

PROGRAMAS PARA EL PRONOSTICO DE PROPIEDADES FISICAS EN POLICRISTALES TEXTURADOS

Oscar Raymond¹, José Iván Gómez¹, Luis Fuentes²

⁽¹⁾ Instituto Superior Pedagógico Enrique José Varona. Ministerio de Educación.

⁽²⁾ Instituto de Cibernética, Matemática y Física. Academia de Ciencias de Cuba.

RESUMEN

Se presenta un sistema de procedimientos y programas que posibilitan el pronóstico de propiedades físicas en policristales texturados. Las propiedades consideradas son todas aquellas cuya representación cuantitativa esté asociada a tensores de rango $r \leq 4$. Se aplica el tratamiento de funciones esféricas de Bunge. Se describe el paquete de programas que ha sido elaborado.

ABSTRACT

A program package for the prediction of physical properties corresponding to textured polycrystals is presented. All properties associated to tensors of rank $r \leq 4$ are considered. Bunge's spherical functions treatment is employed. Personal computer codes for data treatment are described.

INTRODUCCION

Se reporta la elaboración de un paquete de programas para ordenadores personales, destinados a la predicción de las propiedades físicas medias de materiales policristalinos texturados. El objetivo del trabajo es aportar una herramienta que sistematice el cálculo de un espectro amplio de propiedades en un diapasón extenso de materiales y tipos de muestras.

La base teórica empleada es el desarrollo en armónicos esféricos simetrizados de las funciones de textura y de las propiedades físicas de los cristales, según el tratamiento de Nye [1] y Bunge [2].

TEORIA

Sea $E(h)$ la representación escalar de la propiedad monocristalina \mathbf{E} asociada a un tensor de rango r . El desarrollo en armónicos esféricos simetrizados de $E(h)$ se escribe:

$$E(h) = \sum_{l=0}^r \sum_{\mu=1}^{M(l)} e_l^\mu k_l^\mu(h) \quad (2)$$

El vector $h = (\Phi, \beta)$ describe la dirección de observación; los coeficientes e_l^μ están determinados por las componentes tensoriales de \mathbf{E} ; $k_l^\mu(h)$ son armónicos esféricos simetrizados según la clase cristalina; los límites $M(l)$ dependen del grupo puntual.

La propiedad media policristalina, en la llamada aproximación de Hill, está caracterizada por una ecuación isomorfa a (1), con la simetría de la textura en el lugar de la simetría cristalina. Los coeficientes del desarrollo se determinan por la función de distribución de orientaciones y por los parámetros monocristalinos de acuerdo con la fórmula:

$$e_l^\nu = \frac{1}{2l+1} \sum_{\mu=1}^{M(l)} C_l^{\mu\nu} e_l^\mu \quad (1)$$

En (2), los $C_l^{\mu\nu}$ son los coeficientes del desarrollo de la función de distribución de orientaciones.

PAQUETE DE PROGRAMAS

El presente sistema está formado por tres programas: SRT.EXE, PIEZO.EXE y

ELASTIC.EXE. El primero permite el pronóstico de las propiedades asociadas a tensores de segundo rango, por ejemplo: susceptibilidades eléctrica y magnética, conductividad eléctrica y dilatación térmica. El segundo se corresponde con el cálculo de la piezoelectricidad, tensor de tercer rango. El último vale para tensores de cuarto rango, como el de elasticidad.

Los programas fueron elaborados utilizando técnicas de programación orientada a objeto, con el uso del lenguaje Borland C++ versión 3.1 [3] y utilizan la interface gráfica Microsoft Windows versión 3.x [4]. Los datos de entrada consisten de las componentes tensoriales de la propiedad considerada y los necesarios coeficientes del desarrollo en armónicos esféricos de la función de distribución de orientaciones. La salida está dada por la superficie representativa de la propiedad escalar en el policristal.

APLICACIONES

- I) Pronóstico de la constante dieléctrica en policristal de $\text{CoHgCl}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (Figura 1).

Tensor dieléctrico para el monocristal según [5]. Se presentan tres proyecciones estereográficas.

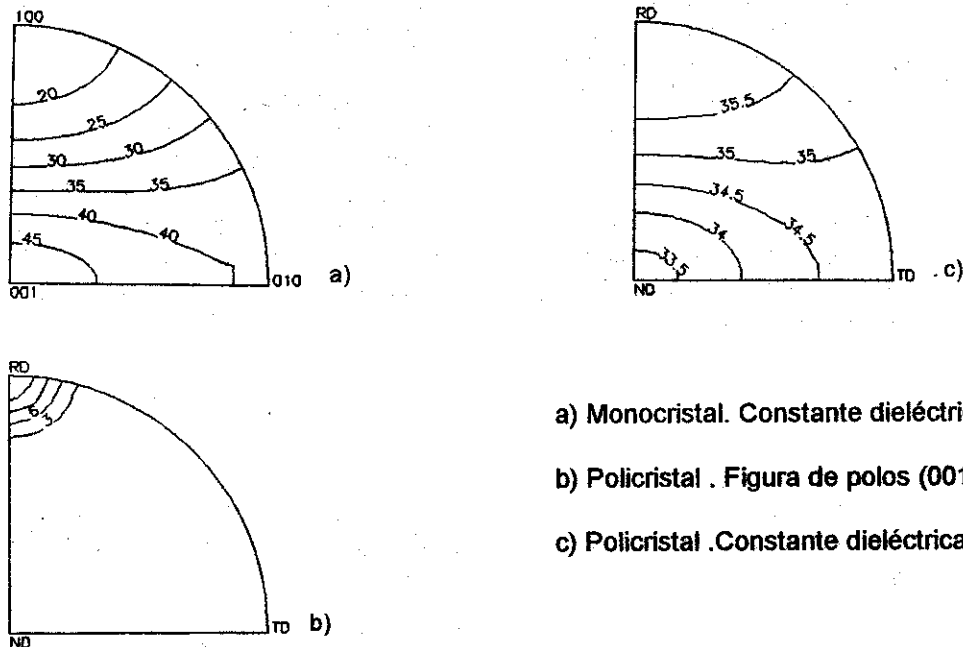
La primera caracteriza la constante dieléctrica del monocristal en función de la dirección cristalográfica. La segunda representa la Figura de Polos (0,0,1) de una muestra hipotética con textura afilada. La tercera muestra el pronóstico de la constante dieléctrica asociada al policristal considerado.

