

Software para cálculos de textura

Pablo C. Pérez Luna¹, Francisco Cruz Gandarilla², Ana M. Salcedo Garrido.¹

¹Departamento de Ingeniería Química Petrolera, ESIQIE-IPN, México D.F., México

²Departamento de Física, ESFM-IPN, México D.F., México

Teléfono (55) 5729-6000 Ext. 55240 E-mail: pperez11700@alumno.ipn.mx

Resumen — La importancia del estudio de la textura cristalográfica en materiales anisotrópicos obtenidos por diferentes procesos (deformados, recocidos, etc.) radica en que al conocer la orientación preferencial de los cristales del material se pueden predecir sus propiedades.

En el presente trabajo tiene como objetivo el valorar la calidad y exactitud de los programas utilizados para el procesamiento de las mediciones de textura global. En particular nos centraremos en el sistema cristalográfico hexagonal (magnesio). Estudiaremos Figuras de Polos (FP) y las Funciones de Distribución de las Orientaciones (ODF). Los programas utilizados fueron Atex, Beartex, Labotex y Mtex.

Se obtuvo que las Figuras de Polos recalculadas son similares en los cuatro programas. En el caso de las ODF recalculadas para el caso de Atex los valores se recorren 30° en ϕ_1 , esto se debe, al parecer porque las ODF se calculan con diferentes convenios para la asignación del sistema cartesiano a la celda unidad del cristal. En el caso de Atex se calcula con un convenio implícito sin posibilidades de cambiarlo a diferencia de como ocurre en Mtex y Labotex. Esto crea dificultades en la interpretación de las ODF

Palabras Clave – Calculo de la textura en sistemas hexagonales, Figuras de Polo (FP), Funciones de la distribución de las Orientaciones (FDOC o ODF), Atex, Beartex, Labotex, Mtex.

Abstract — The importance of studying the crystallographic texture in anisotropic materials obtained by different processes (deformed, annealed, etc.) lies in knowing the preferential orientation of the material's crystals for predict the physical properties.

The objective of this work is to value the quality and accuracy of the programs used for the processing of global texture measurements. We will focus on the hexagonal (magnesium) crystallographic system. We have study Pole Figures (FP) and Orientation Distribution Functions (ODF). The programs used were Atex, Beartex, Labotex and Mtex.

It was found that the recalculated Pole Figures are similar in the four programs. In the case of the ODFs recalculated for the case of Atex, the values are shifted 30° in ϕ_1 , this is apparently because the ODFs are calculated with different convention for assigning the cartesian system to the crystal unit cell. In the case of Atex, it is calculated with a single convention without the possibility of changing it, as occurs in Mtex and Labotex. That creating difficulties in the interpretation of ODFs.

Keywords — Texture calculation in hexagonal systems, Pole Figures (FP), Orientation Distribution Functions (FOD or ODF), Atex, Beartex, Labotex, Mtex.

I. INTRODUCCIÓN

La textura cristalográfica es un fenómeno relacionado a la distribución de las orientaciones de los cristales en un policristal, el cual es resultado ya sea por fenómeno natural o por un proceso de fabricación los cuales rara la vez tienen una distribución al azar, y que están presentes en la mayoría de los materiales, estas van apareciendo y evolucionando con forme los tratamientos a los que se somete el material, logrando así la aparición de orientaciones preferidas o en otras palabras la textura [1] [2].

Es importante el conocer cómo se distribuyen las orientaciones de los cristales individuales g_i (definiremos posteriormente esta magnitud) ya que con esto podremos conocer propiedades generales de los materiales que se estudian. Por ejemplo, en la figura 1 en donde los granos i de volumen “V” tienen diferentes orientaciones. Los granos con las mismas orientaciones (g_i) están codificados con diferentes escalas de gris lo que nos lleva a decir cual orientación es la que se encuentra en mayor proporción (mayor volumen) y a su vez con esto se puede conocer los valores de las propiedades del material [2].

