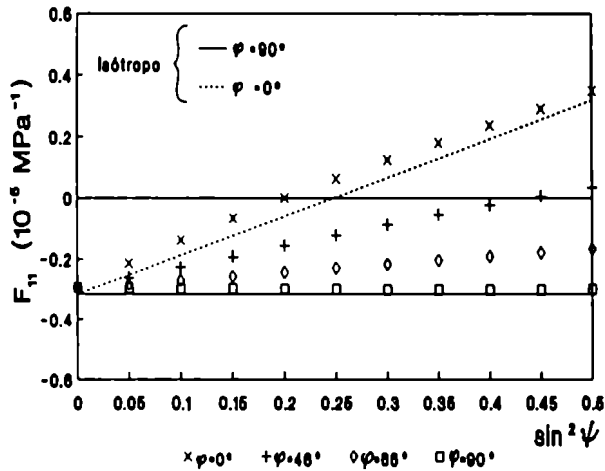


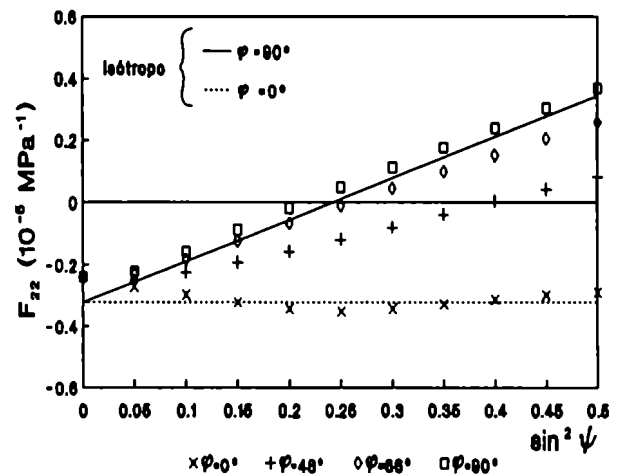
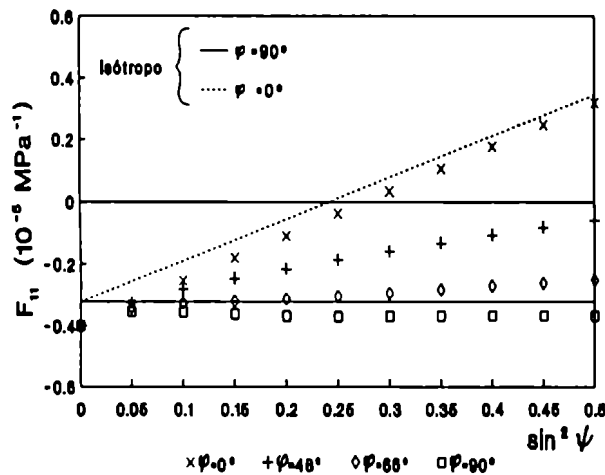
FIGURA V.11

 F_{ij} vs $\sin^2\psi$. Zr. Textura A (P.O.)

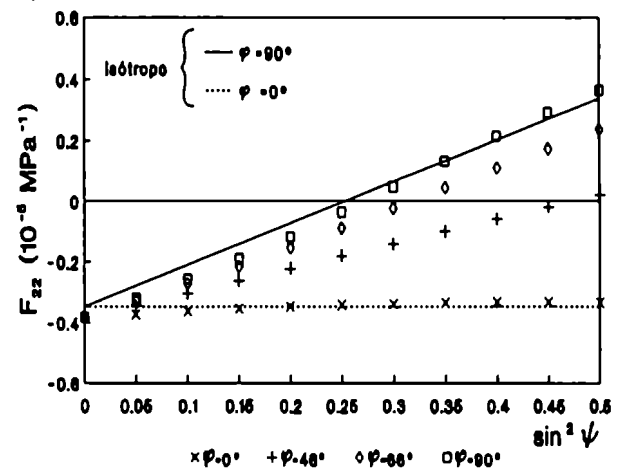
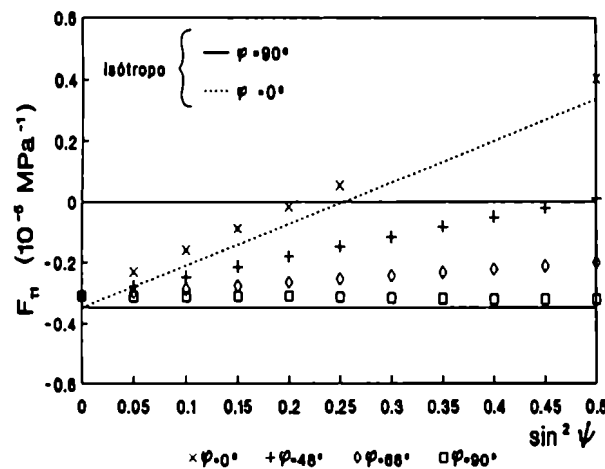
Plano {104}



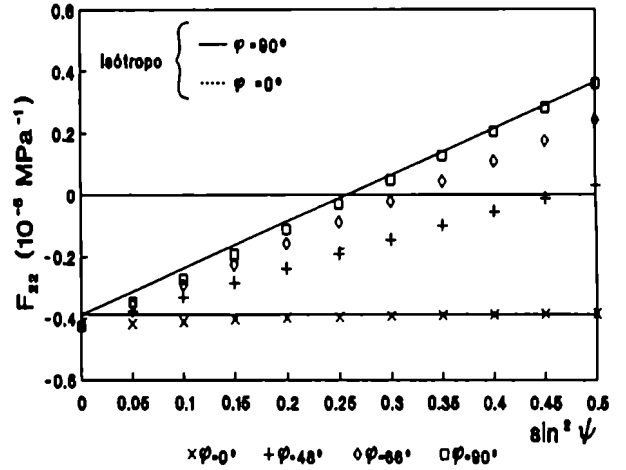
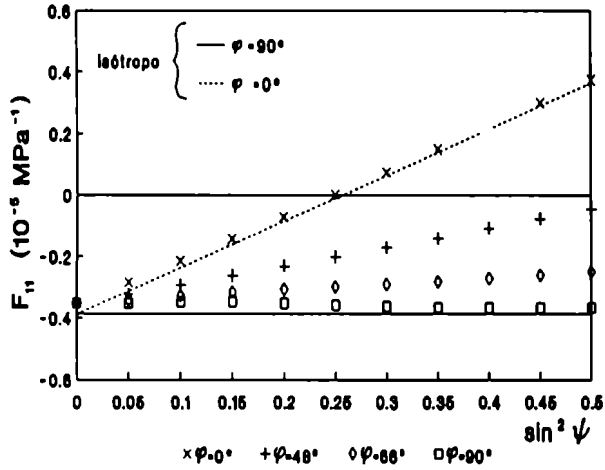
Plano {200}



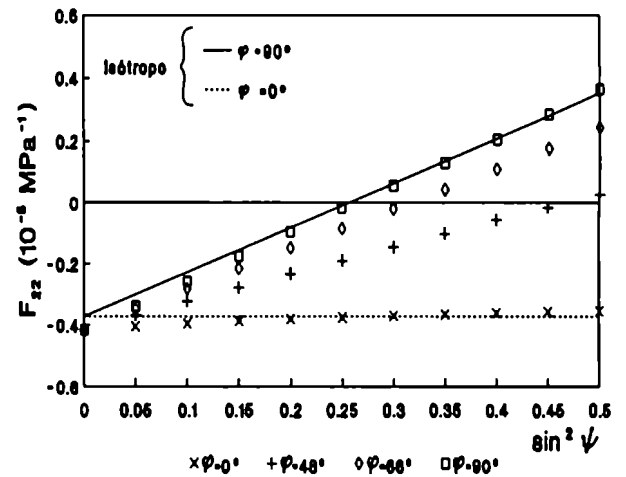
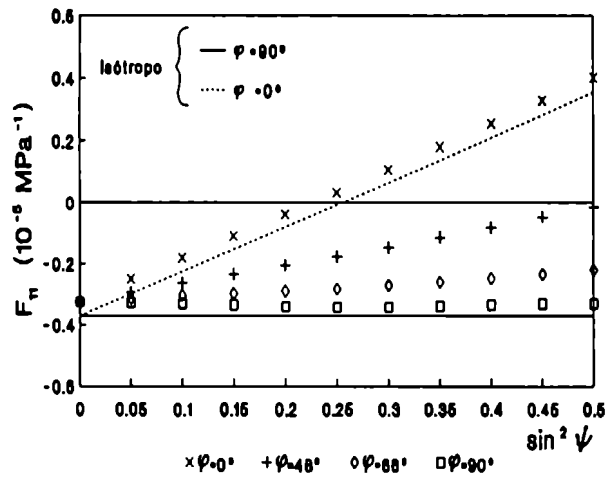
Plano {103}



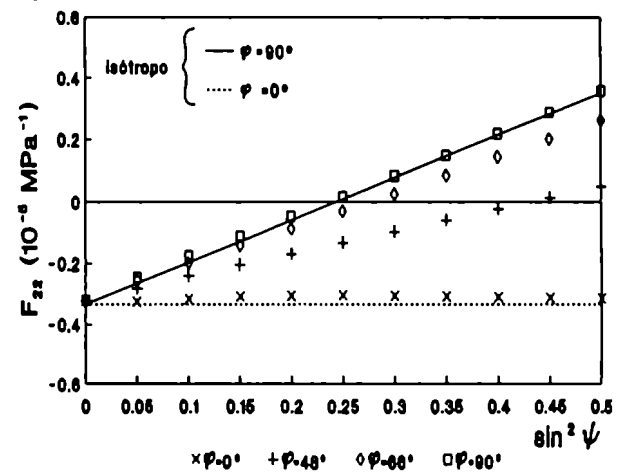
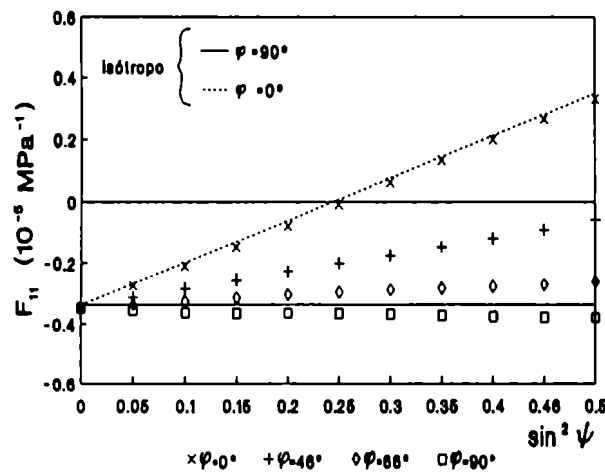
Plano {203}



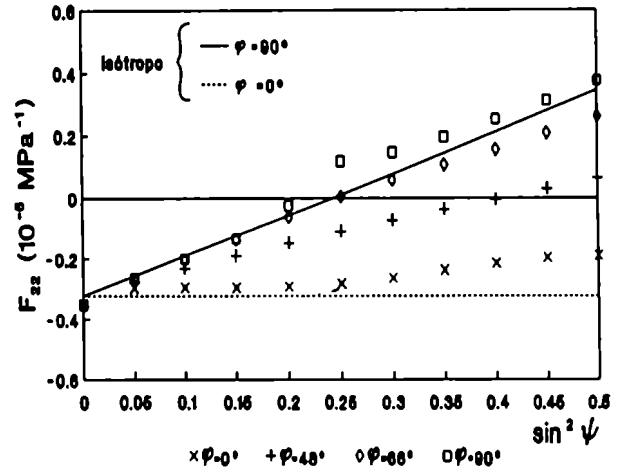
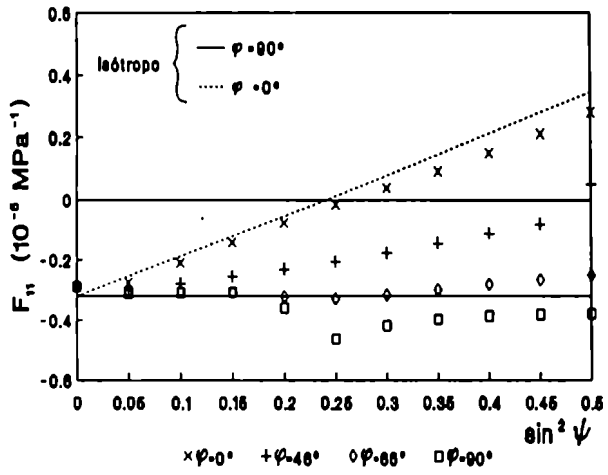
Plano {114}