- II) Cálculo del módulo piezoeléctrico para cerámica de titanato de bario con textura de fibra (Figura 2).

La curva de puntos representa la dependencia del módulo piezoeléctrico longitudinal respecto al ángulo polar ω , en el caso monocristalino. Los valores numéricos de las componentes del tensor piezoeléctrico han sido tomados de [6]. Se consideran dos texturas de fibras ideales, con Figuras Inversas de Polos descritas por dependencias Gaussianas:

$$R = R_0 \exp - \left(\frac{\omega}{\phi} \right)^2 \quad (3)$$

Φ (phi) caracteriza el ancho de la distribución de orientaciones. Las curvas continua y discontinua muestran los pronósticos de módulos piezoeléctricos para los casos $\Phi = 10^\circ$ y $\Phi = 30^\circ$.



- a) Monocristal . Constante dieléctrica
 b) Policristal . Figura de polos (001)
 c) Policristal . Constante dieléctrica

Figura 1: Constante dieléctrica policristalina

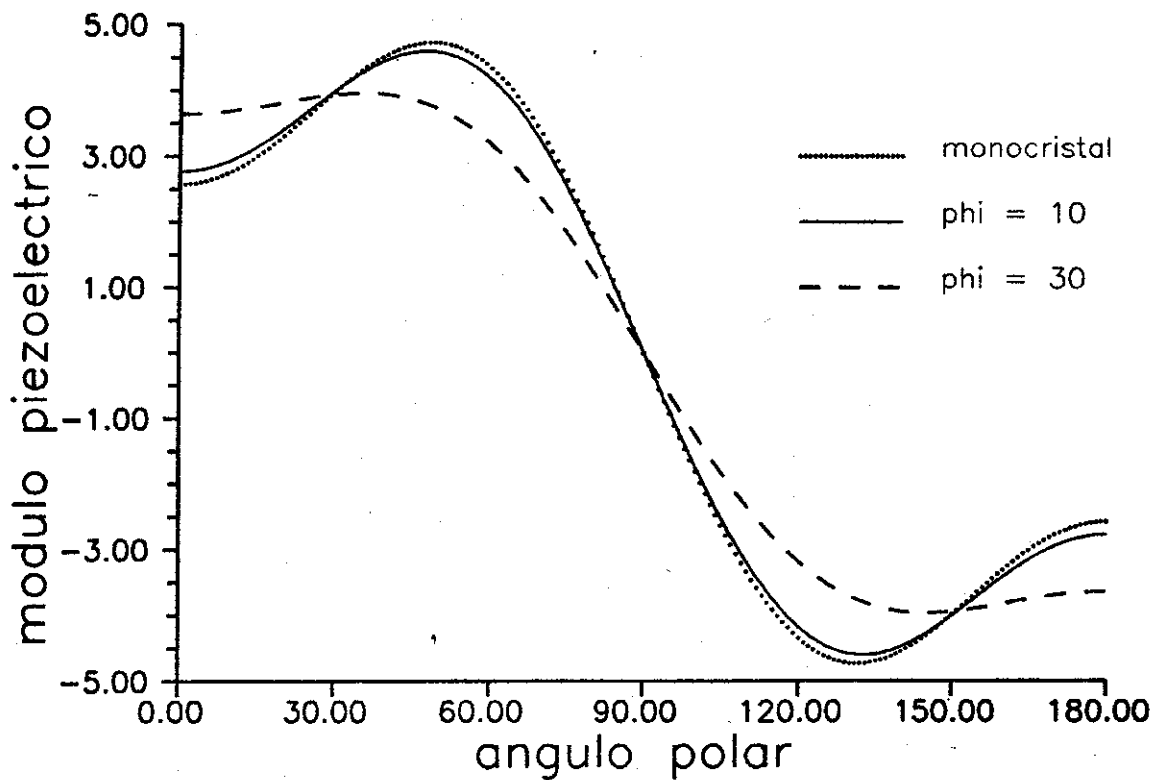


Figura 2: Piezoelectricidad en cerámicas de titanato .

REFERENCIAS

J. F. Nye: "Physical Properties of Crystals", 1957.

H. J. Bunge: "Texture Analysis in Materials Science, Mathematical Methods", 1982.

James W. McCord: "Borland C++ Programmer's Reference", 1991.

Borland International, Inc: "Object Windows for C++", 1991.

S. Sreehari, G. Satyanandam, T. F. Sundar Raj, W. B. Westphal: "Dielectric Properties of Cobalt Mercuric Chloride Tetrahydrate Single Crystals at Room Temperature", 1990.

I. S. Zheludev: "Fizika Kristallov y Symmetria", 1987 (ruso).