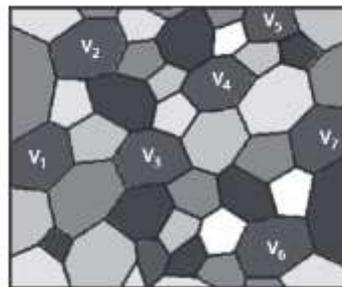


Fig. 1. Representación de la microestructura formada por diferentes granos con diferentes orientaciones g_i de volumen V_i con diferentes orientaciones [2].

A. Orientación del cristal

La orientación del cristal está definida por dos sistemas de coordenadas ortogonales, en donde K_A se asocia a la muestra y K_B se asocia al cristalito. El sistema de K_A se orienta según direcciones características de la muestra, en una lámina se utilizan la dirección de laminación (LD, “RD Rolling Direction” en inglés), la dirección transversal (TD) y de la dirección normal (ND, “Normal Direction” en inglés).

Para pasar de un sistema a otro matemáticamente se necesitan 6 parámetros, tres de ellos son para ubicar el origen del sistema de coordenadas de K_B con respecto a K_A y los otros tres para especificar las rotaciones que hagan coincidir los ejes de ambos sistemas. Estas rotaciones se representan con una matriz “g” que lleva del sistema de laboratorio al del cristalito y se representa en la siguiente ecuación [3] [4]:

$$K_B = gK_A \quad (1)$$

B. Definición de los ángulos de Euler.

Existen varias formas de caracterizar la parte rotacional la orientación, una de las más usadas para el análisis cuantitativo de la textura, es mediante los tres ángulos de Euler que son: φ_1, ϕ y φ_2 . Estos permiten determinar la orientación de manera más sencilla mediante 3 rotaciones consecutivas (Bunge).

Con los tres ángulos de Euler, se puede representar la orientación final de K_B con respecto de K_A . Esto resulta en la siguiente expresión:

$$g = g(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \quad (2)$$

Estos ángulos de Euler están sujetos a límites producto de la periodicidad de las rotaciones, estos límites se utilizan para construir un espacio conocido como espacio de orientaciones o espacio de Euler, los cuales son [4]:

$$0 \leq \varphi_1 \leq 2\pi ; 0 \leq \phi \leq \pi ; 0 \leq \varphi_2 \leq 2\pi$$

C. Definición de las Función de Distribución de las Orientaciones (ODF por sus siglas en inglés).

Se necesita una descripción estadística para poder representar todas y cada una de las orientaciones de los cristalitos presentes en una muestra. Dicha descripción se realiza utilizando el espacio de Euler en donde cada punto con coordenadas $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ corresponde con una posible orientación g, como se muestra en la figura 2.

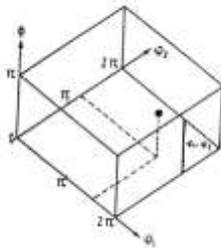


Fig. 2. Representación del espacio de Euler [6]

En un policristal texturado, a diferencia de un policristal con orientaciones aleatorias, existe una distribución no

aleatoria de puntos aglomeradas en ciertas posiciones o, en otras palabras, orientaciones preferentes [3]. Sabiendo esto la fracción volumen de los cristalitos de cada orientación g, se puede representar con una función de densidad:

$$f(g)dg = \frac{dV(g)}{V} \quad (3)$$

En donde $\frac{dV(g)}{V}$ representa la fracción volumétrica de los cristalitos con orientación g dentro del volumen del material, $f(g)$ es la ODF y además:

$$dg = \frac{1}{8\pi} \sin \phi d\varphi_1 d\phi d\varphi_2 \quad (4)$$

Para que sea una función de densidad estadística se debe de cumplir que $f(g) = 1$ en el caso de una muestra donde los cristalitos estén distribuidos al azar. Esta $f(g)$ se puede representar mediante isosuperficies o isolíneas en el espacio de Euler dependiendo si se usa una representación 3D o en cortes 2D [6].