Plano {211}



Plano {220}



Plano {202}

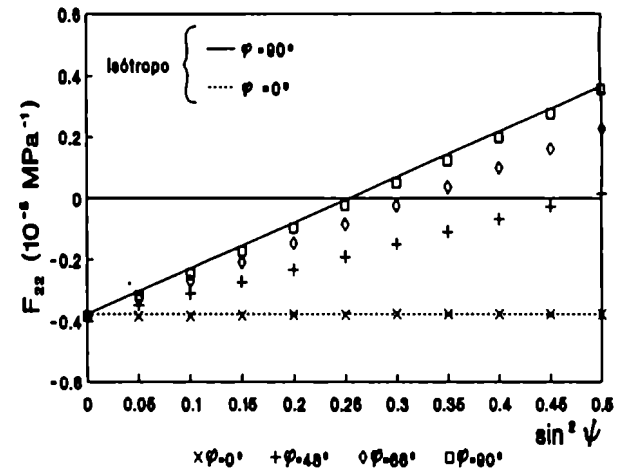
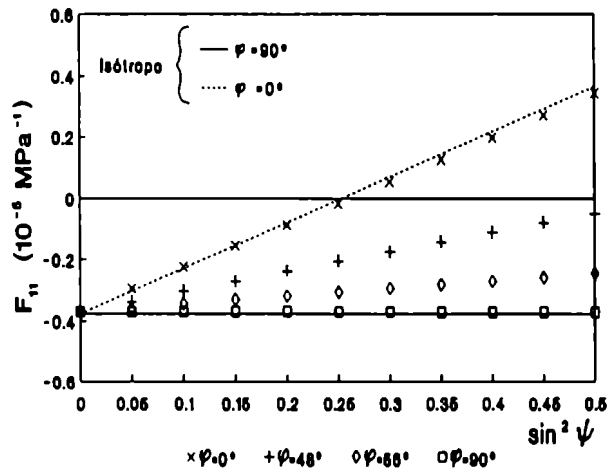
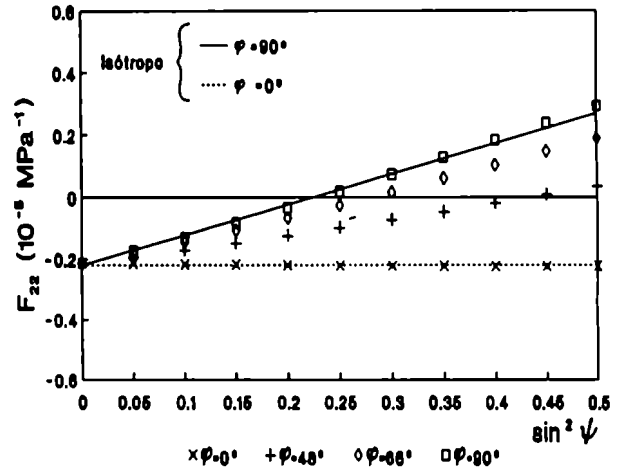
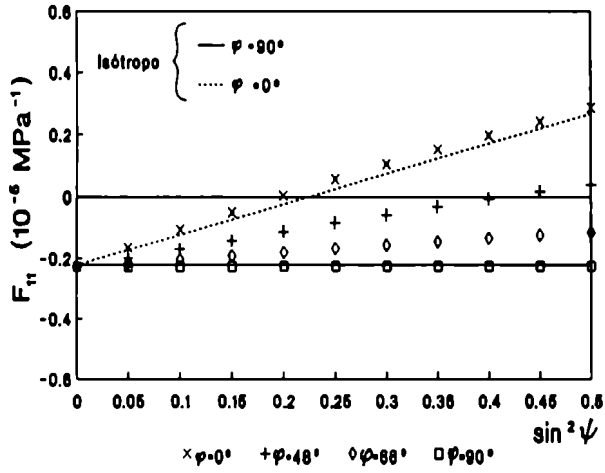


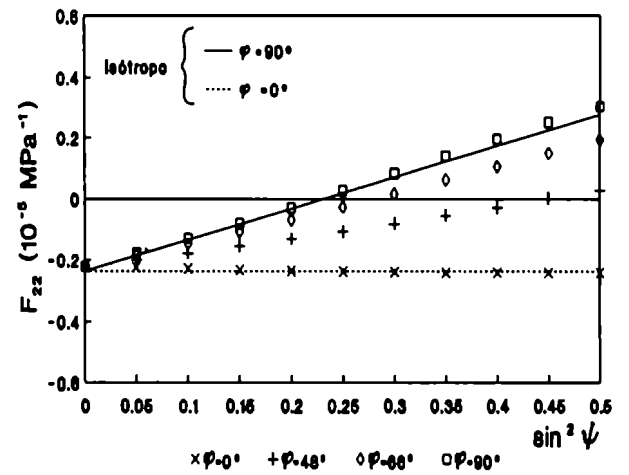
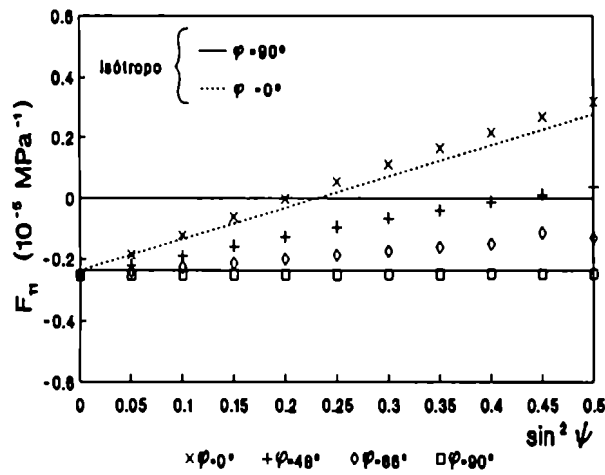
FIGURA V.12

 F_{ij} vs $\sin^2 \psi$. Ti. Textura A (P.O.)

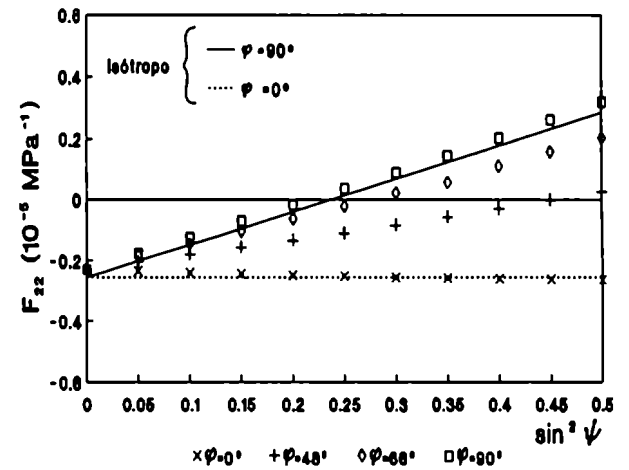
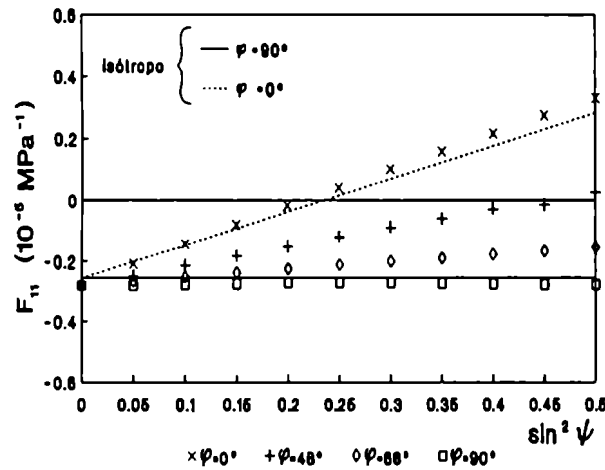
Plano {104}



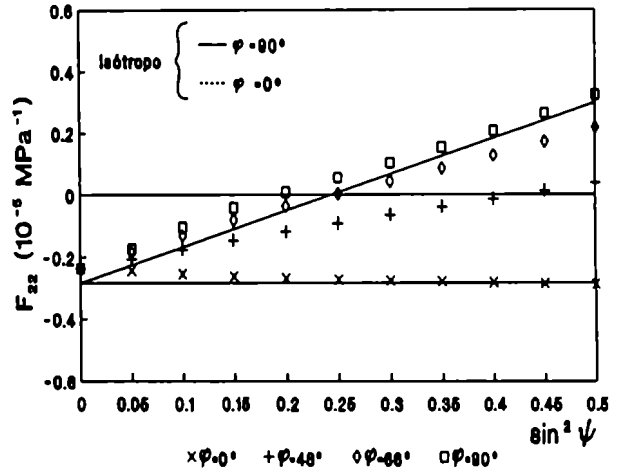
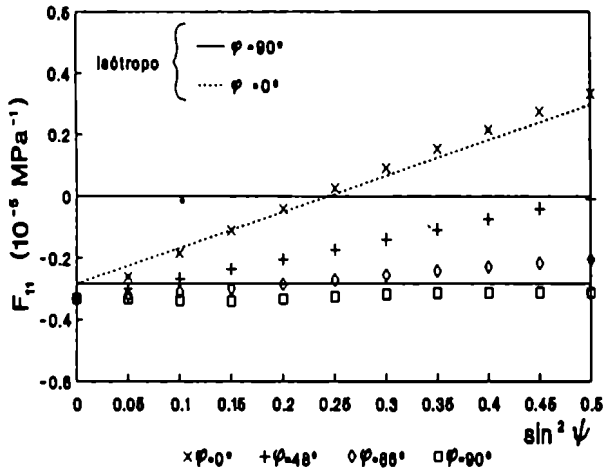
Plano {103}



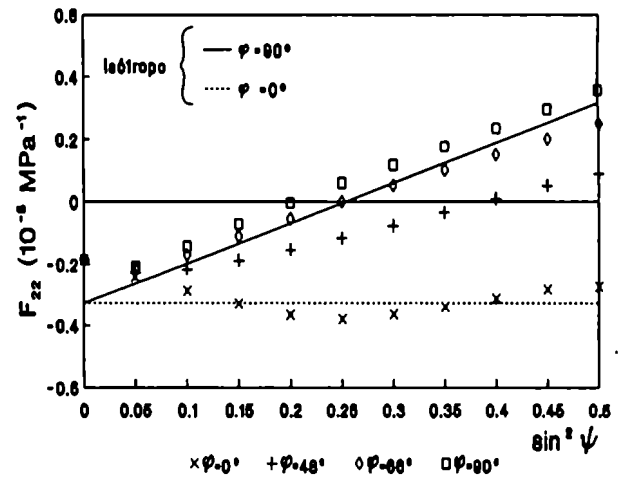
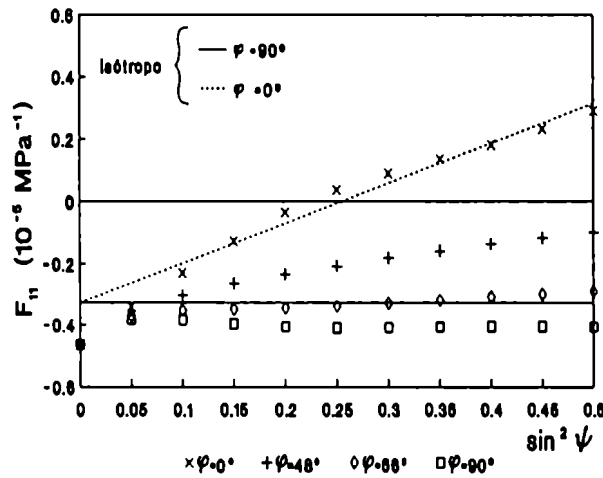
Plano {114}



Plano {203}



Plano {200}



Plano {123}

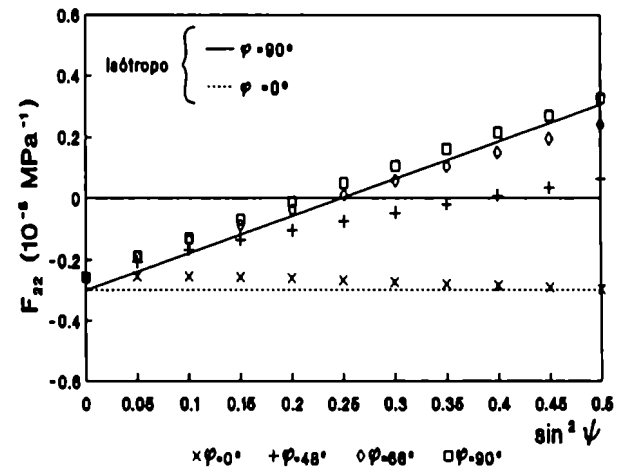
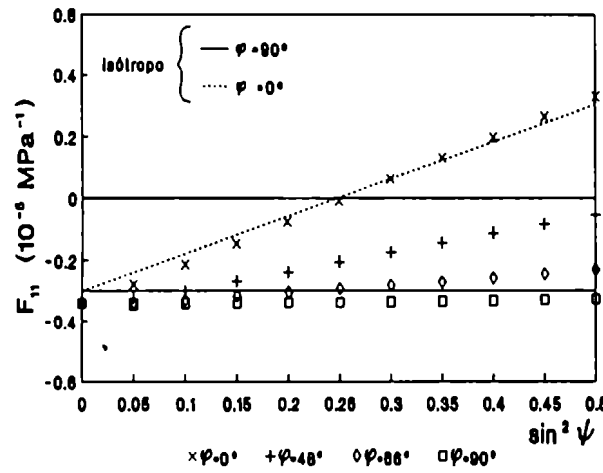
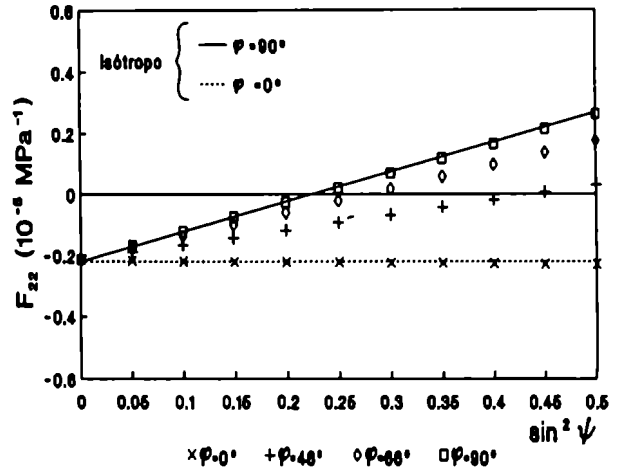
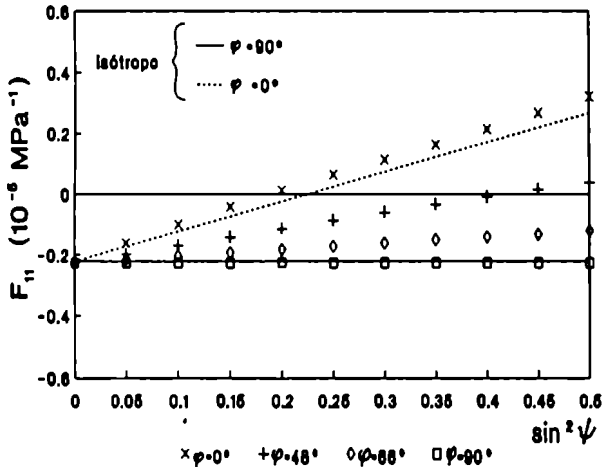


