

Textura cristalográfica

Francisco Cruz Gandarilla y Francisco Caleyó Cerejio
Gerencia de Ciencia de Materiales, ININ, Centro Nuclear de México
Km. 361/2 Carr. México–Toluca, 52045 Salazar, Edo. de México, Mexico
e-mail: feruz@nuclear.inin.mx

Luis Fuentes Cobas*
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Complejo Industrial Chihuahua
Miguel de Cervantes 120, 31110 Chihuahua, Chih., Mexico
e-mail: lfuentes@yakko.cimav.edu.mx

Jesús Palacios Gómez
Dpto. de Ciencia de Materiales, Escuela Superior de Físico Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, Edif 9, UPALM
07738 México, D.F., Mexico
e-mail: palacios@esfm.ipn.mx

Recibido el 7 de enero de 1998; aceptado el 17 de marzo de 1998

Se presentan los principales tópicos del análisis cuantitativo de texturas: (a) ¿Qué es la textura, cómo se le caracteriza y representa? (b) Métodos de medición de la misma: globales (figuras de polos medidas por rayos X y neutrones) y locales (microscopia de imagen orientacional). (c) El tratamiento matemático de Bunge (armónicos esféricos generalizados) y la problemática de las "texturas fantasmas". Se describe la relación entre la textura, los materiales y los diferentes procesos, considerando en particular el caso de la recristalización en una aleación de FeNi 50%. Se presenta la relación entre textura y propiedades anisótropas para un policristal, ejemplificándolo con la energía de magnetización.

Descriptores: Textura

The main topics of quantitative texture analysis are presented: (a) What is texture, how it is characterized and represented? (b) The measurement methods: global (X-rays and neutrons-measured poles figures) and local (Orientational Image Microscopy). (c) Bunge's mathematical treatment (generalized spherical harmonics) and the ghosts' problems. The relationship between texture, materials and processes is analyzed. The recrystallization of a FeNi 50% alloy is discussed. The relationship between texture and polycrystal anisotropic properties is presented and exemplified it with a magnetization-energy case.

Keywords: Texture

PACS: 81.40.E

1. Introducción

La textura cristalográfica u orientación preferencial de las cristalitas que conforman un policristal, es uno de los aspectos primarios que caracterizan la estructura de este tipo de material [1, 2]. Su importancia se liga a cuestiones diversas, como la optimización de propiedades físicas (por ejemplo las propiedades magnéticas en las aleaciones de FeSi que se usan en transformadores y motores eléctricos [3–8]) o la investigación de los mecanismos asociados a una determinada transformación (digamos, procesos de recristalización en metales [9]).

La mayoría de los procesos de obtención de materiales son anisótropos, esto es, poseen una o más direcciones características. Como ejemplo de ello podemos mencionar: laminado en los metales, orientación de partículas en campos eléctricos o magnéticos previo a procesos como el sinterizado, etc. Si unimos esto a que las propiedades físicas de

las cristalitas que conforman el policristal son en general anisótropas, lograremos una clara idea de la magnitud de este problema en la física del policristal.

Esta temática tiene dos fuertes vertientes, la relacionada con la investigación fundamental en policristales y la relacionada con aspectos tecnológicos de producción de los mismos. El desarrollo de los métodos de estudio y análisis de textura en ciencia de materiales, que ha tenido lugar desde el inicio de este siglo, se puede dividir en tres etapas fundamentales.

1913-1950: Nacen los primeros conceptos de orientación preferencial en metales y se relacionan con ciertos fenómenos como la aparición de orejas en los procesos de embutido profundo (Kaiser en 1927 [10]). También se logra mejorar las propiedades magnéticas de láminas de FeSi controlando, a través de recocidos, la textura de estas láminas (Goss en 1935 [10]). Los datos experimentales eran obtenidos a partir de patrones de difracción de rayos X (fotográficos) y expresados en términos de orientaciones ideales. A finales de esta etapa

se introduce el goniómetro de textura para la medición de figuras de polos por difracción de rayos X (Decker, Schulz y Harker en 1948 [10]).

1950–1970: En esta etapa se generaliza el uso del goniómetro de textura, el cual permitió la medición y recopilación de un número elevado de datos en forma de figuras de polos. Los métodos de análisis de textura se expanden a la industria de forma sistemática. Se proponen las ideas básicas para el análisis de textura a través de desarrollos en serie (Viglin en 1960 [10]) y se logran de forma clara y coherente los métodos para describir la textura con la ayuda de estas herramientas matemáticas (Roe y Bunge en 1965 [10]).

1970–actualidad: Se introduce la medición de figuras de polos a través de la difracción de neutrones (Tobisch y Betzl en 1971 [10]). Se abordan los problemas asociados a las texturas fantasmas (Matthies en 1977 [10]). El uso extensivo de los modernos medios de cómputo y el incremento de su potencia de cálculo, impulsó la generalización del uso de esta importante herramienta de la ciencia de materiales en el mundo y condujo a la introducción de técnicas como la medición automática de orientaciones locales por difracción de electrones retrodispersados (EBSD) y la aparición de métodos de análisis novedosos como la microscopía de imágenes de orientaciones (OIM) (Dingley, Wrihth y Adams a partir de 1991 [10]).