D. Componente de textura y componente de textura ideal

Para facilitar la interpretación de la textura y sistematizar los resultados se introduce el concepto de “componentes de textura” y “componentes ideales”, los cuales se describen a continuación.

Componentes de textura: Se define una función simple (Gaussiana o Lorentziana) $f_i(g, g_i, b_i)$ donde:

f_i = Función Gaussiana o Lorentziana normalizada (La integral en el espacio Euler es 1.

g_i = Posición del centro de la Gaussiana o Lorentziana conocida como componente ideal.

b_i = Semiancho.

La ODF se representa como la suma de las funciones de este tipo de la siguiente manera:

$$f(g) = \sum_i w_i f_i(g, g_i, b_i) + F \quad (5)$$

$$1 = \sum_i w_i + F \quad (6)$$

Donde:

w_i = Fracción volumen del componente i.

F = Fracción de los cristalitos no orientados preferentemente (fondo).

Si, por ejemplo, el valor de F es igual a n, nos dice que 1-n corresponderá a la fracción de cristalitos orientados (orientaciones preferidas) y n será la fracción de volumen de los cristalitos con sus orientaciones aleatorias. El conocimiento del fondo es de vital importancia ya que con su

información podremos saber que tan texturada es la muestra [3] [4].

g_i Se denomina componente ideal donde solo interesa la posición en el espacio de Euler no interés ni su peso, ni su ancho.

Además de los ángulos de Euler se puede caracterizar la posición de g_i , utilizando notación cristalográfica (notación de Miller generalizada $(hkl)[uvw]$ donde para el caso de una lámina (hkl) es paralelo a la superficie de esta y $[uvw]$ a la dirección de laminado (en el caso de muestras con otras geometrías es necesario especificar dichas direcciones)). Es posible relacionar los ángulos de Euler con la notación cristalográfica para el caso de una simetría cubica de cristal las ecuaciones serían las siguientes [4] [6]:

$$h = \text{sen}\varphi_1 \cos\varphi_2 + \cos\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 \cos\phi \quad (7)$$

$$k = \text{sen}\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 + \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\phi \quad (8)$$

$$l = \cos\varphi_1 \text{sen}\phi \quad (9)$$

$$u = \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \text{sen}\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 \cos\phi \quad (10)$$

$$v = -\cos\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 - \text{sen}\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\phi \quad (11)$$

$$w = \text{sen}\varphi_1 \text{sen}\phi \quad (12)$$

E. Definición de las figuras de polos (FP).

La figura de polos es una proyección estereográfica que ayuda a determinar la distribución de una dirección cristalográfica (normal a el plano (hkl)) de los diferentes cristales que se encuentran en el material policristalino con respecto al sistema coordenado de la muestra, donde únicamente los cristalitas con planos (hkl) serán representados [2]. Esto es, se toma la normal a el plano (hkl) de cada cristalito y se prolonga hasta la esfera de referencia, proyectándolo posteriormente [5]. Una representación gráfica se muestra en la figura 3.

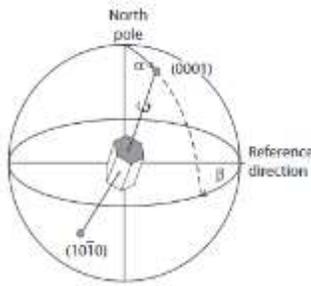


Fig. 3. Orientación del plano Basal (0001) de un cristal hexagonal descrita por los ángulos Polar y Azimutal respecto a un sistema coordenado de la muestra [2].

F. Materiales hexagonales y su importancia.

Las texturas de los materiales hexagonales han atraído mucho interés debido a sus extensos usos, como son en revestimientos, materiales estructurales en la industria aeroespacial, aplicaciones en almacenamiento de hidrogeno etc. [7].