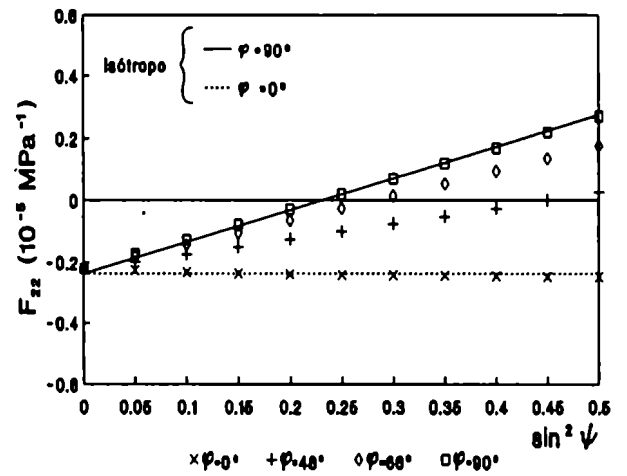
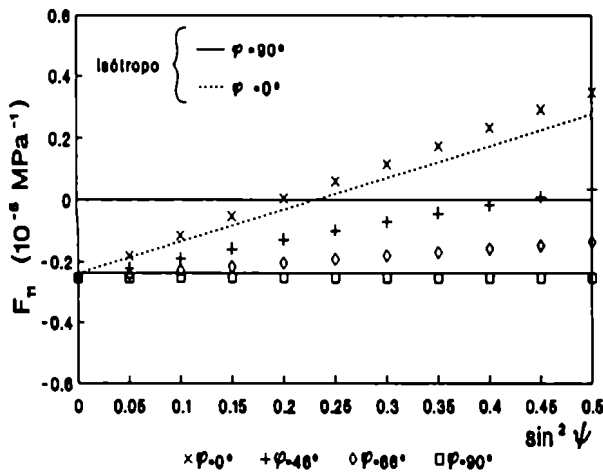
FIGURA V.13

F_{ij} vs $\sin^2\psi$. Ti. Textura B

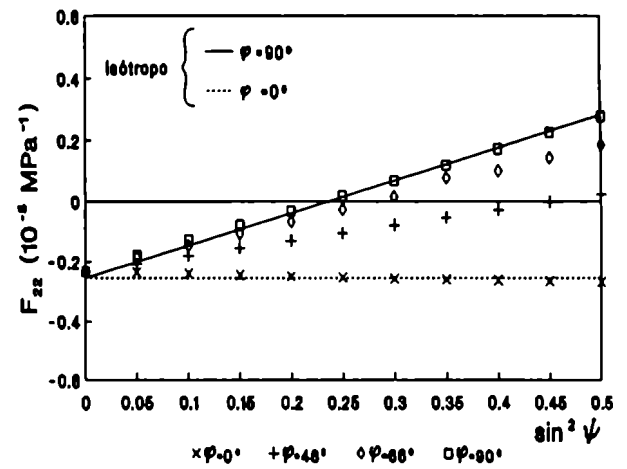
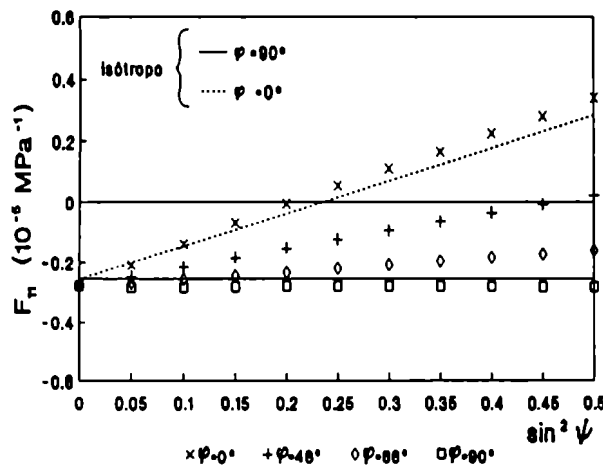
Plano {104}



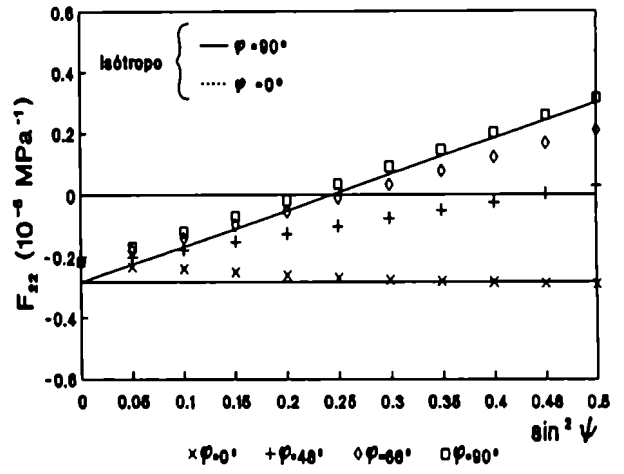
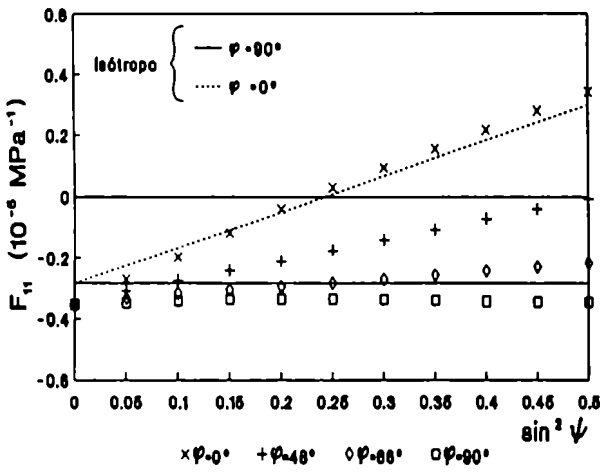
Plano {103}



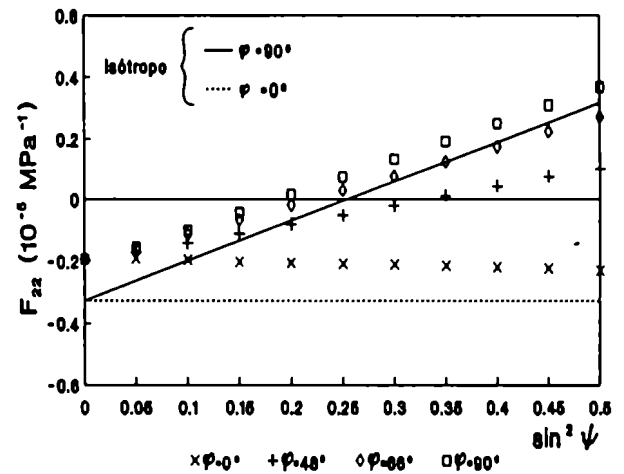
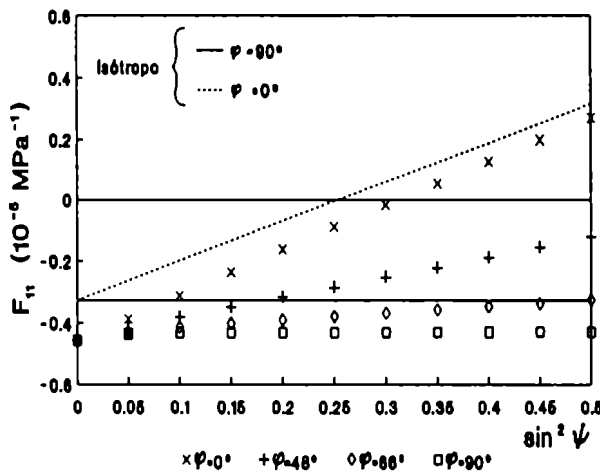
Plano {114}



Plano {203}



Plano {200}



Plano {123}

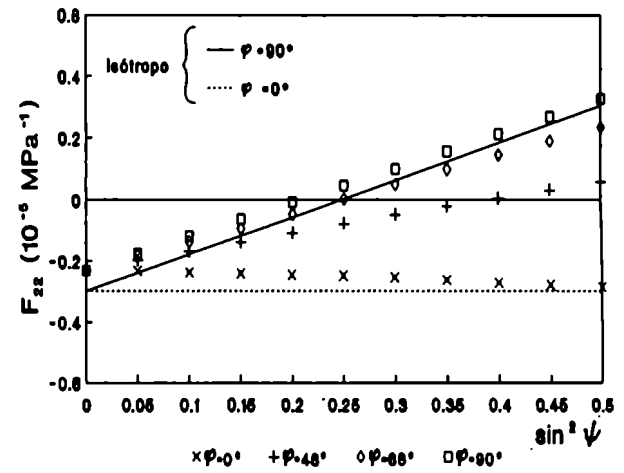
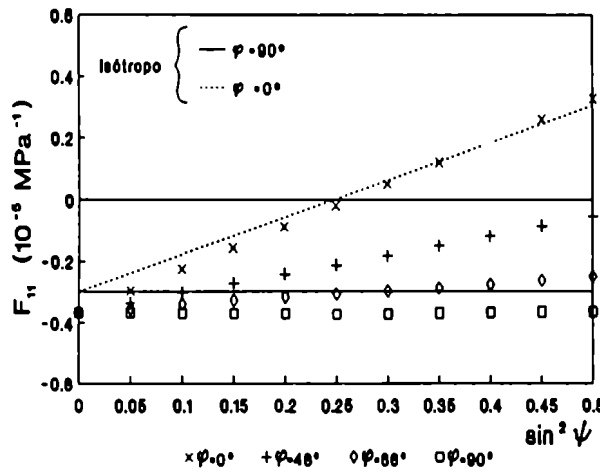
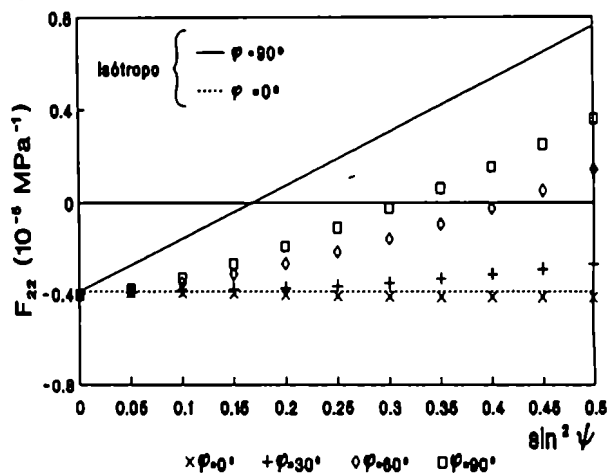
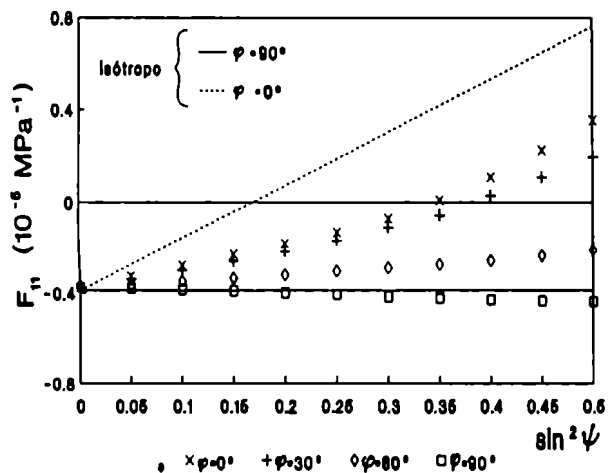


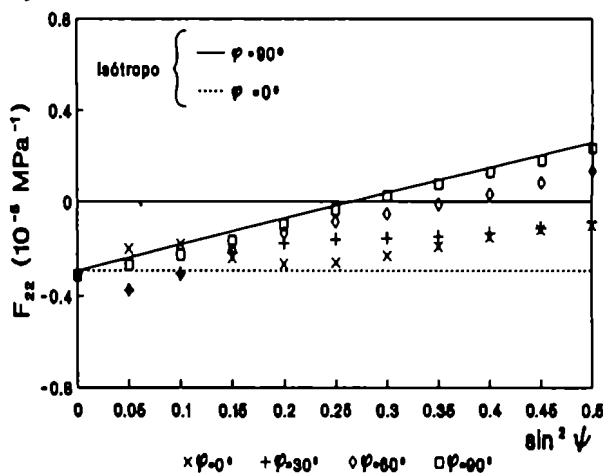
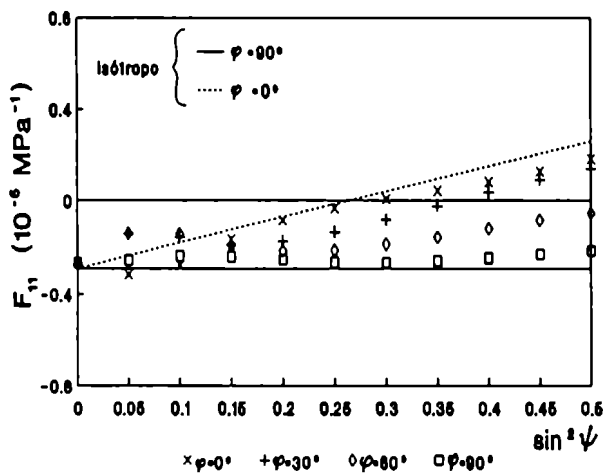
FIGURA V.14

F_{ij} vs $\sin^2\psi$. Zn. Textura D (P.C.)