2. Textura cristalografica. Forma de caracterizarla

Para caracterizar la textura, se asocia a las cristalitas que conforman el policristal un sistema de referencia K_B y otro K_A al sistema del laboratorio (muestra). La orientación se especifica por una cantidad g que representa la rotación que lleva el sistema de referencia K_B al K_A y se escribe simbólicamente [1, 2]

$$K_B = gK_A. \tag{1}$$

Se dice que un policristal está texturado si el conjunto de valores de g que corresponden a las orientaciones de las diferentes cristalitas no poseen la misma probabilidad. Por probabilidad del conjunto de valores de g se entiende que, para determinados valores de g , se obtiene una mayor cantidad de cristalitas con esa orientación, esto es, una probabilidad más alta. Para representar a g se utilizan varias formas equivalentes entre sí, como son: matrices, componentes ideales, ángulos de Euler (ver Fig. 1), etc. La notación en ángulos de Euler es la siguiente:

$$g = g(\varphi_1, \Phi, \varphi_2). \tag{2}$$

Si construimos un espacio ortogonal donde los ejes sean los ángulos de Euler, cada valor de g se asociará a un punto en este espacio. Para el caso de una muestra con simetría de muestra triclinica y simetría cristalina triclinica, el dominio

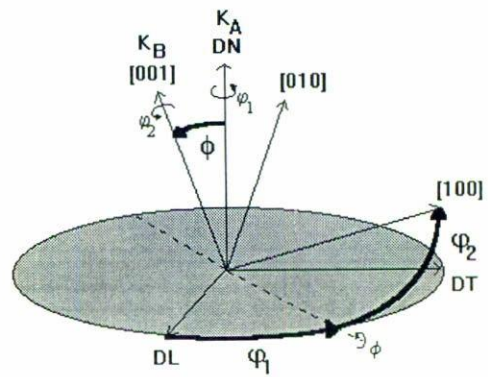


FIGURA 1. Definición de los ángulos de Euler. Se muestran los dos sistemas de referencia K_A (para el caso de una lámina DN dirección normal a la misma ND en inglés, DL dirección de laminado RD en inglés, DT dirección transversal, DT en inglés) y K_B (para el caso de sistemas como los cúbicos [001], [100], [010]) y los ángulos que llevan de uno a otro sistema.

de Euler asociado a todas las posibles orientaciones cristalinicas está comprendido entre los límites

$$0 \leq \varphi_1, \varphi_2 \leq 2\pi, \quad 0 \leq \Phi \leq \pi \tag{3}$$

La simetría cristalina se relaciona con las operaciones de rotación propias del grupo puntual cristalografico, mientras que la de la muestra se relaciona con el proceso de obtención del policristal y tiene un carácter estadístico. Cuando aumenta la simetría de muestra y cristal este volumen del espacio de Euler se reduce como resultado de la aparición de orientaciones equivalentes.

Una medida cuantitativa de la textura está dada por la función de distribución de orientaciones cristalograficas (FDOC), la cual está definida como

$$\frac{dV(g)}{V} = f(g) dg, \tag{4}$$

donde $dV(g)/V$ es la fracción de volumen de cristalitas con orientaciones definidas por rotaciones comprendidas entre g y $g + dg$. Las principales características de $f(g)$ son:

1. $f(g) \geq 0$, ya que se trata de una función de distribución.
2. $f(g) = 1$, para el caso de la muestra con distribución aleatoria de la orientación de las cristalitas.
3. $f(g) = \delta(g - g_0)$, para el caso del monocristal.

Para realizar una interpretación más amable de la FDOC, se introduce el concepto de componentes de textura, que son distribuciones $f(g)$ con geometría de gaussianas o lorenzianas centradas en las orientaciones g_i (puntos del espacio de Euler), con amplitudes y anchuras específicas, de modo que su suma genera la FDOC. Lo anterior es muy similar a lo que se hace en difracción de polvos para ajustar espectros. Lo que se trata es simplificar la compleja FDOC utilizando sólo unas componentes. En particular, a g_i (sólo la posición) se le

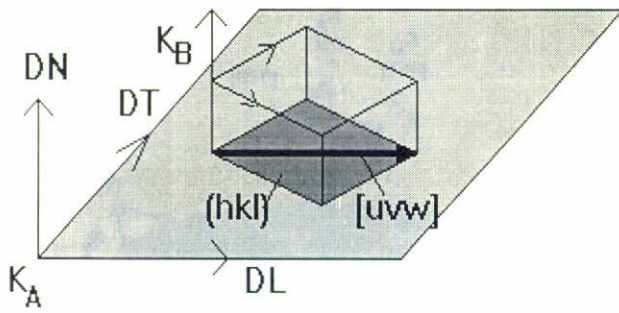


FIGURA 2. Orientación de una cristalita en la notación $(hkl)[uvw]$ con respecto a las direcciones principales de una lámina. Se aprecia que la normal al plano (hkl) es paralela a la dirección DN y que la dirección $[uvw]$ lo es a DL.

llama componente ideal y para describirla se usa, además de los tres ángulos de Euler, un equivalente cristalográfico que se representa por $(hkl)[uvw]$. Para el caso de una muestra laminada, (hkl) sería el plano cristalino de la cristalita paralelo a la superficie de la lámina y $[uvw]$ la dirección cristalográfica de la cristalita paralela a la dirección de laminado (ver la Fig. 2).