En la literatura se han realizado múltiples estudios sobre materiales cúbicos, no es así en el caso de los hexagonales. El cálculo de la ODF desde la medición de las figuras de polos hasta la interpretación de la ODF se fundamenta en una serie de softwares que resuelven la ecuación fundamental de la textura expresada en la ecuación 13 y 14 [2] [3].

$$P_{\vec{h}}(\vec{y}) = \hat{P}(\vec{h}, \vec{y}, g) f(g) \quad (13)$$

$$P_{\vec{h}}(\vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\alpha, \beta = cte} f(g) dy \quad (14)$$

Hay dos grandes Grupos de software los pagados (la gran mayoría vendidos por los fabricantes de los equipos) y los libres. En particular entre los pagados está el software Labotex [8] y entre los libres los softwares Atex [9], Beartex [10] y Mtex [11].

En el presente trabajo tiene como objetivo el valorar la calidad y exactitud de los programas utilizados para el procesamiento de las mediciones de textura global mediante la utilización figuras de polos de componentes simulados para el caso de sistemas hexagonales.

G. Problemática del procesamiento de los cálculos de los materiales hexagonales.

Hay una consideración que se debe de tomar en cuenta al momento de procesar los materiales hexagonales. Esta consideración es la relación de las coordenadas de la muestra ortonormal K_B que se asocia al cristal y el sistema cristalino.

El primer convenio es cuando los ejes cartesianos X y Y (K_B) del cristal son paralelos a los ejes A y B* (* dirección reciproca) del cristal, la diferencia entre las direcciones B y Y es de 30° como se muestra en la figura 4a. El segundo convenio B y C del cristal son paralelos con Y y Z, la diferencia entre A y X es de 30° como se muestra en la figura 4b [12]. El uso de uno u otro convenio produce desplazamiento de las componentes de textura en el espacio de Euler

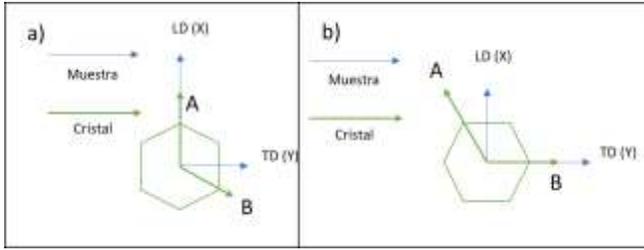


Fig. 4. Convenios de las coordenadas del cristal con respecto de la muestra

II. METODOLOGÍA

Para este artículo se utilizaron los componentes ideales para materiales HCP obtenidos de Y.N. Wang & J.C. Huang [13] (ver tabla 1). Para modelar las FP que se utilizaron para evaluar el cálculo de las FP y ODF (sustituyendo las experimentales) en cada uno de los programas. Se selecciono una simetría de muestra ortogonal (rangos de 0° a 90° para φ_1 y ϕ , para φ_2 con rangos de 0° a 60°) y con el convenio de la figura 4a. Las FP modeladas se obtuvieron en el formato Beartex (“.xpe” que se pueden leer en los cuatro programas).

TABLA I.
COMPONENTES DE TEXTURA

Componente de textura	φ_1	ϕ	φ_2
$(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$	0	0	0
$(0001) \langle 1\bar{2}10 \rangle$	60	0	0
$(10\bar{1}0) \langle 0001 \rangle$	90	90	60
$(01\bar{1}0) \langle 0001 \rangle$	90	90	0
$(11\bar{2}0) \langle 0001 \rangle$	90	90	30

En programa Beartex, se utilizó como referencia debido a su veracidad y antigüedad en el estudio de la textura y temas relacionados, la simulación de Figuras de polos y ODF requiere de los ángulos de Euler con notación de Bunge para cada plano y dirección. Como material hexagonal se utilizó en Magnesio con sistema cristalino $a=3.2025$, $b=3.2095$ y $c=5.2104$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$ y $\gamma = 120^\circ$ respectivamente.

Labotex programa que tiene un costo al público, se utilizó como programa de comprobación para las Figuras de Polos y las ODF, además con este se pudo verificar los componentes de textura ideales y graficar las Figuras de Polos y ODF con los dos convenios para su posterior comparación con Atex, Beartex y Mtex.