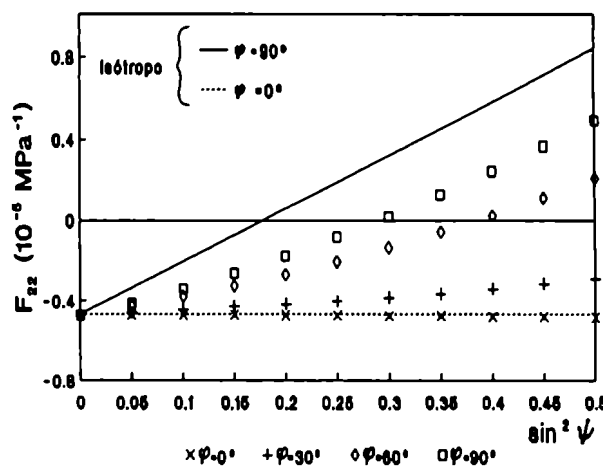
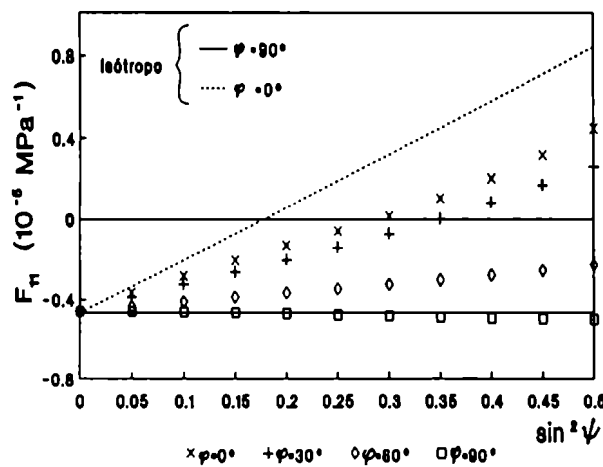
Plano {104}



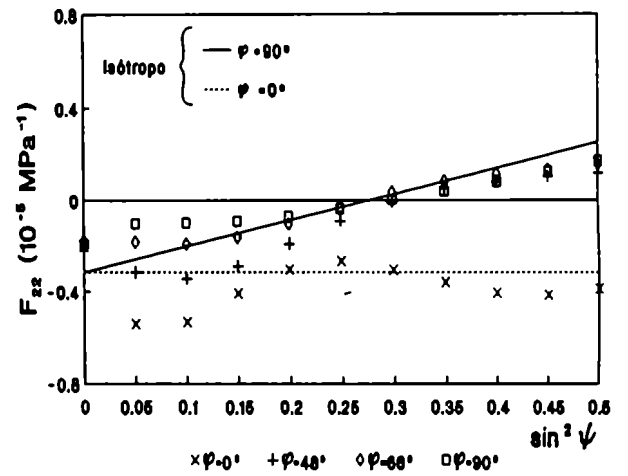
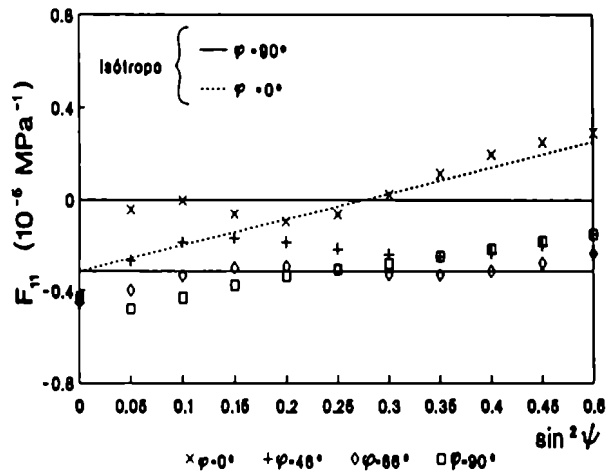
Plano {211}



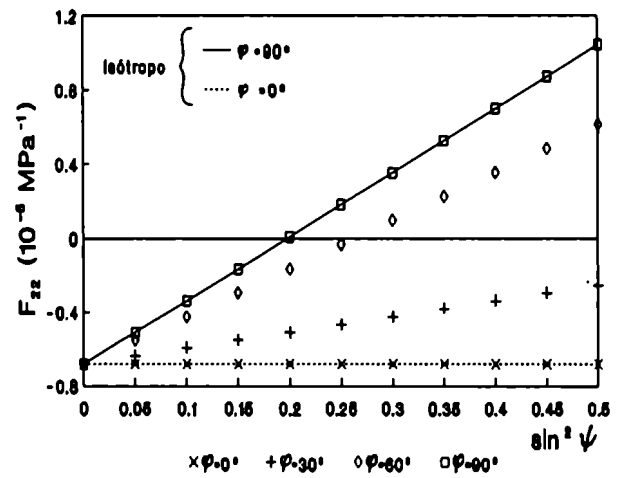
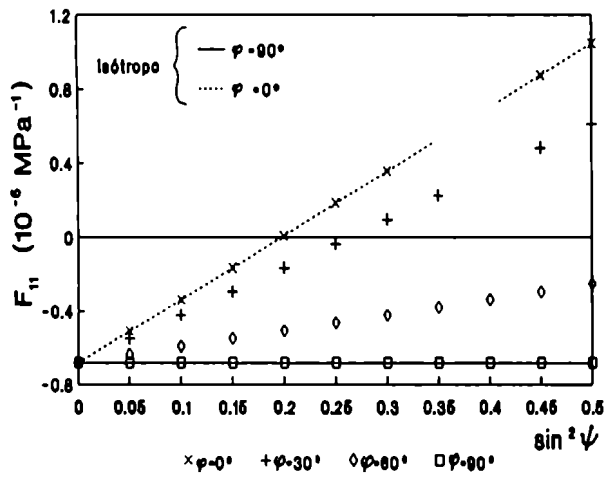
Plano {105}



Plano {100}



Plano {006}



5.4.2 ANÁLISIS DEL APARTAMIENTO DEL COMPORTAMIENTO ISOTRÓPICO EN MATERIALES HEXAGONALES EN LA APROXIMACIÓN DE REUSS.

Además de la textura, los factores que intervienen en el cálculo de las CER al utilizar la aproximación de Reuss son:

- a) Constantes elásticas del monocristal
- b) Anisotropía de las constantes elásticas en el plano difractante ($S_{3ij}^L(h,k,l,\lambda)$)

Es evidente, analizando la ecuación (5.22), que si para el plano $\{hkl\}$ difractante las constantes elásticas en el sistema X^u , que intervienen en el cálculo de las CER, no dependen del ángulo λ (es decir, la normal al plano es un eje de simetría de revolución para las constantes elásticas que intervienen en el cálculo de las CER) la textura no tendrá influencia en el cálculo de las CER. En el monocristal hexagonal el único plano con esta propiedad es el $\{002\}$. La rotación μ alrededor del eje c no cambia las constantes elásticas del cristal. La anisotropía de las constantes elásticas del cristal respecto de la rotación λ está determinada solamente por el ángulo τ (ángulo entre la normal al plano y el eje c).

En las figuras V.15, V.16 y V.17 se grafican, para el Zr, Zn y Ti, las constantes S_{3311}^L , S_{3313}^L , S_{3312}^L , en función de λ para planos $\{hkl\}$ cuyas normales forman distintos ángulos τ con el eje c . Las otras constantes $S_{ij\mu}^L$, cuyo promedio, calculado usando como peso la FDOC, figuran en las expresiones de los F_{ij} (ver A1.5) son S_{3333}^L , que es independiente del ángulo λ y S_{3323}^L cuyo gráfico es el mismo que el de S_{3323}^L desplazado en 90° en λ .

FIGURA V.15

S_{3311}^L en función de λ para planos cristalográficos cuya normal
forma un ángulo τ con el eje c

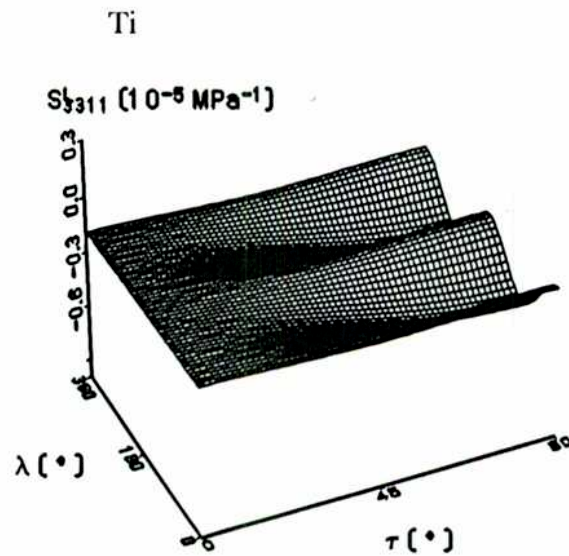
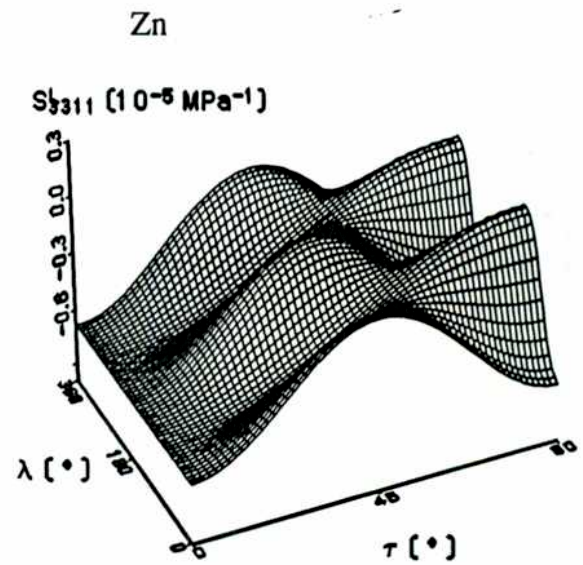
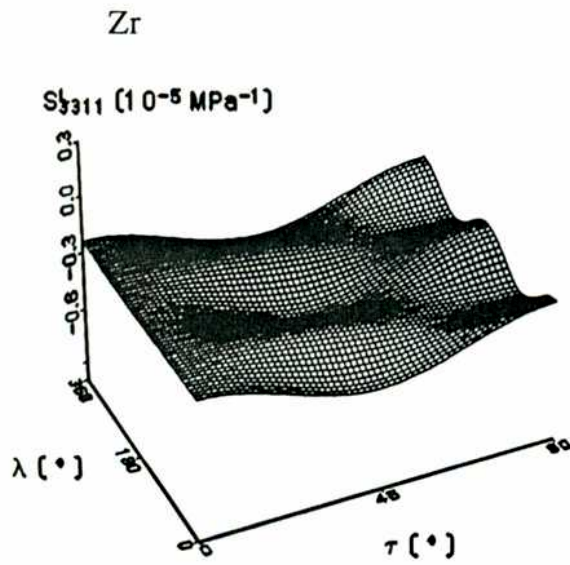


FIGURA V.17

S_{3313}^L en función de λ para planos cristalográficos cuya normal
forma un ángulo τ con el eje c

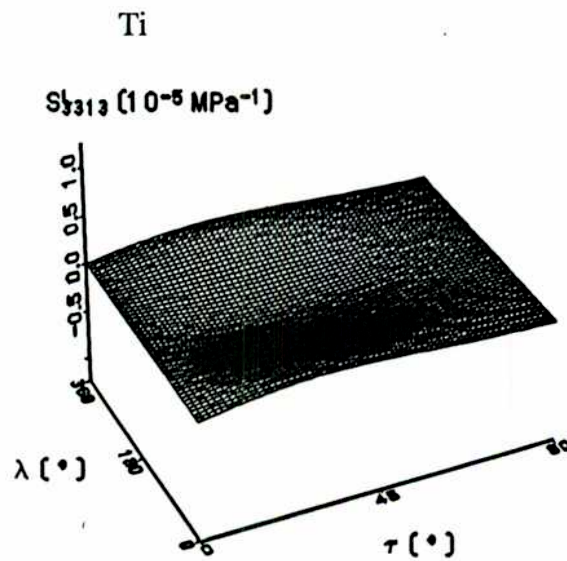
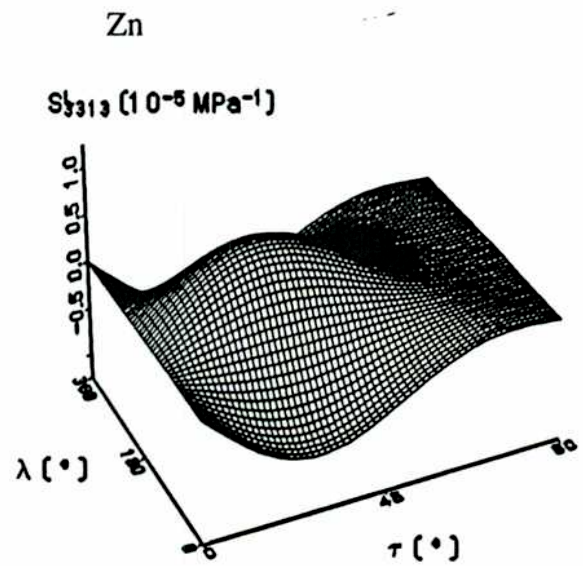
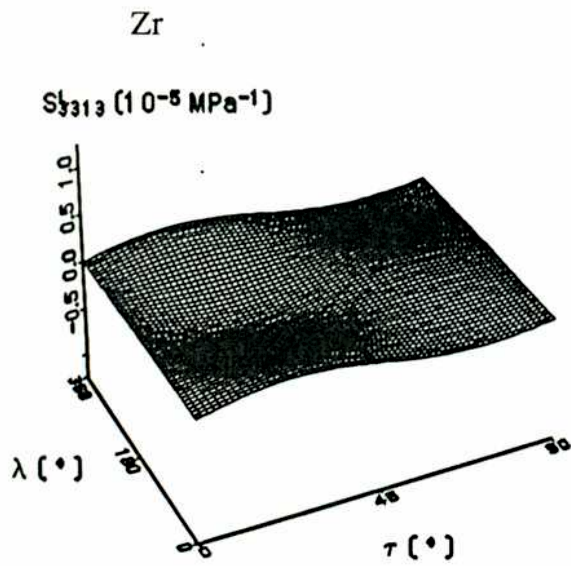
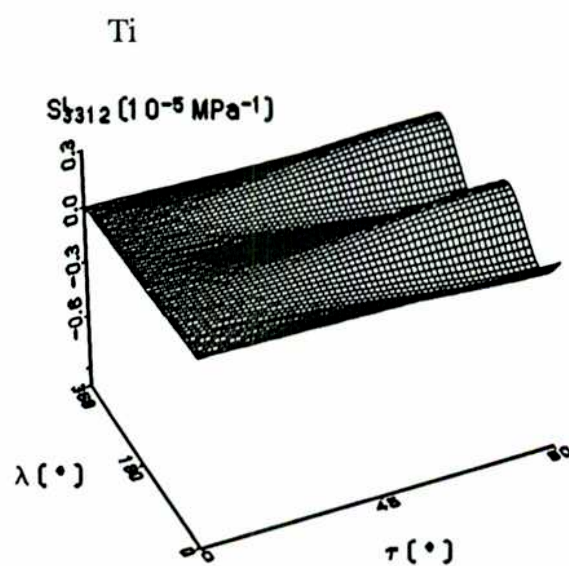
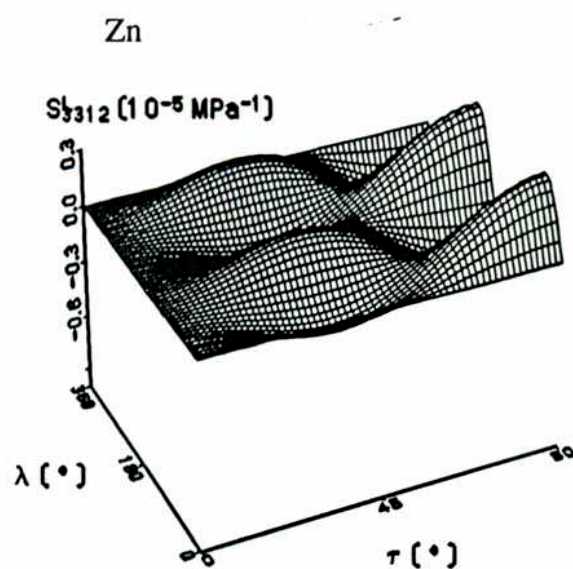
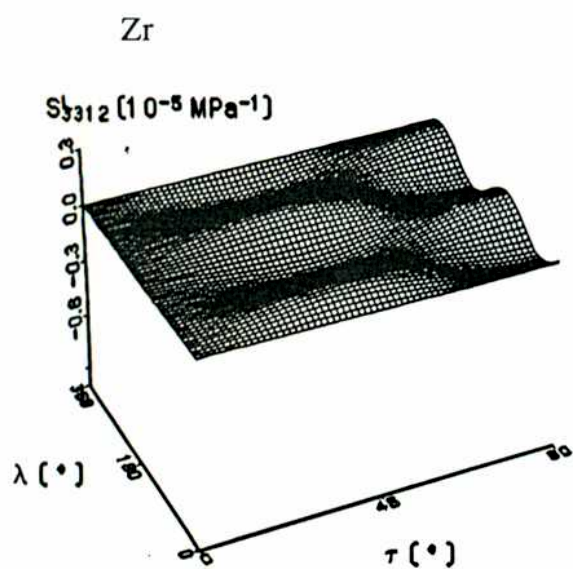