Existen otras formas de describir la textura, como son la figura de polos (FP) y la figura inversa de polos (FIP). La figura de polos es la distribución de una magnitud física en función de las diferentes direcciones \vec{y} (definidas en el sistema K_A). En particular, la figura de polos cristalográfica es la representación, en la proyección estereográfica, de la distribución espacial de una determinada dirección cristalográfica \vec{h}_i (definida en el sistema K_B) con respecto a las diferentes direcciones \vec{y} . En la Sec. 4 se explicará sucintamente cómo se miden estas magnitudes. La densidad de los polos (cantidad de vectores \vec{h}_i por unidad de ángulo sólido) sobre la proyección, se simboliza por $P_{\vec{h}_i}(\vec{y})$, esta función es una proyección de la FDOC según un determinado operador de proyección y viene dada por la ecuación,

$$P_{\vec{h}_i}(\vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\alpha, \beta = \text{const.}} f(g) d\gamma, \tag{5}$$

donde α y β son los ángulos que fijan el polo en la figura de polos y γ es el ángulo de rotación de la cristalita sobre un eje paralelo al polo de coordenadas α, β . La Ec. (5) es conocida como ecuación fundamental del análisis de textura (EFT). La figura inversa de polos es una representación estereográfica donde, para una dirección de la muestra \vec{y} , se representan las densidades de los diferentes planos cristalinos cuyas normales \vec{h}_i sean paralelas a \vec{y} . La densidad de los diferentes \vec{h}_i se representa por la magnitud $R_{\vec{y}}(\vec{h}_i)$, la cual es de crucial importancia en el cálculo de los valores medios de las propiedades físicas de un policristal.

Otras funciones de distribución se relacionan con aspectos como la orientación relativa entre cristalitas. Ejemplo de este tipo de descripciones es la función de distribución de desorientaciones (MODF, en inglés), que utiliza para su representación el espacio de Rodríguez [9].

3. La determinación de $f(g)$

La obtención de la FDOC se puede hacer de dos formas: (a) midiendo el valor de g para cada cristalita (métodos locales), y (b) midiendo una determinada propiedad proporcional a un volumen de cristalitas con una determinada orientación (métodos globales: figuras de polos o figuras inversas de polos). En el primer caso es necesario medir unas 1000 cristalitas para que los resultados tengan representatividad estadística [11]. En el segundo es necesario resolver la ecuación fundamental de la textura (EFT), esto se conoce como reproducir la FDOC a partir la FP o FIP. Para entender esta frase es necesario recordar que la FDOC es una función de tres variables y las FP o FIP lo son de solo dos. Las FP y las FIP son proyecciones según determinadas trayectorias en el espacio de Euler de la FDOC. Se necesitaría un número infinito de FP o FIP para poder reconstruir la FDOC. Existen varios métodos de reproducción, pero los más conocidos son el de los armónicos esféricos (Bunge-Roe) [1], el vectorial [12] y el de Imhof [13].

Describiremos solamente el primero por ser el más usado, dada su amplia aplicabilidad a un gran espectro de tipos de textura y además por su relación tan diáfana con el tratamiento de las propiedades físicas.

Bunge y Roe propusieron resolver la EFT a partir de los desarrollos en series de armónicos esféricos de la FDOC, la FP y la FIP. El desarrollo en serie en armónicos esféricos de la FDOC es

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} C_l^{\mu\nu} T_l^{\mu\nu}(g), \tag{6}$$

mientras que la FP se puede escribir como

$$P_{\vec{h}_i}(\vec{y}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\nu=1}^{N(l)} F_l^{\nu}(\vec{h}_i) k_l^{\nu}(\vec{y}). \tag{7}$$

Finalmente, la FIP tiene la siguiente forma:

$$R_{\vec{y}}(\vec{h}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(l)} H_l^{\mu} k_l^{\mu*}(\vec{h}). \tag{8}$$

Las bases funcionales para los desarrollos son los armónicos esféricos simetrizados bidimensionales k_l^{μ} y tridimensionales $T_l^{\mu\nu}$, evaluados en las orientaciones respectivas para las figuras de polos correspondientes y para la FDOC. Los puntos sobre las funciones son el convenio de Bunge [1] para denotar simetría de muestra y de cristal. Los $C_l^{\mu\nu}$ son los coeficientes del desarrollo en serie de la FDOC. $M(l)$ y $N(l)$ son funciones que dependen de la simetría del cristal y de la muestra, así como del valor máximo de l utilizado en el desarrollo. Es equivalente conocer $f(g)$ a los coeficientes $C_l^{\mu\nu}$, porque el resto son funciones conocidas.

El planteamiento de la EFT [Ec. (5)] en términos de los mencionados desarrollos conduce a un sistema de ecuaciones cuya solución son los coeficientes desconocidos de la FDOC en función de los coeficientes conocidos de los desarrollos en serie de las FP ($F_l^\nu(\vec{h}_i)$) o las FIP ($H_l^\mu(\vec{y})$), lo cual se expresa en los sistemas de ecuaciones

$$F_l^\nu(\vec{h}_i) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{\mu=1}^{M(l)} C_l^{\mu\nu} k_l^{*\mu}(\vec{h}_i), \quad (9)$$

$$H_l^\mu(\vec{y}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{\nu=1}^{N(l)} C_l^{\mu\nu} k_l^\nu(\vec{y}). \quad (10)$$

Para resolver las Ecs. (9) ó (10), éstas se invertirían usando las técnicas convencionales de desarrollo en funciones ortogonales; no obstante, debido a que las mediciones de las intensidades están afectadas por errores estadísticos, la obtención de dichos coeficientes se lleva a cabo mediante un proceso de ajuste de mínimos cuadrados.

Lo más frecuente es medir figuras de polos. En la práctica se pueden tener dos situaciones, la de *medición completa* de la figura, esto es, se miden todos los círculos polares (como en difracción de neutrones) y la de *medición de figuras de polos incompletas*, donde sólo se puede llegar hasta un determinado círculo polar, ya sea por desfocalización o por características de la óptica del sistema (rayos X). Los tratamientos numéricos de estos casos se realizan utilizando los algoritmos que viene dados por las Ecs. (11) y (12), donde min significa minimizar la expresión con respecto a las incógnitas, esto es los $C_l^{\mu\nu}$ principalmente.