Mtex, se utilizó como programa de verificación de convenios como en el caso de Labotex, en donde se obtuvieron las figuras de las ODF y FP para su posterior análisis con las obtenidas en los programas antes mencionados.

Atex, se utilizó como programa de prueba, la razón de esto fue que este programa es relativamente nuevo y de libre acceso sin embargo contiene aun cierto tipo de errores que los desarrolladores siguen corrigiendo.

III. RESULTADOS

En la figura 5 se muestran las FP (100) recalculadas correspondientes a la componente $(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$.

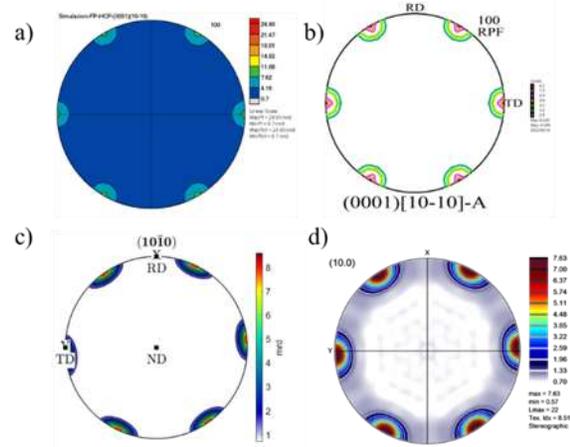


Fig. 5. Figuras de Polos Recalculadas en a) Beartex, b) Labotex, c) Mtex y d) Atex.

Las Figuras de polos son similares para los cuatro programas.

En la figura 6 se muestran las secciones del ODF correspondientes a $\varphi_2 = 0^\circ$ correspondientes a la componente $(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$.

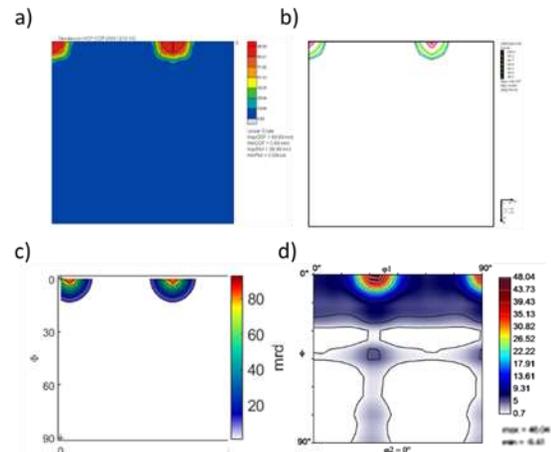


Fig. 6. ODF recalculadas en a) Beartex, b) Labotex, c) Mtex y d) Atex.

El ODF para los programas Beartex, Labotex y Mtex son similares, en el caso de Atex el máximo se muestra trasladado en 30° que correspondería con la utilización del convenio de

figura 4b. Si interpretáramos este máximo con el segundo convenio tendríamos resultados erróneos.

Otro aspecto importante en los programas es que exista una coincidencia entre las FP y ODF calculadas a partir de figuras experimentales y FP y ODF calculadas utilizando componentes ideales. En la figura 7 a y b se encuentran las figuras de polos (100) simuladas utilizando la componente $(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$ y el convenio de la figura 4a.

En la figura 7 a y b se encuentran las figuras de polos (100) simuladas utilizando la componente $\varphi_1 = 0^\circ$, $\phi = 0^\circ$ y $\varphi_2 = 0^\circ$ y el convenio de la figura 4a y 4b.