FIGURA V.16

S_{3312}^L en función de λ para planos cristalográficos cuya normal

forma un ángulo τ con el eje c



En las figuras V.18, V.19 y V.20 se grafican los S_{33ij}^L para los tres materiales (Zr, Zn y Ti) y para los planos que presentan una mayor variación de las constantes en función de λ .

FIGURA V.18

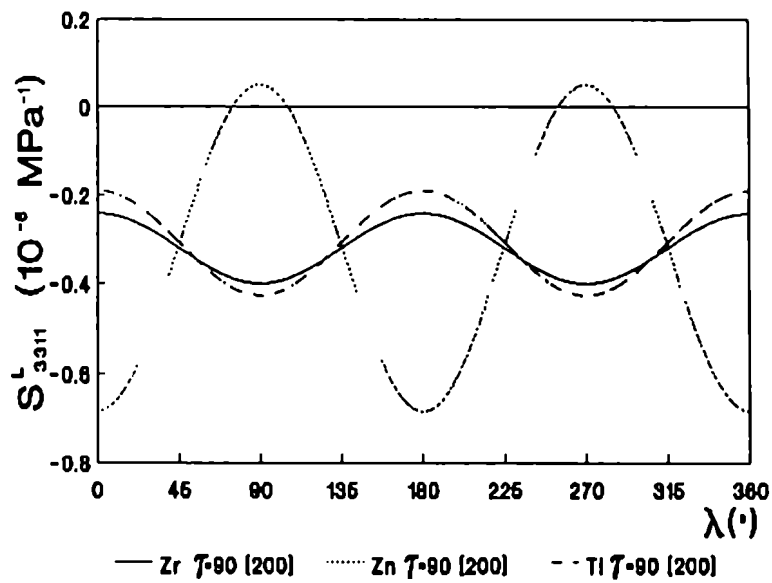
 S_{3311}^L vs λ 

FIGURA V.19

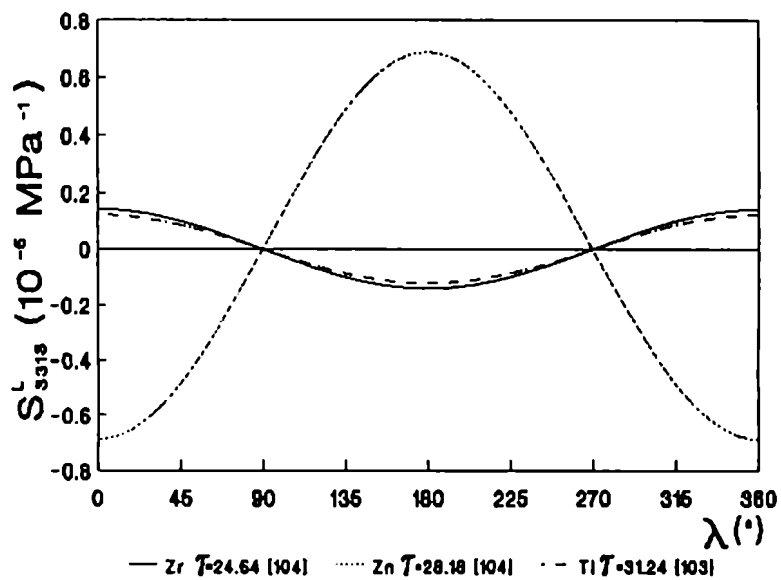
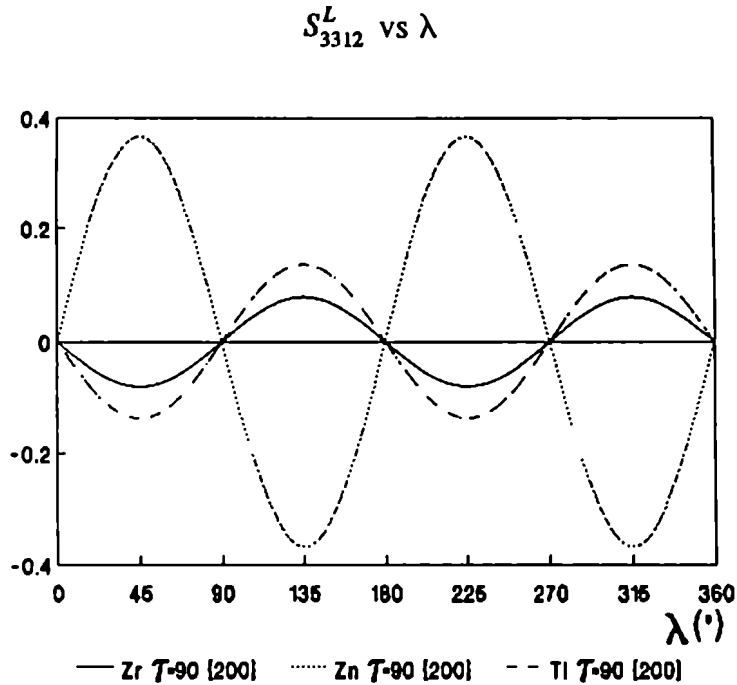
 S_{3313}^L vs λ 

FIGURA V.20



Es evidente que la influencia de la textura será mayor en los materiales que, como el Zn, presentan una mayor variación de sus constantes elásticas en el plano difractante elegido. Para un mismo material, además del plano $\{002\}$ que es "isótropo", en los materiales hexagonales, existen planos en los cuales la variación de las constantes es relativamente pequeña, de forma tal que su comportamiento, desde el punto de vista radiocristalográfico, podría asimilarse al caso isótropo.

Los valores calculados de los F_{ij} vs $\sin^2\psi$ indican que se pueden separar en dos grupos:

- 1) Las curvas, aunque distintas de las correspondientes al caso isótropo, pueden ser aproximadas por líneas rectas. En este caso las CER pueden ser tratadas como las

correspondientes a un material isótropo. Las dos constantes que intervienen en este caso $\frac{1}{2}S_2$ y S_1 están relacionadas con los F_{ij} a través de las ecuaciones

$$F_{11} = \left[\frac{1}{2}S_2 \right]^{\ast 1} \sin^2 \psi + [S_1]^{\ast 1} \quad \text{en } \varphi = 0^\circ$$

$$F_{22} = \left[\frac{1}{2}S_2 \right]^{\ast 2} \sin^2 \psi + [S_1]^{\ast 2} \quad \text{en } \varphi = 90^\circ$$

donde $\ast 1$, $\ast 2$ indica que no son las constantes isótropas, sino las correspondientes a la "aproximación isótropa".

- 2) Las curvas se apartan del comportamiento isotrópico y los valores de las tensiones residuales deben calcularse a partir de un ajuste por cuadrados mínimos, utilizando los F_{ij} calculados, de los valores medidos de deformación para distintos ángulos φ , ψ .

Los planos difractantes que interesan, desde el punto de vista experimental, son aquellos que para una longitud de onda de rayos X dada (elegida de modo que la radiación de fluorescencia sea baja para ese material), presentan un pico de difracción a alto ángulo ($2\theta \geq 140^\circ$) con una intensidad relativa alta. En la Tabla V.5 figuran los planos que cumplen con esta condición para los tres materiales, junto con la radiación de rayos X y el ángulo de Bragg correspondiente.

TABLA V.5

Planos {hkl}, radiación de rayos X y Angulo de Bragg para la medición de T.R.

{hkl}	Zr	Ti	Zn
{104}	Cr-K α 2 θ =156.9°	Mn-K α 2 θ =162.5°	Mn-K α 2 θ =149.5°
{105}			Co-K α 2 θ =159.7°
{114}	Fe-K α 2 θ =148.5°	Co-K α 2 θ =155.0°	
{203}	Mn-K α 2 θ =151.8°	Fe-K α 2 θ =157.0°	
{123}		Cu-K α 2 θ =139.7°	
{200}	Ti-K α 2 θ =158.8°		
{006}	Ni-K α 2 θ =151.7		Cu-K α 2 θ =138.5°
{211}	Fe-K α 2 θ =138.6		Ni-K α 2 θ =159.0°
{300}	Co-K α 2 θ =147.5°		Ni-K α 2 θ =153.9°
{220}	Cu-K α 2 θ =145.36°		
{103}	Ti-K α 2 θ =140.8°		

En base a los datos de la tabla V.5 y los gráficos de las figuras V.10, V.11 y V.12 se calcularon las CER en la "aproximación isotrópica" para los planos que muestran un comportamiento lineal (coeficiente de correlación $r > 0.99$) (Tablas V.6, V.7 y V.8)

TABLA V.6

Zr. CER (10^{-5} Mpa $^{-1}$) para el caso isótropo y la "aproximación isótropa".

{hkl}	CER	Textura A		Textura C		Isótropo
		$\varphi=0^\circ$	$\varphi=90^\circ$	$\varphi=0^\circ$	$\varphi=90^\circ$	
{104}	S_1	-0.270	-0.369	-0.279	-0.330	-0.315
	$\frac{1}{2}S_2$	1.269	1.419	1.394	1.317	1.269
	r	0.9979	0.9975	0.9975	0.9999	
{103}	S_1	-0.304	-0.404	-0.306	-0.376	-0.346
	$\frac{1}{2}S_2$	1.419	1.525	1.456	1.437	1.366
	r	0.9999	0.9987	0.9997	0.9998	
{203}	S_1	-0.359	-0.427	-0.350	-0.433	-0.387
	$\frac{1}{2}S_2$	1.452	1.576	1.424	1.559	1.503
	r	0.9998	0.9999	0.9997	0.9999	
{114}	S_1	-0.328	-0.412	-0.331	-0.415	-0.371
	$\frac{1}{2}S_2$	1.450	1.552	1.490	1.552	1.448
	r	0.9999	0.9998	0.9999	0.9999	

TABLA V.7

Ti. CER (10^{-5} Mpa $^{-1}$) para el caso isótropo y la "aproximación isótropa".

{hkl}	CER	Textura A		Textura B		Isótropo
		$\varphi=0^\circ$	$\varphi=90^\circ$	$\varphi=0^\circ$	$\varphi=90^\circ$	
{104}	S_1	-0.212	-0.230	-0.213	-0.217	-0.221
	$\frac{1}{2}S_2$	1.022	1.026	1.076	0.9545	0.979
	r	0.9985	0.9988	0.9992	0.9999	
{123}	S_1	-0.346	-0.247	-0.366	-0.231	-0.299
	$\frac{1}{2}S_2$	1.356	1.157	1.387	1.112	1.206
	r	0.9999	0.9995	0.9999	0.9999	
{203}	S_1	-0.319	-0.219	-0.333	-0.224	-0.284
	$\frac{1}{2}S_2$	1.331	1.081	1.379	1.060	1.1631
	r	0.9990	0.9985	0.9985	0.9996	
{114}	S_1	-0.268	-0.233	-0.263	-0.232	-0.255
	$\frac{1}{2}S_2$	1.211	1.092	1.223	1.015	1.078
	r	0.9995	0.9997	0.9990	0.9998	

TABLA V.8

Zn. CER (10^{-5} Mpa⁻¹) para el caso isótopo y la "aproximación isótropa".

{hkl}	CER	Textura D		Isótopo
		$\varphi=0^\circ$	$\varphi=90^\circ$	
{104}	S_1	-0.427	-0.473	-0.390
	$\frac{1}{2}S_2$	1.377	1.571	2.306
	r	0.9792	0.9917	
{006}	S_1	-0.684	-0.684	-0.684
	$\frac{1}{2}S_2$	3.459	3.459	3.459
	r	1.	1.	
{105}	S_1	-0.470	-0.532	-0.467
	$\frac{1}{2}S_2$	1.725	1.941	2.618
	r	0.9960	0.9941	

5.5 DETERMINACION EXPERIMENTAL DE LAS CER

Las mediciones de las CER se realizaron para el plano {104} en la chapa de Zr (textura A) y en una muestra de un tubo extrudado de Zircaloy-4. Esta muestra se obtuvo haciendo dos cortes a una distancia de ≈ 3 mm, en la dirección radial del tubo, tomándose, para las mediciones la dirección tangencial del tubo como dirección normal a la muestra (textura C). Se utilizó un equipo de rayos X Rigaku Strainflex con radiación de Cr-K α .