Figuras completas de polos:

$$\sum_{i=1}^{I_p} w_i [F_l^\nu(\vec{h})_{\text{obs}} - \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{\mu=1}^{M(l)} C_l^{\mu\nu} k_l^{*\mu}(\vec{h})]^2 = \min \quad (11)$$

Figuras incompletas de polos:

$$\sum_{i=1}^{I_p} w_i \int_B [N_i \hat{P}_h(\vec{y})_{\text{obs}} - \sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} \frac{4\pi}{2l+1} C_l^{\mu\nu} k_l^{*\mu}(\vec{h}) k_l^\nu(\vec{y})]^2 d\vec{y} = \min \quad (12)$$

I_p es el numero de figuras de polo, N_i la norma de cada figura de polos (en el caso de las figuras incompletas, estas no se encuentran normalizadas a 1), $\hat{P}_h(\vec{y})_{\text{obs}}$ son los valores de las figuras de polos medidas sin normalizar y los w_i son pesos estadísticos dados por el investigador de acuerdo a su método de medición.

4. Métodos experimentales

4.1. Medición de texturas globales (TG)

Estas mediciones se realizan utilizando cabezas goniométricas que se colocan en los portamuestras de los difractómetros de polvo convencionales [14]. Su fundamento es la ley de Bragg. Se fija el ángulo 2θ entre el haz que sale del tubo (fuente de rayos X o salida de neutrones térmicos del reactor nuclear) y el detector, se hace rotar la muestra según dos ejes, uno perpendicular y el otro contenido en el plano de la muestra. Sólo aquellas cristalitas cuyos planos (hkl) cumplan la expresión $2d_{hkl} \sin\theta = \lambda$ y cuyos vectores recíprocos bisecten el ángulo formado por el haz incidente y el difractado, contribuirán a la intensidad en el detector. Se construye así una figura de polos para la intensidad difractada que es proporcional al volumen de muestra orientado en una posición determinada. Al igual que en las demás técnicas de difracción, los rayos X son más ampliamente aplicados debido a su bajo costo y a que la información que suministran en la mayoría de los casos es representativa de la muestra. Hay dos variantes, una por reflexión, preferentemente para metales y sustancias densas, que es la más usada y otra por transmisión para plásticos y sustancias transparentes a la radiación. La técnica de reflexión presenta la desventaja de que los rayos X tienen poca penetración en el material y que la sección del haz es de sólo unos pocos milímetros, lo cual da como resultado una estadística pobre cuando los granos del material no son pequeños. Esto último se compensa parcialmente haciendo oscilar a la muestra durante la medición. Adicionalmente, al inclinar la muestra durante la medición por reflexión, el haz de rayos X sufre un desenfoque que se traduce en una pérdida de intensidad. Este efecto se puede corregir teóricamente o experimentalmente a través de la medición de un policristal del mismo material bajo estudio, pero sin textura. De cualquier forma la figura polar sólo puede ser medida hasta un ángulo de inclinación de aproximadamente 80° . Haciendo una medición por transmisión se puede medir la zona faltante, sin embargo la combinación de ambos métodos no siempre es realizable. Cuando las muestras no son de tamaño de grano pequeño o cuando se tiene la sospecha de que la distribución de orientaciones de las cristalitas no es igual en el bulto y en la superficie (gradiente de textura), se emplea la técnica de neutrones, que no tiene estas desventajas. Así por ejemplo, la sección transversal del haz de neutrones es del orden de un centímetro cuadrado. Debido a que los neutrones no sufren este efecto de desenfoque y a que atraviesan la muestra producto de su baja absorción, se puede medir la totalidad de la figura polar. Medidas comparativas de ambas técnicas [15] en una muestra de cobre puro laminada 90% y otra recristalizada han demostrado una complementaridad satisfactoria.

4.2. Medición de texturas locales (TL)

Existen varios métodos para medir las TL. En general se emplean los patrones de difracción de electrones. Casi todos pre-

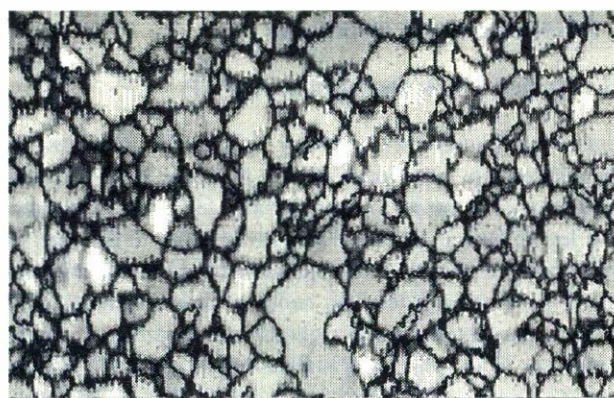


FIGURA 3. Imagen de OIM obtenida de una lámina de aleación Fe 50% Ni en estado de recristalización primaria. Las fronteras (líneas de contrastes negros) se han dibujado para desorientaciones de 5° y 15° .