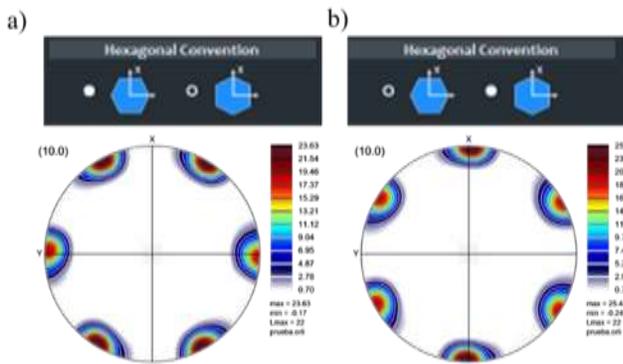


Fig. 7. Figuras de polos simuladas en: a) Atex convenio 4a y b) Atex convenio 4b.

En la figura 8 a y b se muestran las secciones del ODF correspondientes al corte en $\varphi_2 = 0^\circ$. En ambas simulaciones se utilizaron ambos convenios. En el caso de la figura 8a, parece que el cálculo fuera hecho con el de la figura 4b y no el de la figura 4a.

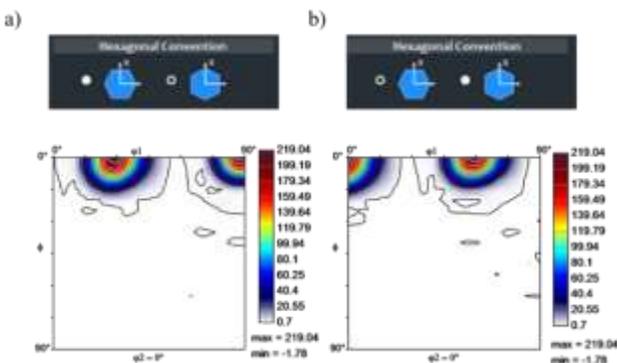


Fig. 8. ODF simuladas en: a) Atex convenio 4a y b) Atex convenio 4b.

IV. DISCUSIÓN

Si la figura 8a la analizáramos con las coordenadas que se requieren según el convenio de la figura 4a el máximo que

debe caer en $(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$ cae en $(0001) \langle 1\bar{1}00 \rangle$ (convenio Fig. 4a) mientras que un máximo con coordenadas $\varphi_1 = 30^\circ$, $\phi = 0^\circ$ y $\varphi_2 = 0^\circ$ en el convenio Fig 4b correspondería con el valor $(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$ lo cual se presta a una mala interpretación.

En la figura 5, las 4 Figuras de Polo recalculadas son similares o equivalentes, lo que indica a simple vista que los cuatro programas pueden procesar de forma idéntica los archivos ".xpe" modelados para recalculas Figuras de polos. Sin embargo, esto no se observa en las ODF calculadas, esto se puede visualizar en la figura 6, en donde las ODF recalculadas en Beartex, Labotex y Mtex se nota en una semejanza en la posición del primer máximo (correspondiente al plano $(0001) \langle 10\bar{1}0 \rangle$ con $\varphi_1 = 0^\circ$, $\phi = 0^\circ$ y $\varphi_2 = 0^\circ$). Sin embargo, esto último no se observa en la figura 6d, en donde el máximo correspondiente está corrido 30° en φ_1 (como si se utilizara el convenio de la figura 4b cambiando las coordenadas del componente simulado).

Lo anterior nos permite decir que Beartex, Labotex y Mtex cumplen con el procesamiento de las Figuras de polos a través de un archivo experimental lo que resulta de una ODF que corresponde con las componentes de la FP medida además la FP calculadas a partir de las mediciones y las simuladas son coherentes, que es lo que se necesita para realizar un análisis correcto. Este no es el caso para Atex, ya que al parecer Atex se usan convenios diferentes para el cálculo de las FP experimentales y las simuladas lo que puede llevar a una interpretación incorrecta de la textura.