Se midió en el material $2\theta_{(104)}$ en función de $\sin^2\psi$, para $\varphi=90^\circ$ en el caso de la chapa de Zr con textura A y para $\varphi=0^\circ$ en el caso del Zircaloy-4 con textura C. Se eligieron estos ángulos, en el primer caso para tener una intensidad difractada apreciable, y en el segundo la dirección de medida estaba impuesta por la geometría de la muestra, aunque las condiciones de difracción, dada la textura del material, no eran las óptimas. En

los dos casos se observó un comportamiento lineal, y una pendiente positiva de la recta, indicando tensiones residuales superficiales en compresión. Con un ataque químico localizado en la zona de medición, se observó que las tensiones residuales se anulaban a una profundidad de $\approx 35\mu\text{m}$. Se deformó entonces la probeta, de manera uniaxial, en el rango elástico, mediante la técnica de flexión en 4 puntos. La dirección de deformación en la muestra de Zr fue paralela a la dirección transversal de la chapa y en la muestra de Zircaloy-4 paralela a la dirección axial del tubo. Con los diferentes valores de deformación (medidos con strain-gauge) se calcularon las tensiones correspondientes mediante el módulo elástico macroscópico ($E=97000\text{MPa}$ para el Zr con textura A y $E=94269\text{ Mpa}$ para el Zircaloy-4 con textura C). Para cada valor de tensión aplicada σ^A se graficó 2θ vs $\sin^2\psi$, obteniéndose rectas cuyas pendientes y ordenadas al origen se calcularon por cuadrados mínimos.

La ecuación (5.12) se escribe en este caso

$$2\theta_{hkl}(\circ) = -\sigma^A \frac{\frac{1}{2}S_2(hkl)360^\circ}{\pi \cotg(\theta_{hkl})} \sin^2\psi - \sigma^A \frac{S_1(hkl)360^\circ}{\pi \cotg(\theta_{hkl})} + 2\theta_{0_{hkl}}(\circ)$$

Si se grafica ahora la pendiente $m(\sigma)$ y la ordenada al origen $b(\sigma)$ de cada recta en función de la tensión aplicada σ^A , se pueden calcular de las pendientes de estas rectas, p_1 y p_2 , las dos constantes S_1 y $\frac{1}{2}S_2$

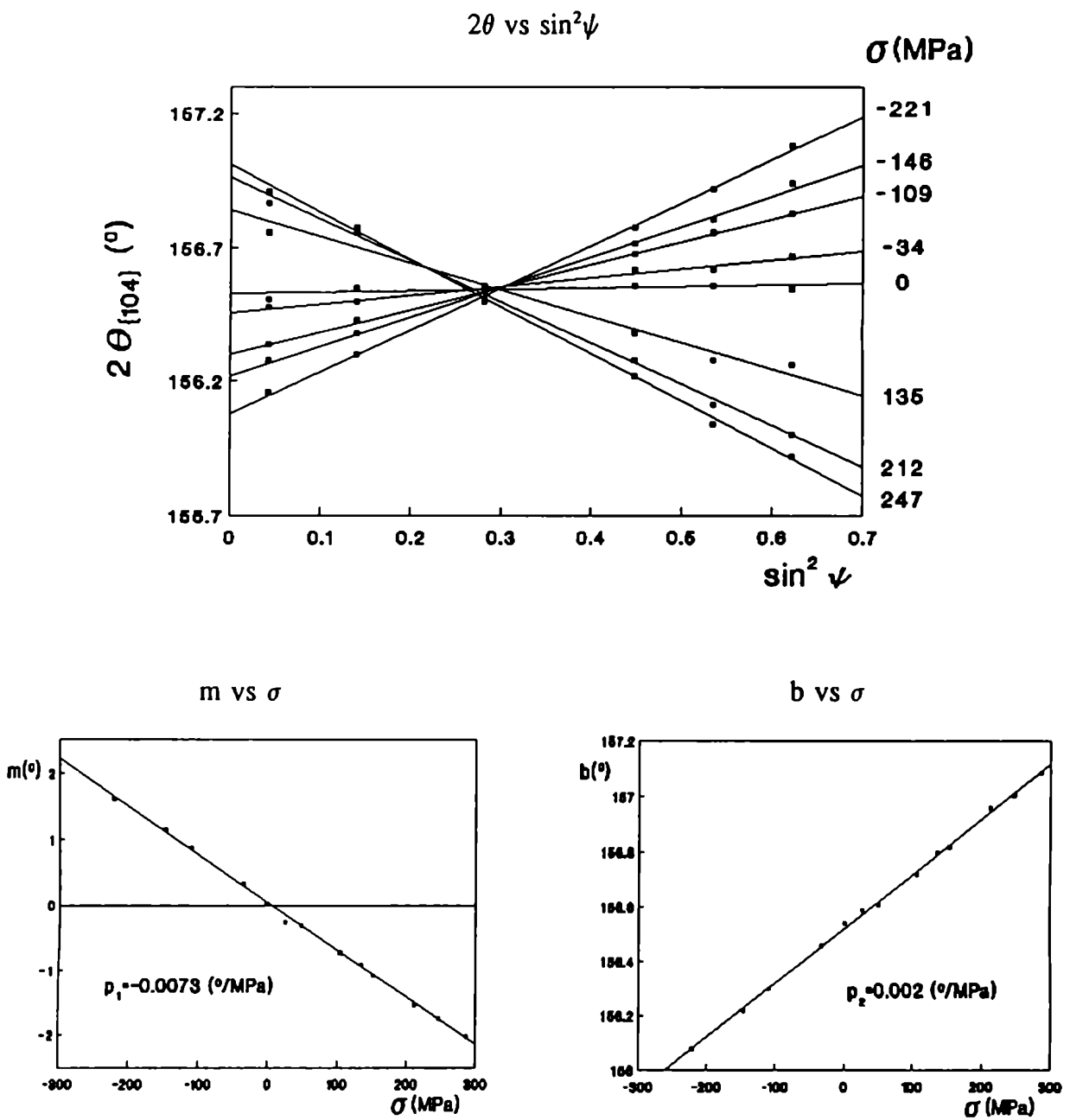
$$\frac{1}{2}S_2(hkl) = -\frac{p_1 \pi}{360 \text{tg}(\theta_{hkl})}$$

$$S_1(hkl) = -\frac{p_2 \pi}{360 \text{tg}(\theta_{hkl})}$$

En la figura V.21 se muestran los gráficos correspondientes a la chapa de Zr con textura A

FIGURA V.21

Zr textura A



En la tabla V.9 se resumen los resultados

TABLA V.9

Muestra	S (10^{-5}MPa^{-1})	Experimental	ISO	ISO-ODF
Zr Textura A	S_1	-0.36 ± 0.02	-0.315	-0.369
	$\frac{1}{2} S_2$	1.32 ± 0.13	1.269	1.419
Zircaloy-4 Textura C	S_1	-0.30 ± 0.02	-0.315	-0.279
	$\frac{1}{2} S_2$	1.24 ± 0.15	1.269	1.394

Los resultados de la tabla V.9 muestran que para el plano $\{104\}$ del Zr los valores de las CER calculados suponiendo el material isótropo o texturado aproximan el valor experimental, dentro de la cota de error.

5.6 CONCLUSIONES

- a) La aproximación de Reuss pone de manifiesto que para materiales poco anisotrópicos, desde el punto de vista de sus constantes elásticas, como el Zr, y para ciertos planos cristalinos, se comete poco error en el cálculo de las tensiones si se utilizan las CER isótropas.
- b) El conocimiento de la textura, no obstante, es importante en estos casos para elegir los ángulos φ y ψ de medida que aseguren buenas condiciones de difracción.

- c) El análisis previo de la anisotropía elástica del monocristal permite predecir en que casos la textura puede tener una influencia importante en el cálculo de las CER.

- d) El programa de cálculo de las CER, en la aproximación de Reuss, para materiales hexagonales, en los casos anisotrópicos es un primer paso que posibilita la utilización de los modelos autoconsistentes, que tienen en cuenta la interacción entre granos. Los cálculos en este sentido junto con las mediciones experimentales permitirán un mejor conocimiento del comportamiento macroscópico de los materiales hexagonales.

APENDICE I

MATRICES DE PASAJE ENTRE LOS DISTINTOS SISTEMAS DE COORDENADAS

A1.1

$$X_i^L = \Gamma_{ij} X_j^M \quad \text{siendo} \quad \Gamma_{ij} = \Psi_{ik} \cdot \phi_{kj}$$

$$\phi_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Psi_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\psi & 0 & -\sin\psi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\psi & 0 & \cos\psi \end{bmatrix}$$

$$\Gamma_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\varphi \cos\psi & \sin\varphi \cos\psi & -\sin\psi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ \cos\varphi \sin\psi & \sin\varphi \sin\psi & \cos\psi \end{bmatrix}$$

A1.2

$$X_i^A = b_{ij} X_j^C \quad \text{siendo} \quad b_{ij} = \tau_{ik} \cdot \mu_{kj}$$

$$\mu_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\mu & \sin\mu & 0 \\ -\sin\mu & \cos\mu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

El ángulo μ puede expresarse en función de los índices de Miller $\{hkl\}$ del plano difractante y de la relación c/a (formulas válidas para cristales de simetría hexagonal)

$$\mu_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{2h+k}{2\sqrt{h^2+hk+k^2}} & \frac{k}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)}} & 0 \\ \frac{k}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)}} & \frac{2h+k}{2\sqrt{h^2+hk+k^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\tau & 0 & -\sin\tau \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\tau & 0 & \cos\tau \end{bmatrix}$$

De la misma manera que la matriz anterior puede expresarse en función de los índices de Miller del plano difractante y de la relación c/a

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{l}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}+l^2}} & 0 & -\frac{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}+l^2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}+l^2}} & 0 & \frac{l}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+hk+k^2)\frac{c^2}{a^2}+l^2}} \end{bmatrix}$$

$$b_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\mu\cos\tau & \sin\mu\cos\tau & -\sin\tau \\ -\sin\mu & \cos\mu & 0 \\ \cos\mu\sin\tau & \sin\mu\sin\tau & \cos\tau \end{bmatrix}$$

A1.3

$$X_i^L = \Lambda_{ij} X_j^D$$

$$\Lambda_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\lambda & \sin\lambda & 0 \\ -\sin\lambda & \cos\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A1.4

$$X_i^C = a_{ij} X_j^M$$

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\omega - \sin\alpha\sin\omega & \sin\alpha\cos\beta\cos\omega + \cos\alpha\sin\omega & -\sin\beta\cos\omega \\ -\cos\alpha\cos\beta\sin\omega - \sin\alpha\cos\omega & -\sin\alpha\cos\beta\sin\omega + \cos\alpha\cos\omega & \sin\beta\sin\omega \\ \cos\alpha\sin\beta & \sin\alpha\sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix}$$

En el programa de calculo de las CER se obtiene la matriz a_{ij}^{-1} expresada como $a_{ij}^{-1} = \Gamma_{ik}^{-1} \cdot \Lambda_{kl} \cdot b_{lj}$. Los ángulos de Euler, en función de los cuales esta expresada la FDOC, se obtienen a partir de las siguientes expresiones:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{a_{32}}{a_{31}}$$

$$\cos \beta = a_{33}$$

$$\operatorname{tg} \omega = -\frac{a_{23}}{a_{13}}$$

A1.5 F_{ij} en función de los R_{33ij}^L y de los ángulos φ y ψ

$$F_{11} = R_{3311}^L \cos^2 \varphi \cos^2 \psi + R_{3322}^L \sin^2 \varphi + R_{3333}^L \cos^2 \varphi \sin^2 \psi - \\ R_{3312}^L \sin 2\varphi \cos \psi + R_{3313}^L \cos^2 \varphi \sin 2\psi - R_{3323}^L \sin 2\varphi \sin \psi$$

$$F_{22} = R_{3311}^L \sin^2 \varphi \cos^2 \psi + R_{3322}^L \cos^2 \varphi + R_{3333}^L \sin^2 \varphi \sin^2 \psi + \\ R_{3312}^L \sin 2\varphi \cos \psi + R_{3313}^L \sin^2 \varphi \sin 2\psi + R_{3323}^L \sin 2\varphi \sin \psi$$

$$F_{12} = R_{3311}^L \sin 2\varphi \cos^2 \psi - R_{3322}^L \sin 2\varphi + R_{3333}^L \sin 2\varphi \sin^2 \psi + \\ 2R_{3312}^L \cos 2\varphi \cos \psi + R_{3313}^L \sin 2\varphi \sin 2\psi + 2R_{3323}^L \cos 2\varphi \sin \psi$$

$$F_{33} = R_{3311}^L \sin^2 \psi + R_{3333}^L \cos^2 \psi - R_{3313}^L \sin 2\psi$$

$$F_{13} = -R_{3311}^L \cos \varphi \sin 2\psi + R_{3333}^L \cos \varphi \sin 2\psi + 2R_{3312}^L \sin \varphi \sin \psi + \\ 2R_{3313}^L \cos \varphi \cos 2\psi - 2R_{3323}^L \sin \varphi \cos \psi$$

$$F_{23} = -R_{3311}^L \sin \varphi \sin 2\psi + R_{3333}^L \sin \varphi \sin 2\psi - 2R_{3312}^L \cos \varphi \sin \psi + \\ 2R_{3313}^L \sin \varphi \cos 2\psi + 2R_{3323}^L \cos \varphi \cos \psi$$