sentan problemas con la estadística y sólo el que se basa en los patrones de Kikuchi de electrones retrodispersados permite un muestreo representativo [16]. La introducción, en los microscopios de barrido, de aditamentos que permiten la rápida captura e indexación de estos patrones ha abierto una nueva técnica conocida como microscopía de imagen orientacional (OIM) [17, 18]. Estos sistemas permiten la medición y el almacenamiento de las coordenadas y de los ángulos de Euler correspondientes a la orientación cristalográfica del punto de la muestra donde se hace incidir el haz. El movimiento controlado de la platina de la muestra o del haz sobre la muestra se realiza según un programa, que permite realizar un barrido cuasicontinuo sobre la misma. El paso del barrido (resolución espacial) es seleccionado por el operador. Se logra así un conjunto de datos que se almacenan en un archivo. En esta microscopía, el mecanismo de contraste viene controlado por funciones matemáticas que dependen de la orientación de los puntos donde se hace incidir el haz, lográndose así diferentes tipos de contraste. Este contraste es más gobernable que el contraste de canalaje (channeling) de la microscopía de barrido convencional para materiales cristalinos. Con esta técnica se pueden obtener también las mismas magnitudes que por las mediciones de textura globales, pero sin el problema de las llamadas "texturas fantasmas" [19], que analizaremos posteriormente. En la Fig. 3 se muestra una imagen de la microestructura de una aleación de FeNi recristalizada obtenida por esta técnica, donde se ha utilizado una función de contraste para construir fronteras de desorientación de 5° (líneas finas) y 10° (líneas gruesas). Es de destacar su apariencia similar a una imagen metalográfica convencional. En la Fig. 4 se pueden ver las FP discretas obtenidas con los datos anteriores, donde cada punto (polo) corresponde con una orientación obtenida del archivo de datos. Es evidente la distribución no aleatoria de los polos.

Esta técnica (OIM) permite la obtención de la función de distribución de desorientaciones (MODF), ya que se tienen las orientaciones y coordenadas de los diferentes puntos. Estos estudios se conocen como mesotextura [20].

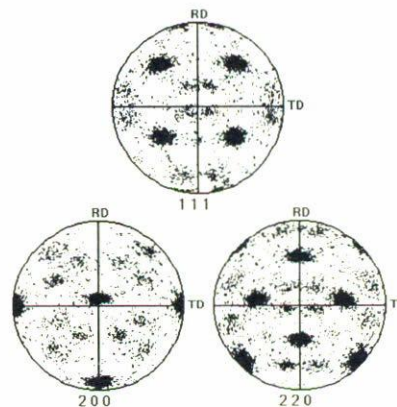


FIGURA 4. Figuras de polos obtenidas de las mediciones de OIM correspondientes con la Fig. 3.

Una solución menos exigente en cuanto a la precisión de la medición de la orientación se logra mediante el uso de figuras de corrosión [21–26].

5. Textura, materiales y procesos

Es posible, en primera aproximación, clasificar la textura de una muestra dada atendiendo a las principales componentes de textura (g_i) presentes en la misma. El patrón de textura (sistema de componentes de textura del material en cuestión) depende del material y del proceso por el cual se conformó el mismo. Así, se tienen texturas típicas de materiales con celdas FCC y BCC (materiales); y se distinguen por ejemplo *texturas de deformación y de recristalización* (procesos). Esta es una temática muy compleja dada la gran variedad de procesos tanto naturales como artificiales, así como, de materiales con diferentes estructuras [1, 9]. En la Fig. 5 aparecen algunas FP características de clasificaciones como las mencionadas. Se aprecia en ella la diferencia notable entre una textura de deformación (a),(b) y (c) y las de recristalización (b),(d) y (f) correspondientes. Se aprecia además la influencia de los elementos de aleación, comparar (a) y (b), y de la temperatura a la cual se efectúa la deformación (c) y (e).

Las diferentes componentes de texturas de un material y su fracción volumétrica, pueden variar durante un proceso [9, 27–30]. El seguir la evolución de las componentes, permite seguir la evolución del proceso mismo. Existen procesos donde aspectos como la textura cambian más rápidamente que otras magnitudes. En las Figs. 6a y 6b se muestran cortes $\varphi_2 = 0$ de las FDOC para dos etapas del proceso de recristalización de una aleación de FeNi. En éstas se aprecia el cambio en las componentes. En el caso de la muestra deformada las componentes principales son: $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ (componente Cobre), $\{011\} \langle 2\bar{1}1 \rangle$ (componente Latón) y $\{213\} \langle 3\bar{6}4 \rangle$ (componente S). Mientras que en el caso de la muestra recristalizada, las principales son: $\{001\} \langle 100 \rangle$ (componente de Cubo) y $\{122\} \langle 2\bar{2}1 \rangle$ (macla de la componente de Cubo). En el libro de Bunge [1] aparece una descripción geométrica de estas componentes en forma de diagramas que recuerdan ábacos.

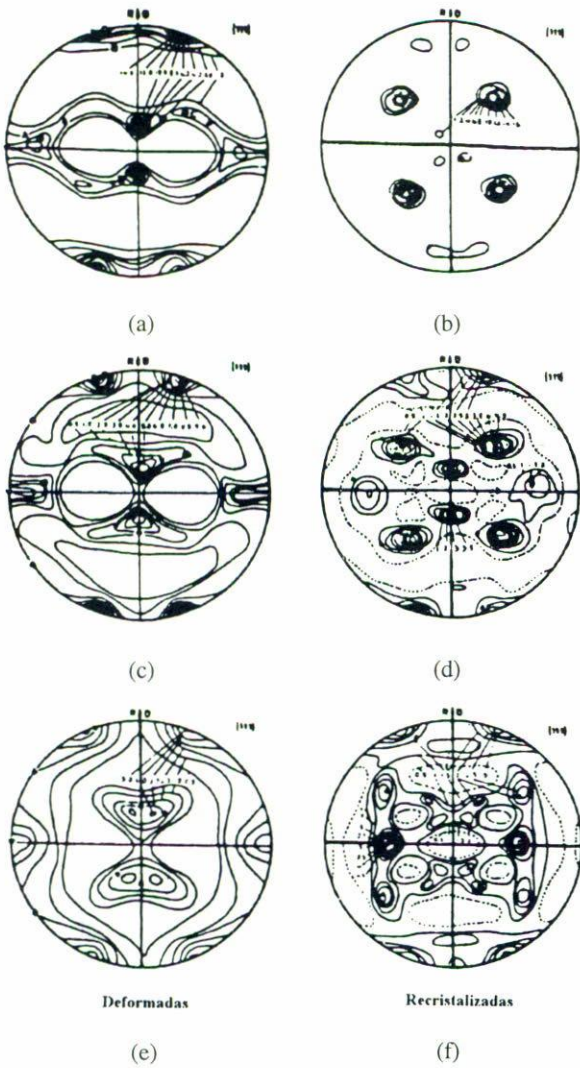
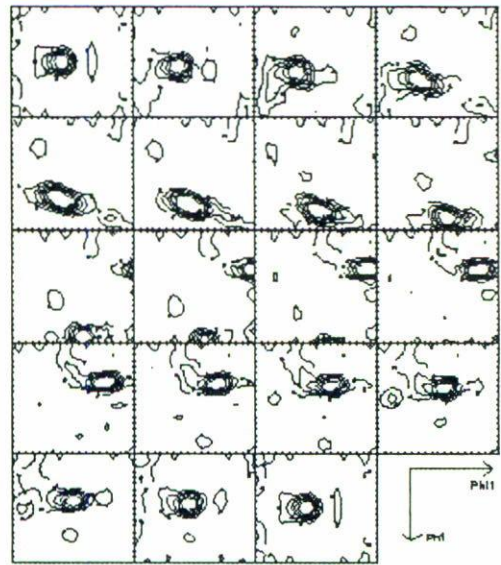