V. CONCLUSIONES

El procesamiento figuras de polo experimentales en Beartex, Labotex y Mtex resultaron satisfactorios lo cual se obtuvo en el presente trabajo. Las FP y ODF fueron similares a las recalculadas por los anteriores programas en donde los máximos coinciden con las coordenadas establecidas. A simple vista en Atex pareciera que procesa correctamente los archivos experimentales o recalculados y las simulaciones, pues las Figuras de Polos son idénticas en ambos casos para los 3 programas anteriores, sin embargo en las ODF tanto recalculadas como simuladas existe una discrepancia con las ODF obtenidas en Beartex, Labotex y Mtex pues el primer máximo correspondiente al componente ideal estudiado no concuerda con el máximo representado en las ODF salientes de Atex en donde se observa un recorrido de este máximo de 30° en φ_1 , indicando que trabaja con otro convenio (Convenio de la Fig. 4b, previamente expuesto) a pesar que en la simulación según el programa utiliza el convenio de la Fig. 4a, sin embargo grafica la ODF diferente. Una desventaja de Atex es que cuando procesa el archivo experimental lo

hace con un sistema de coordenadas automáticamente no teniendo acceso a seleccionar el convenio a utilizar lo que hace difícil una correcta interpretación del material de estudio.

Debido a que los estudios de materiales Hexagonales carecen de amplios estudios en comparación con los materiales cúbicos, es de vital importancia que se utilice un programa computacional para el estudio de estos materiales que sea confiable. Atex es un programa de libre descarga, sin embargo, es relativamente nuevo por lo que aun cuenta con problemas que se pueden remediar; lo ideal sería trabajar con Atex (se actualiza regularmente). Considerando lo anterior y tomando en cuenta las observaciones y discusiones anteriores, la elección del programa deberá ser acorde a las necesidades, exactitud y fiabilidad que se necesite en el estudio.

REFERENCIAS

- [1] J. Sánchez Ramos, «Extinción de la difracción de rayos x en una muestra de cobre con textura de recocido,» Tesis de licenciatura publicada. Instituto Politécnico Nacional., Ciudad de México, 2007.
- [2] O. Engler y V. Randle, Introduction to texture analysis, New York: Taylor & Francis Group, 2010.
- [3] F. Cruz Gandarilla, F. Caleyo Cereijo, L. Fuentes Cobas y J. Palacios Gómez, «Textura cristalográfica,» *Revista Mexicana de Física*, vol. IV, n° 3, pp. 222-230, 1998.
- [4] H. F. Mendoza Leon, «Caracterización de la evolución de la textura en una aleación Fe-3% Si obtenida por el método de Granos Orientados Convencionalmente (CGO),» Tesis de maestría publicada. Instituto Politécnico Nacional. , Ciudad de México, 2005.
- [5] B.D. Cullity, «X-Ray Diffraction» Addison-Wesley Publishing, Inc., Massachusetts, 1956.
- [6] F. Cruz Gandarilla y J. G. Cabañas Moreno, «Microscopia de Imagen Orientacional,» Sociedad mexicana de Cristalografía A.C., Ciudad de México, 2007.
- [7] U.F. Kocks, C.N. Tomé y H.-R. Wenk, Texture and Anisotropy, United Kingdom: Cambridge University Press, 1998.
- [8] Labosoft, «Labotex, The texture Analysis Software Version 3.0,» Product Licenced, 1997-2007.
- [9] Fundenberger, B. Beausir y J.-J., «Analysis Tools for Electron and X-ray diffraction, ATEX-software, www.atex-software.eu,» Université de Lorraine - Metz, 2017 Version 3.17.
- [10] H.-R. Wenk, S. Matthies, J. Donovan y R. Vasin, «Beartex Software» University of Berkeley, Copyright (c), Version 5.3 01/15/2020.
- [11] Free Software Fundation INC., «Mtex,» Boston USA, Junio 1991 Version 2.
- [12] Labosoft, «Hexagonal Axes: Conventions and Conversions» Labotex, The Texture Analysis Software Software for Windows Version 3.0, 1997-2007.
- [13] Y.N. Wang y J.C. Huang, «Texture Analysis in Hexagonal Materials» ELSEVIER, Institute of Materials Science and Engineering, National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan 804, RO China. Dalian University of Technology, Dalian 116024, PR China, 2002.