APENDICE II

TABLA A2.1

G	000	200	202	220	222	400	402	420	422	404	440	424	442	444
T	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}	B _{px}
1111	6	6	-6	-6	6	9	-3	-3	1	3	3	-1	-1	1
1122	6	6	6	-6	-6	9	3	-3	-1	3	3	-1	1	1
1133	6	-12		12		24		-8			8			
1112	4	4		-4		6		-2		-6	2	2		-2
1113	4	-2	-2	2	2	-24	6	8	-2		-8		2	
1123	4	-2	2	2	-2	-24	-6	8	2		-8		-2	
2211	6	6	-6	6	-6	9	-3	3	-1	3	3	1	-1	1
2222	6	6	6	6	6	9	3	3	1	3	3	1	1	1
2233	6	-12		-12		24		8			8			
2212	4	4		4		6		2		-6	2	-2		-2
2213	4	-2	-2	-2	-2	-24	6	-8	2		-8		2	
2223	4	-2	2	-2	2	-24	-6	-8	-2		-8		-2	
3311	6	-12	12			24	-8			8				
3322	6	-12	-12			24	8			8				
3333	6	24				64								
3312	4	-8				16				-16				
3313	4	4	4			-64	16							
3323	4	4	-4			-64	-16							
1211	2	2	-2			3	-1			1	-3		1	-1
1222	2	2	2			3	1			1	-3		-1	-1
1233	2	-4				8					-8			
1212	8	20				2				-2	-2			2
1213	8	-10	-10			-8	2				8		-2	
1223	8	-10	10			-8	-2				8		2	
4412	-2	4		-4		-8		-2		8		2		
4413	-2	-2	-2	2	2	32	-8	8	-2					
4423	-2	-2	2	2	-2	32	8	8	2					
5512	-2	4		4		-8		2		8		-2		
5513	-2	-2	-2	-2	-2	32	-8	-8	2					
5523	-2	-2	2	-2	2	32	8	-8	-2					
6612	-2	-8				2				-2	-2			2
6613	-2	4	4			-8	2				8		-2	
6623	-2	4	-4			-8	-2				8		2	
1311	2	-1	1	-1	1	-12	4	3	-1	-4		1		
1322	2	-1	-1	-1	-1	-12	-4	3	1	-4		1		
1333	2	2		2		-32		8						
1312	8	-10		-10		-8		2		8		-2		
1313	8	5	5	5	5	32	-8	-8	2					
1323	8	5	-5	5	-5	32	8	-8	-2					
2311	2	-1	1	1	-1	-12	4	-3	1	-4		-1		
2322	2	-1	-1	1	1	-12	-4	-3	-1	-4		-1		
2333	2	2		-2		-32		-8						
2312	8	-10		10		-8		-2		8		2		
1313	8	5	5	-5	-5	32	-8	8	-2					
2323	8	5	-5	-5	5	32	8	8	2					

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
B _i	1/30	10 ⁴ /210	15 ⁴ /105	10 ⁴ /35	2 ⁴ /840	5 ⁴ /210	2 ⁴ /21	35 ⁴ /420	14 ⁴ /42	2 ⁴ /12

APENDICE III

DETERMINACION DEL MODULO DE YOUNG A PARTIR DE LA FRECUENCIA
DE RESONANCIA DE VIBRACIONES FLEXURALES

A3.1 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO

La técnica conocida como método de "barra resonante" o método de "Forster" [58] es habitualmente utilizada para la determinación del módulo de Young dinámico (E) de materiales, debido a su simplicidad y exactitud. Consiste en la medición de la frecuencia de resonancia de una barra con la geometría apropiada y en el cálculo del módulo de Young a partir de las ecuaciones derivadas de la teoría de la elasticidad.

La instrumentación electrónica implementada para la medición de la frecuencia de resonancia esta esquematizada en el diagrama de bloques mostrado en la figura A3.1

El circuito excitador consiste en un oscilador de frecuencia variable y un amplificador de potencia. La frecuencia puede variarse en forma continua entre los 100 - 1500 Hertz. El oscilador alimenta una bobina o un parlante, dependiendo de que el material a ensayar sea o no ferromagnético.

La detección de las vibraciones se realiza con un transductor óptico que no toca la muestra. Este transductor funciona de la siguiente manera (Figura A3.2): La señal proveniente de un diodo emisor de infrarrojo (9.000Å) se refleja en la probeta y es detectada por un fototransistor receptor infrarrojo. La corriente de salida de este último es proporcional a la intensidad luminosa recibida y esta depende de la posición de la probeta. Cuando se produce la vibración, la salida del fototransistor reproduce el movimiento de la probeta. La señal proveniente del fototransistor es amplificada y puede verse su forma y leerse su

intensidad en un osciloscopio.

La lectura de la frecuencia de resonancia se hace con un frecuencímetro digital que aprecia hasta 0.1 Hertz.

La muestra se suspende por dos hilos finos en la posición de los nodos (Esta posición se calcula a partir de las ecuaciones de la teoría elástica de vibraciones que se detallan en A3.2) . Se hace un barrido en frecuencia hasta ubicar la de resonancia (máxima amplitud en la señal de salida del detector óptico). Para chequear a que modo de vibración corresponde esa frecuencia, se desplaza el detector óptico a lo largo de la muestra, comprobándose la ubicación de los nodos y vientres.

FIGURA A3.1

Diagrama de la instrumentación electrónica utilizada en la técnica resonante

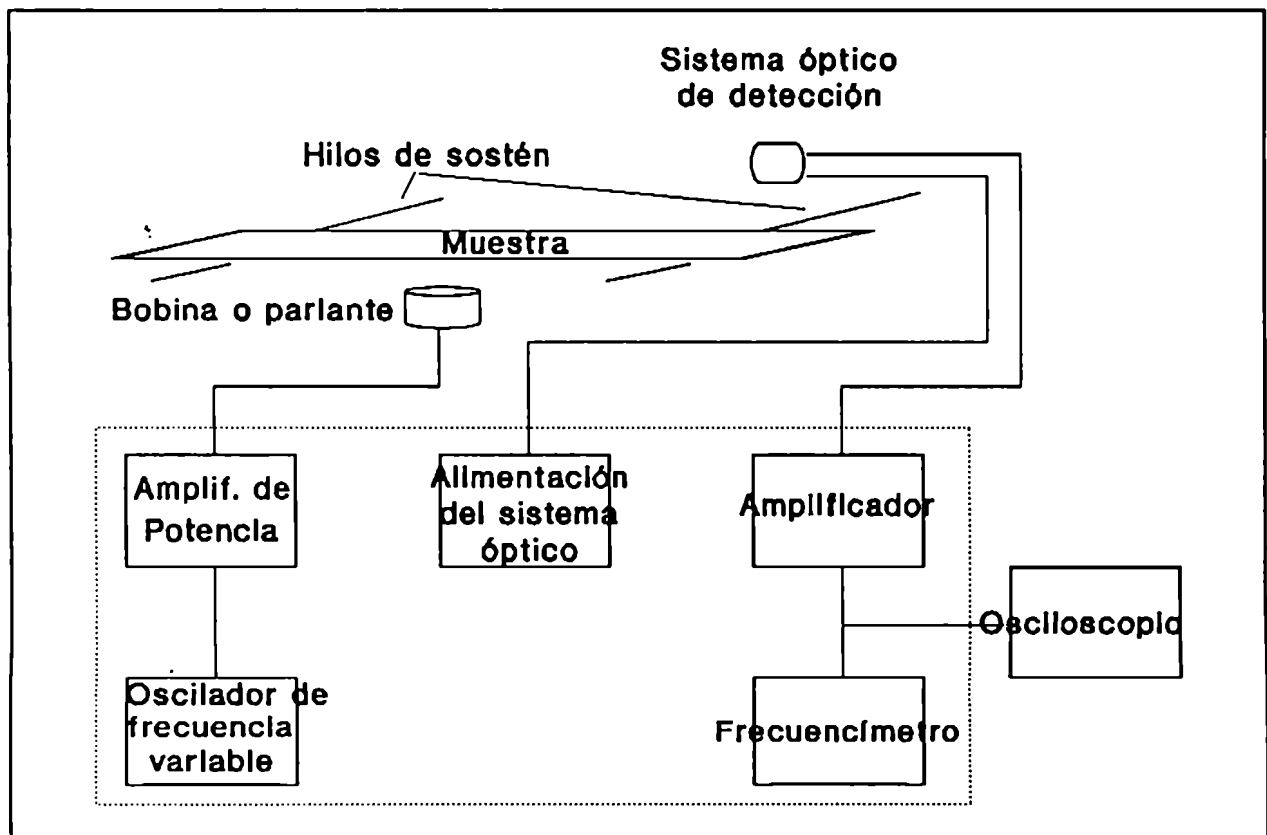
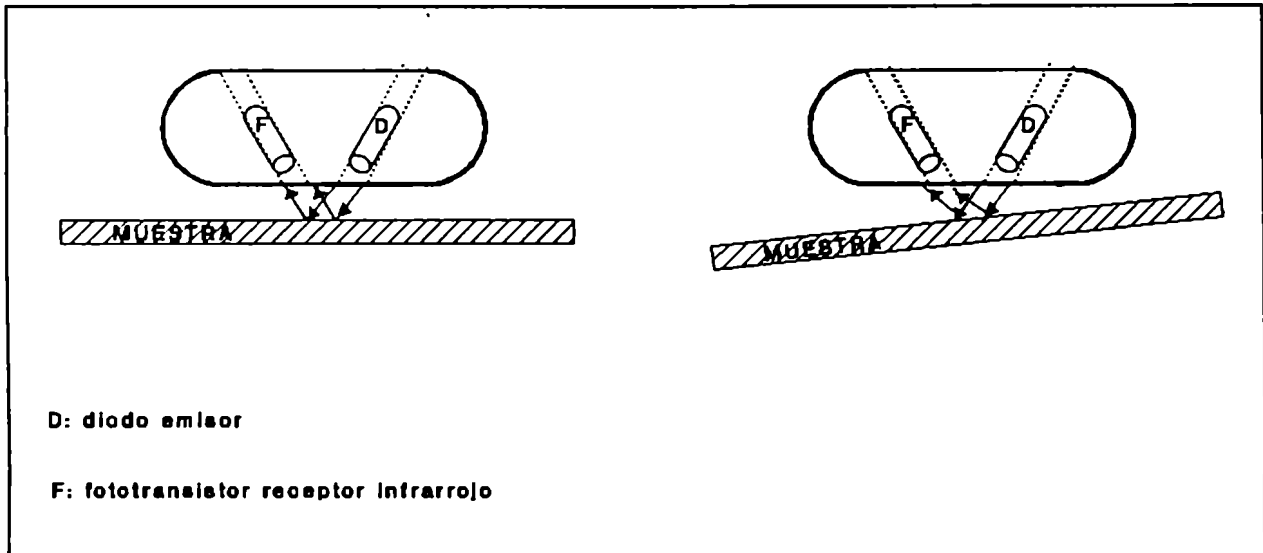


FIGURA A3.2

Esquema del detector óptico de las vibraciones



A3.2 CALCULO DEL MODULO DE YOUNG

El cálculo del módulo de Young, a partir de la frecuencia de resonancia de vibraciones flexurales, en barras delgadas, se resuelve utilizando la teoría aproximada de Bernoulli-Euler [59]. En esta teoría se demuestra que las vibraciones flexurales de una barra isótropa están gobernadas por la ecuación

$$\frac{EI}{\rho A} \frac{\partial^4 Y(x,t)}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 Y(x,t)}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{A3.1})$$

donde E: módulo de Young

I : momento de inercia de la sección transversal de la barra respecto del eje perpendicular al plano de vibración

ρ : densidad del material

A : área de la sección transversal

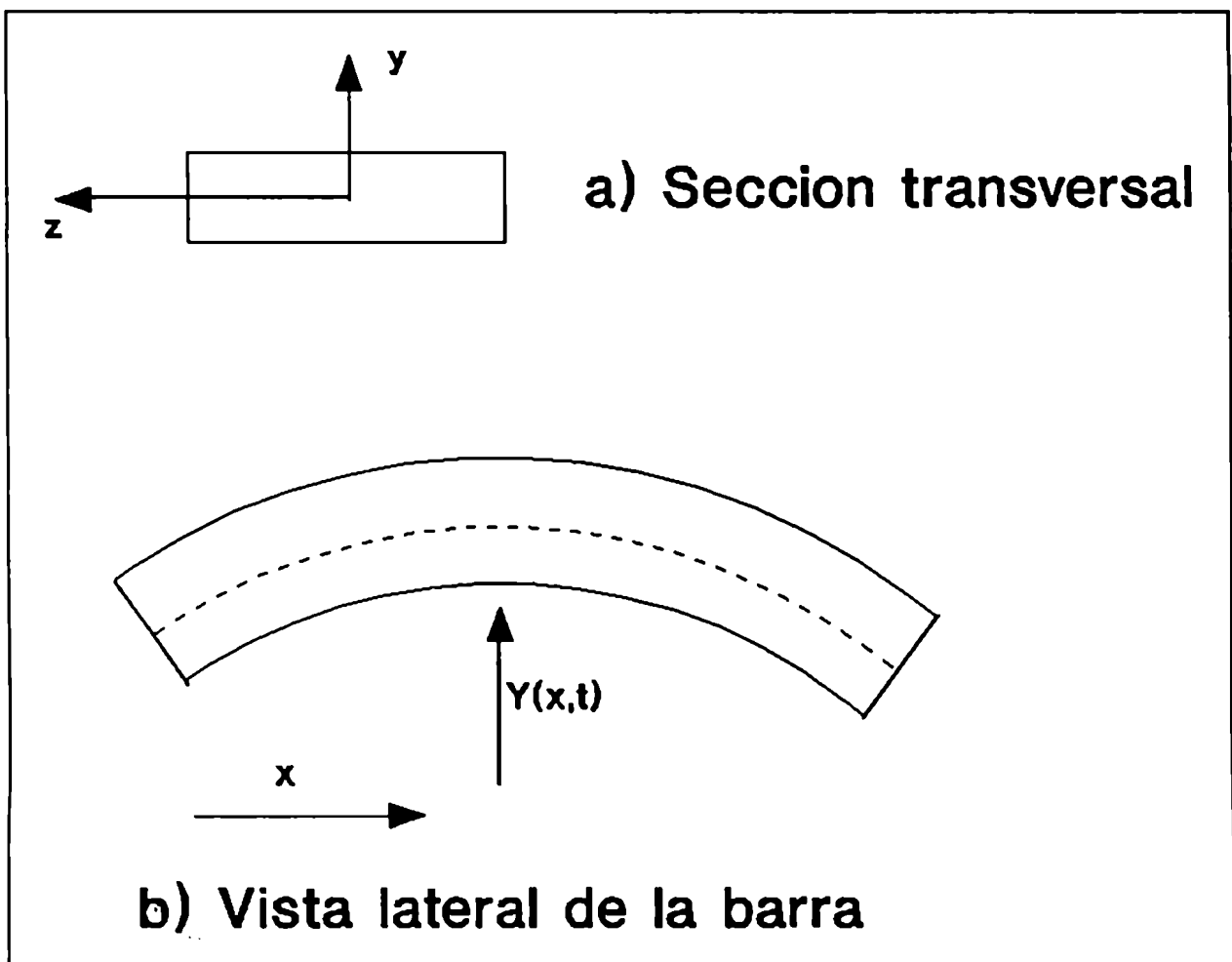
t : tiempo

x : coordenada en la dirección longitudinal de la barra (ver Figura A3.3)

$Y(x,t)$: deflexión transversal de la barra en el plano x - y (ver Figura A3.3)

FIGURA A3.3

Sistema de coordenadas utilizado en la descripción de las vibraciones flexurales



Las suposiciones utilizadas en la derivación de la ecuación A3.1 son las siguientes:

La barra es uniforme en toda su longitud.