FIGURA 5. Figuras de polos (111). (a), (c) y (e) se corresponden con la textura de laminación, (b), (d) y (f) con la recristalización. (a) y (b) son de Cu. (c) y (d) son de Cu-5%Zn deformado a temperatura ambiente. (e) y (f) son de Cu-5%Zn deformado a 77 K (tomado de la Ref. 2).

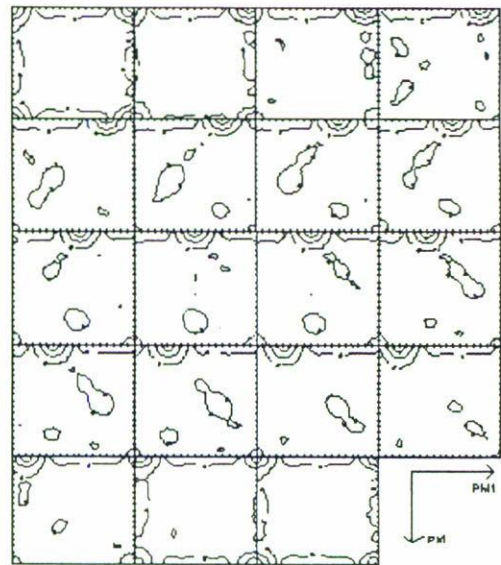
Actualmente una gran cantidad de estudios se dedican a la comprensión del surgimiento y cinética de las diferentes componentes de textura, ya que el control de estos aspectos permite la obtención de materiales con propiedades optimizadas. Conocer los comportamientos generales de la textura para diferentes materiales y su evolución de acuerdo a los diferentes procesos a que son sometidos permite rápidamente valorar posibles rutas tecnológicas [9] que experimentó el material, o a cuales será necesario someterlo para los fines que se persigan.

6. Textura y propiedades

Uno de los principales problemas teóricos de la ciencia de materiales es el pronóstico de las propiedades macroscópicas de un policristal [1, 2]. En su solución interviene un número elevado de factores, como son la heterogeneidad de fases y



(a)



(b)

FIGURA 6. (a) FDOC de una aleación de Fe 50%Ni deformada hasta un 90% (isolíneas de 2, 4, 6, 8, 10 y 12). (b) FDOC de la misma aleación en un estado de recristalización primaria (isolíneas 3, 15, 38 y 56).

estructuras, los defectos estructurales, el papel de las fronteras, los fenómenos de percolación y la textura. El análisis de texturas aporta a estos cálculos la solución de la influencia de la distribución de orientaciones. Se tienen casos en que esta influencia es decisiva, por ejemplo en el pronóstico de algunas propiedades magnéticas y mecánicas. En otras situaciones, digamos en superconductividad, la percolación es más importante (aunque la textura juega un papel no despreciable).

Muchas propiedades físicas son descritas por tensores. Sea $E_{ij\dots}$ el tensor de rango r asociado a la propiedad E en cierto monocristal. Considerando solamente el efecto de la textura y aplicando la llamada aproximación de la media aritmética, la componente del tensor que representa la propiedad considerada en el policristal cuya FDOC es $f(g)$ será:

$$\bar{E}_{ij\dots r} = \int E_{ij\dots r}(g)f(g)dg \quad (13)$$

Detalles sobre el cálculo propuesto se presentan en la obra de Bunge [1].

Un tratamiento alternativo se basa en la llamada *representación superficial* de la propiedad $E(\vec{h})$. Para el caso de monocristales, este tipo de representación viene descrita en detalle en el texto de Nye [31]. El formalismo de armónicos esféricos simetrizados de Bunge es aplicable a las representaciones superficiales y proporciona un camino para el cálculo de valores promedios. Los trabajos de Fuentes *et al.* [32–34] presentan una descripción sistemática del tratamiento por representación superficial de las propiedades de materiales policristalinos texturados.

El valor medio de la propiedad en la dirección \vec{y} del policristal, viene dado por:

$$\bar{E}(\vec{y}) = \frac{1}{4\pi} \oint E(\vec{h})R_{\vec{y}}(\vec{h}_i)d\vec{h}, \quad (14)$$

donde $E(\vec{h})$ es la expresión para la representación superficial de la propiedad considerada en el caso monocristalino.

Presentamos, como ejemplo, la magnetización de cristales cúbicos en un campo magnético uniforme [4, 5, 7, 8]. El cálculo del momento de fuerzas debido a un campo magnético (*torque magnético*) sobre una lámina magnetizada (cuando no se tiene una anisotropía uniaxial inducida) conduce a la expresión

$$M = \frac{1}{9n_4\sqrt{\pi}} \left[\frac{K_4}{5} + \frac{K_6}{55} \right] F'_4(\gamma) + \frac{1}{13n_6\sqrt{\pi}} \frac{K_6}{231} F'_6(\gamma), \quad (15)$$

donde

$$F'_4(\gamma) = 2C_4^{12}\bar{P}_4^2(90^\circ)\sin 2\gamma + 4C_4^{13}\bar{P}_4^4(90^\circ)\sin 4\gamma, \quad (16)$$

$$F'_6(\gamma) = 2C_6^{12}\bar{P}_6^2(90^\circ)\sin 2\gamma + 4C_6^{13}\bar{P}_6^4(90^\circ)\sin 4\gamma + 6C_6^{14}\bar{P}_6^6(90^\circ)\sin 6\gamma, \quad (17)$$

Los términos principales que intervienen en las expresiones (15), (16) y (17) son las constantes de anisotropía monocristalina K_4 y K_6 , los coeficientes de textura $C_l^{\mu\nu}$ y el ángulo γ entre la dirección de laminado y el campo magnético aplicado. El resto de las magnitudes son funciones conocidas [1]. Un cambio en los parámetros del monocristal, es decir en las

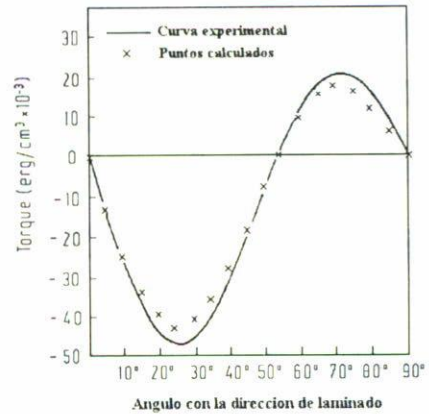


FIGURA 7. Curva de momento de fuerzas debido a un campo magnético para una aleación FeSi (tomado de [1]). Los puntos calculados se obtienen aplicando las Ecs. (15)–(17).

constantes de anisotropía, o un cambio en la textura, esto es en los $C_l^{\mu\nu}$, significan cambios en las propiedades del policristal. En la Fig. 7 se muestra una comparación entre una curva experimental $M(\gamma)$ y la correspondiente teórica para una lámina de una aleación Fe 3%Si.

La aplicación de lo anterior a otras propiedades, significa un análisis detallado de la propiedad en cuestión, ya que es necesario evaluar el peso relativo de diferentes factores estructurales. Dentro de la problemática de texturas, se debe seleccionar el tipo de representación idónea, así como la función de distribución más conveniente. Un hecho a destacar es la posibilidad de encontrar sistemas, como los cúbicos, que frente a las propiedades elásticas (tensor de cuarto rango) se comportan de forma anisótropa mientras que frente a otras propiedades como la permeabilidad eléctrica o la dilatación térmica (tensores de segundo rango) se manifiestan de forma isotropa.

7. Texturas fantasmas

Las texturas fantasmas, son un resultado de las mediciones globales. Se conoce como fantasmas a máximos ficticios que aparecen en la FDOC cuando ésta es obtenida a partir de FP medidas por métodos globales, ya sea por rayos X o por neutrones, y no se ha llevado a cabo ninguna corrección.

Esta problemática, fue descubierta por Matthies [18] y es un resultado de la ley de Friedel de la difracción (centrosimetría de la intensidad difractada) que en este caso se refleja en que se miden simultáneamente las FP de índices de Miller (hkl) y $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, esto es,

$$\bar{P}_{\vec{h}}(\vec{y}) = \frac{1}{2} [P_{\vec{h}}(\vec{y}) + P_{-\vec{h}}(\vec{y})] \quad (18)$$

Cuando se realizan los cálculos según el esquema de Bunge utilizando $\bar{P}_{\vec{h}}(\vec{y})$, se obtiene que todos los coeficientes $C_l^{\mu\nu}$ con l impar son nulos. En general esto no es cierto. Se trabaja entonces dividiendo la FDOC en dos partes, una que tiene que ver con los términos pares $\bar{f}(g)$ y otra con los im-



FIGURA 8. (a) FDOC completa simulada con una componente (001)[100]. (b) FDOC simulada con la misma componente pero donde solo aparecen los términos pares del desarrollo en serie.

pares $\tilde{f}(g)$:

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g). \tag{19}$$

En la Fig. 8a se muestra una FDOC ($f(g)$) completa simulada con una gaussiana en la posición $\{001\}\{100\}$, para el caso de un sistema hexagonal (zinc) [35], y en la Fig. 8 b) la FDOC obtenida de sólo hacer los cálculos con los coeficientes de l par ($\tilde{f}(g)$). En la Fig. 8b, se hace evidente la aparición de máximos secundarios que no tienen explicación física, por ejemplo el que aparece en $\alpha \approx 25^\circ$, $\beta \approx 90^\circ$ y $\gamma \approx 0^\circ$ (notación de Matthies para los ángulos de Euler). Además es de notar que los máximos principales no tienen el mismo valor del máximo.

Si regresamos al caso de las propiedades magnéticas de nuestro ejemplo, veremos que sólo se necesitan los coeficientes con l par. Pero hay que ser cuidadosos, pues existen propiedades donde los coeficientes con l impar son necesarios [32]. En el caso de las mediciones locales, no se presenta este problema, y no es necesario realizar correcciones.