La barra esta compuesta de un material elásticamente homogéneo, lineal e isótropo.

La barra es delgada. La relación entre el espesor (e) y el largo (L) de la misma debe cumplir la relación $\frac{e}{\sqrt{12}L} < 0.005$, esto posibilita despreciar los efectos de inercia de rotación y deformaciones de corte [60].

Solo se consideran deformaciones normales al eje neutro de la barra. Secciones planas permanecen planas durante la deformación.

No están aplicadas cargas axiales sobre la barra.

Resolviendo la ecuación A3.1, con las condiciones de contorno particulares libre-libre en los extremos, impuestas por la forma de sujeción de la muestra, se obtienen las expresiones para la forma de vibración (ecuación A3.2) y las frecuencias de resonancia (ecuación A3.3):

$$\frac{Y(x)}{Y(Max.)} = 0.5 \left[\cosh\left(\lambda_i \frac{x}{L}\right) + \cos\left(\lambda_i \frac{x}{L}\right) \right] - 0.4913 \left[\sinh\left(\lambda_i \frac{x}{L}\right) + \sin\left(\lambda_i \frac{x}{L}\right) \right] \quad (A3.2)$$

donde λ_i son constantes para los distintos modos de vibración

$$\lambda_0 = 0$$

$$\lambda_1 = 4.73004074$$

$$\lambda_2 = 7.85320462$$

$$\lambda_3 = 10.9956078$$

$$\lambda_4 = 14.1371655$$

$$\lambda_5 = 17.2787597$$

$$\lambda_i = (2i+1)\pi/2 \text{ para } i > 5$$

$$f_i = \frac{\lambda_i^2}{2\pi L^2} \sqrt{\frac{EI}{A\rho}} \quad (\text{A3.3})$$

De la ecuación A3.3 puede despejarse el módulo de Young (E) en función de la frecuencia de resonancia

$$E = \frac{4\pi^2 \rho L^4 f_i^2 A}{I \lambda_i^4} \quad (\text{A3.4})$$

Para barras de sección transversal rectangular la ecuación A3.4 toma la forma:

$$E = \frac{48\pi^2 \rho L^4 f_i^2}{\lambda_i^4 e^2} \quad (\text{A3.5})$$

donde e: espesor de la muestra.

Para barras de sección transversal circular la ecuación que relaciona la frecuencia de resonancia con el módulo de Young es:

$$E = \frac{16\pi^2 \rho L^4 f_i^2}{\lambda_i^4 R^2} \quad (\text{A3.6})$$

donde R: radio de la sección circular

En la figura A3.4 se representa la ecuación A3.2 para los tres primeros modos de

vibración y en la tabla A3.1 figuran las posiciones de los nodos para los primeros cuatro modos de vibración.

FIGURA A3.4

Formas de vibración para los 4 primeros modos

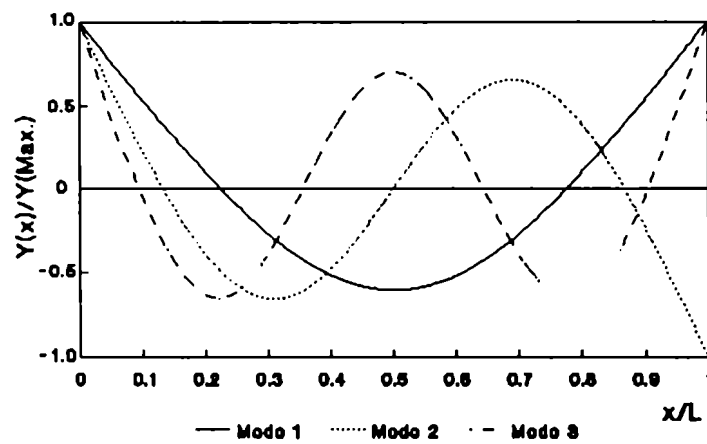


TABLA A3.1

Posición de los nodos para los 4 primeros modos de vibración

i	Posición de los nodos (x/L)				
1	0.22416	0.77584			
2	0.13211	0.50000	0.86789		
3	0.09444	0.35580	0.64420	0.90556	
4	0.07345	0.27678	0.50000	0.72322	0.92655

A3.3 CALCULO DE ERRORES

Aplicando la teoría de errores se puede analizar la influencia del error de cada factor en el cálculo del error del módulo de Young (E) a partir de la ecuación A3.5 Llamando $\Delta\%(M)$ al error porcentual de medición de la magnitud M, se obtiene

$$\Delta\%(E) = \sqrt{4|\Delta\%(f)|^2 + |\Delta\%(\rho)|^2 + 16|\Delta\%(L)|^2 + 4|\Delta\%(e)|^2} \quad (\text{A3.7})$$

El valor de los errores porcentuales, para las condiciones de medición utilizadas son los siguientes:

El error porcentual de las frecuencias medidas (en el rango de 500 Hertz) con un frecuencímetro digital que aprecia hasta 0.1 Hertz es de 0.02%. Sin embargo en distintos ensayos sobre la misma probeta, se ponen de manifiesto la influencia de otros parámetros no contemplados en la ecuación A3.7, fundamentalmente relacionados con la posición de los puntos de apoyo respecto de la posición de los nodos y con el nivel de excitación utilizado. Este último determina la amplitud de vibración y por lo tanto la deformación a que es sometida la muestra. En todos los casos la deformación máxima fue menor que 10^{-5} garantizándose de esta forma que las mediciones se realizaban dentro del rango elástico del material. El error porcentual en la medición de la frecuencia, teniendo en cuenta la repetibilidad de las mediciones, se estima en 0.05%

El error porcentual en la densidad, cuyos valores fueron tomados de la literatura para cada material, es del orden del 0.1%. En mediciones de distintas muestras del mismo material, es razonable suponer que no existen variaciones apreciables de la densidad, de modo que este factor solo introduciría un error sistemático en el valor del módulo E para

toda la serie de medidas en el mismo material.

Las mediciones de las dimensiones de las muestras ($L \approx 10$ cm, $e \approx 0.2$ cm) fueron realizadas con un calibre para la longitud y con un palpador milesimal para el espesor. En las mediciones del espesor se pusieron de manifiesto fluctuaciones del mismo que superaban el error de medición. Se tomó como valor del espesor el promedio de 10 mediciones realizadas en distintos puntos de la muestra y el error porcentual se tomó como la desviación standard de esas 10 mediciones. Los errores porcentuales se estiman en 0.5% para el espesor y 0.001% para la longitud.

Analizando todos los errores, se ve que el que tiene más peso es el proveniente del espesor. Como cota máxima del error porcentual en el módulo E puede tomarse el valor del 1%.

REFERENCIAS

- [1] L.G. Schulz. J. Appl. Phys., 20, 1030 (1949)
- [2] B.J. Decker, E. T. Asp y D. Harker. J. Appl. Phys., 19, 388 (1948)
- [3] M. Pernot. Tesis para el título de Doctor en Física. Universidad de Paris-Sud (1977)
- [4] H. J. Bunge. "Mathematische Methoden der Texturanalyse". Berlin, Akademie Verlag (1968)
- [5] R. J. Roe. J. Appl. Phys., 36, 2024 (1965)
- [6] S. Matthies y J. Pospiech. Phys. Stat. Sol.(b), 97, 547 (1980)
- [7] H. R. Wenk, H. J. Bunge, J. S. Kallend, K. Lücke, S. Matthies, J. Pospiech y P. Van Houtte. Proc. ICOTOM 8, The Metallurgical Soc., 17, (1988)
- [8] R. Penelle, T. Baudin, P. Paillard y L. Mora. Texture and Microstructure, 14-18, 597 (1991)
- [9] W. Voigt. Lehrbuch der Kristallphysik, B. G. Teubner Verlag, Leipzig (1928)
- [10] A. Reuss. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. Z. Angew. Math. Mech., 9, 49 (1929)
- [11] R. Hill. Proc. Phys. Soc., A65, 349 (1952)
- [12] H. Pursey y H. L. Cox. Phil. Mag., 45, 295 (1954)
- [13] G. Bradfield y H. Pursey. Phil. Mag., 44, 437 (1953)
- [14] G. J. Davies, D. J. Goodwill y J. S. Kallend. Metall. Trans., 3, 1627 (1972)
- [15] W. R. McDonell. USAEC Rep. TID 7526, 230 (1957)
- [16] R. J. Price y J. C. Bokros. J. Appl. Phys., 36, 1897 (1965)
- [17] E. F. Sturken y J. W. Croach. Trans. Met. Soc. AIME, 227, 934 (1963)

- [18] E. F. Sturken y W. R. Donell. *J. Nucl. Mat.*, 7, 85 (1962)
- [19] P. R. Morris. *J. Appl. Phys.*, 40, 447 (1969)
- [20] M. Barral, J. L. Lebrun, J. M. Sprauel y G. Maeder. *Metall. Transactions*, 18A, 1229 (1987)
- [21] J. C. Couterne, G. Cizeron, P. Lacombe. *IX Colloque de Métallurgie. Saclay*. 135 (1965)
- [22] M. Ortiz y J.D. Hermida. *Texture*, 4, 159 (1981)
- [23] D. Ruer. *Tesis de Estado. Universidad de Metz* (1976)
- [24] S. Matthies y G. W. Vinel, *Phys. Stat. Sol.*, (b) 112, k111 (1982)
- [25] C. Esling, H. J. Bunge, M. J. Philippe y J. Muller. *Proc. Workshop Universidad de Metz. Editado por H. J. Bunge*. 105 (1987)
- [26] S. Matthies. *Textures and Microstructure*, 14-18, 1 (1991)
- [27] S. Matthies. *Proc. ICOTOM 8, The Metallurgical Soc.*, 37 (1988)
- [28] O. Ferreira. *Tesis de Doctor-Ingeniero en Física. Paris - Sud* (1978)
- [29] P. R. Morris. *Int. J. Engng Sci.*, 8, 49 (1970)
- [30] J. D. Eshelby. *Proc. R. Soc.*, A241, 376 (1957)
- [31] E. Kroner. *Z. Phys.*, 151, 504 (1958)
- [32] G. Kneer. *Phys. Status Solidi*, 9, 825 (1965)
- [33] M. Humbert, J. Wegria y C. Esling. *Texture and Microstructure*, 14-18, 463 (1991)
- [34] J.F. Nye. *Physical Properties of Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1957)
- [35] J. C. Couterne. *Tesis para el título de Doctor en Física. Universidad de Paris-Sud* (1975)
- [36] S. R. MacEwen, C. Tomé y J. Faber. *Acta Metall.*, 37, 979 (1989)
- [37] R. B. Russel. *Trans AIME*, 200, 1045 (1954)

- [38] J. Goldak, L. T. Lloyd y C. S. Barrett. *Phys. Rev.*, 144, 478 (1966)
- [39] R. H. Willens. *Rev. Sci. Instrum.*, 33, 1069 (1962)
- [40] J. I. Medoff y I. J. Cadoff. *J. Met.*, 11, 581 (1959)
- [41] R. L. P. Berry y G. V. Raynor. *Research*, 6, 21S (1953)
- [42] J. Spreadborough y J. W. Christian. *Proc. Phys. Soc., London*, 74, 609 (1959)
- [43] Informe tecnico Siemens
- [44] R. F. S. Hearmon. *An Introduction to Applied Anisotropic Elasticity*, Oxford University Press, London (1961)
- [45] G. J. Davies, D. J. Goodwill y J. S. Kallend. *Metallurgical Transactions*, 3, 1627 (1972)
- [46] H. Kitawa, M. Katayama y H. Maruyama. *Transactions ISIJ*, 22, 427 (1982)
- [47] Ch. Barret. *Estructura de los Metales*, Aguilar, Madrid (1957)
- [48] H. Masumoto y M. Kikuchi. *Trans. JIM*, 12, 90 (1971)
- [49] G. R. Speich, A. J. Schwoeble y W. C. Leslie. *Metallurgical Transactions*, 3, 2031 (1972)
- [50] H. J. Bunge, R. Ebert y F. Günther. *Phys. Stat. Sol.*, 31, 565 (1969)
- [51] E. S. Fisher y C. J. Renken. *Physical Review*, 135 N° 2A, A482 (1964)
- [52] A. J. Allen, M. T. Hutchings, C. G. Windsor. *Advances in Physics*, 34 N° 4, 445 (1985)
- [53] F. Bollenrath, V. Hauk, E. H. Muller. *Z. Metallkde*, 58, 76 (1967)
- [54] P. D. Evenschor, W. Frohlich, V. Hauk. *Z. Metallkde*, 62, 39 (1971)
- [55] M. Barral. *Tesis de Doctor-Ingeniero en Metalurgia*. Universidad de Paris 6 (1983)
- [56] S. Matthies y F. Wagner. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 107, 591 (1981)
- [57] H. M. Ledbetter. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 6 N°4, 1181 (1977)

- [58] F. Forster. Z. Metallkde, 29, 109 (1937)
- [59] R. D. Blevins. "Formulas for natural frequency and mode shape", Van Nostrand Reinhold Company, 1979.
- [60] S. Timoshenko. "Vibration problems in engineering". D. Van Nostrand Company, 1954.
- [61] P. Dervin. Tesis de Doctor-Ingeniero. Universidad de Paris-Sud (1978)-
- [62] N. Míngolo. Tesis de Doctorado en Ciencias Físicas. Universidad de Buenos Aires (1990)