8. Conclusiones

En la actualidad, el diseño y la producción de nuevos materiales predominantemente anisotrópicos, ha traído como consecuencia que la textura se ha convertido en un parámetro básico a determinar y controlar. Algunas aplicaciones importantes se relacionan con optimización de propiedades mecánicas y magnéticas. Lo anterior se ha visto favorecido por la introducción de métodos de medición cada día más potentes y de una comprensión cada vez más profunda de la física de la textura, la cual se encuentra fuertemente ligada a la comprensión de la física del policristal anisotrópico.

Actualmente no se concibe un trabajo, en policristales anisotrópicos, sin una caracterización de su textura y un análisis de la relación Historia \Leftrightarrow Textura \Leftrightarrow Propiedades. Este esquema analítico permite variar los procesos de fabricación de manera que se optimicen las propiedades anisotrópicas de los materiales policristalinos de interés tecnológico y fundamental.

- *. Investigador visitante del Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba
1. H.J. Bunge, *Texture Analysis in Materials Science*, (Butterworths, 1982).
 2. Hans-Rudolf Wenk, *Preferred Orientation in Deformed Metals and Rocks: An Introduction to Modern Texture Analysis*, (Academic Press, Inc, 1985).
 3. B.D. Cullity, *Introduction to Magnetic Materials*, (Addison Wesley, 1972).
 4. W.B. Hutchinson; J.G. Swift, *Texture* **1** (1972) 117.
 5. M. Pernot, R. Penelle, and P. Lacombe, *IEEE Transaction of Magnetics*, **MAG-10 N 2** (1974) 120.
 6. Chen Chin-Wen, *Magnetism and Metallurgy of Soft Magnetic Materials*, (North- Holland Publishing Company, 1977).
 7. J.A. Szipunar, *Textures and Microstructures* **11** (1989) 93.
 8. P. Blandford and J.A. Szipunar, *Textures and Microstructures* **11** (1989) 249.
 9. F.J. Humphreys and M. Hatherly, *Recrystallization and relates Annealing Phenomena*, (Pergamon, 1995).
 10. H.J. Bunge, *Fifty Years Texture in Research and Practice. Textures and Microstructure* **8/9** (1987) 55.
 11. T. Baudin and R. Penelle, *Metallurgical Trans. A* **24** (1993) 2299.
 12. A. Vadon, D. Ruer, and R. Baro, *Adv. X-ray Anal* **23** (1980) 348.
 13. J. Imhof, *Z. Metallkde* **68** (1977) 38.
 14. J. Palacios, A. Ita de la Torre, and J.L. Casas, *Rev. Mex. Fís.* **42** (1996) 136.
 15. O. Engler *et al.*, *Textures and Microstructures* **21** (1993) 195.
 16. D.J. Dingley, *Proc. Eighth Int. Conf. on Texture of Materials*, Santa Fe, (September 20–25, 1987).
 17. S.I. Wrigth and B.L. Adams, *Ninth Int. Conf. on Texture of Materials*, Avignon (September 17–21 1990); *Texture and Microstructures* **14–18** (1991) 273.
 18. B.L. Adams, S.I. Wright, and K. Kunze, *Met. Trans A* **24A** (1993) 819.
 19. S. Matthies, *Phys. Status Solid* **B29** (1979) 135.
 20. V. Randle, *Texture and Microstructure* **14–18** (1991) 745.
 21. A. Böttcher, T. Gerber, and K. Lücke, *Mat. Sci. and Technol* **8** (1992) 16.
 22. T. Baudin, F. Cruz, P. Paillard, and R. Penelle, *Archives Metall* **38** (1993) 317.
 23. T. Baudin, P. Paillard, F. Cruz, and R. Penelle, *J Appl. Cryst* **27** (1994) 924.
 24. I. Bock and G. Thomas, *Prakt. Metallogr* **32** (1995) 372.
 25. F. Cruz *et al.*, *Mater. Char.* **34** (1995) 189.
 26. F. Caleyó, F. Cruz, T. Baudin, and R. Penelle, *Proceedings of 11th International Conference on Textures of Materials*, ICO-TOM 11, Sept. 16–20 (1996) Xi'an, China. Edited by Z. Liang, L. Zuo, and Y. Chu.; *International Acad. Publishers* **2** (1996) 957.
 27. M. Morita and K. Fukui, *Journal of Japan Institute of Metals* **37** (1973) 835.
 28. M. Morita and K. Fukui, *Journal of Japan Institute of Metals* **37** (1973) 861.
 29. P. Balladon and E. Josso, in: *3ème colloque européen sur les textures de déformation et recristallisation des métaux et leurs applications industrielles*, edited by R. Faivre and R. Penelle, (Pont-à-Mousson, Société Française de Métallurgie, 1973), p. 453.
 30. G. Béranger, F. Duffaut, J. Morlet, and J-F. Tiers, *The Iron-Nickel Alloys*, (Tec-Doc. Lavosier, Paris), 1996), ISBN: 2-7430-0113-5, 195.
 31. J.F. Nye, *Physical Properties of Crystals: Their representation by tensors and matrices*, (Clarendon Press., Oxford, 1957).
 32. L. Fuentes and O. Raymond, *Texture and Microstructures* **23** (1995) 221.
 33. O. Raymond, L. Fuentes, and J.I. Gómez, *Texture and Microstructures* **28** (1996) 81.
 34. O. Raymond, L. Fuentes, and J.I. Gómez, *Texture and Microstructures* **28** (1996) 95.
 35. F. Cruz, M. Tanus, J. Tobisch, and R. Penelle, *Texture and Microstructures* **14–18** (1991) 1159.