



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**DESENVOLVIMENTO DE PROGRAMA COMPUTACIONAL
PARA TRATAMENTOS DE DADOS DE TEXTURA OBTIDOS
PELA TÉCNICA DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X**

EGUIBERTO GALEGO

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Mestre em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear - Materiais.

Orientador:
Dr. Nelson Batista de Lima

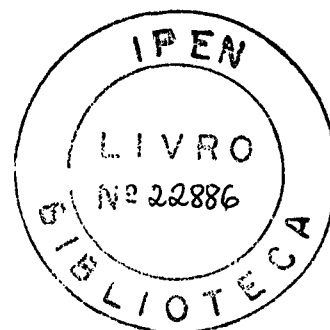
**São Paulo
2004**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**DESENVOLVIMENTO DE PROGRAMA COMPUTACIONAL
PARA TRATAMENTOS DE DADOS DE TEXTURA OBTIDOS
PELA TÉCNICA DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X**

EGUIBERTO GALEGO



Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Mestre em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear- Materiais.

Orientador:

Dr. Nelson Batista de Lima

São Paulo

2004

“O número governa o universo”

— Lema dos Pitagóricos

*A minha
querida esposa
Marilene*

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. *Nelson Batista de Lima* pela compreensão, paciência e respeito demonstrados na orientação deste trabalho e como coordenador do Laboratório de Difração de Raios X do CCTM no IPEN pelo apoio que permitiu minha dedicação a este trabalho.

Ao Dr. *Angelo Fernando Padilha* pelo tempo dedicado e pelo grande incentivo na minha vida acadêmica.

Ao Dr. *Arnaldo H. Paes de Andrade* pela utilização da infraestrutura do Centro de Ciência e Tecnologia dos Materiais do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.

À MCs. *Marilene Morelli Serna* pela grande ajuda na elaboração deste trabalho fornecendo apoio na área acadêmica, técnica e informações para o aprimoramento na fase testes do programa.

À *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo* pelo apoio financeiro dado a este trabalho no âmbito do Projeto Temático “Otimização da microestrutura, da microtextura e da mesotextura em materiais ferrosos avançados” e de bolsa concedida para o mesmo tema deste trabalho.

Aos meus colegas da POLI-USP do Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, *Clara Herrera, Marcio Hupalo, Juliana Paula, Francisco, Raquel, Clarise*.

À *Borland do Brasil* que forneceu o compilador DELPHI 6 – Professional, na forma de doação, para a elaboração deste trabalho.

Aos meus colegas do IPEN, PhD. *Rubens Nunes de Faria*, PhD *Jesualdo Rossi*, MCs *Cristiano Mucsi* pelas discussões e apoio.

À minha esposa *Marilene*, aos meus sogros *Vicente* (in memorian) e *Lenita*, a minhas cunhadas *Nara* e *Nuri*, ao meu cunhado *Nilton* e minha sobrinha *Monique* compreensão nos momentos que precisei me ausentar e pelo enorme carinho que sempre demonstram.

A todos que diretamente ou indiretamente colaboraram com este trabalho.

Desenvolvimento de programa computacional para tratamentos de dados de textura obtidos pela técnica de difração de raios X

Eguiberto Galego

RESUMO

Neste trabalho foi desenvolvido programa computacional para tratamento de dados de textura pela técnica de difração de raios X por meio de figuras de pólo aplicando o método de resolução por expansão em série dos harmônicos esféricos para simetria macroscópica ortorrômbica e simetrias microscópicas cúbica e hexagonal. Para gerar as simetrias microscópicas foi necessária a implementação de algoritmo para calcular os harmônicos esféricos de superfície específicos. A geração dos polinômios de Legendre, com base nos dados experimentais em relação ao passo dos ângulos α e β , é executada em tempo real. Quando da introdução de dados, a representação gráfica da figura de pólos é desenhada em projeção estereográfica, sendo possível, ao analista visualização em três dimensões (3D). Uma rotina interna verifica a validade dos índices de Miller, sendo possível ao analista a correção. O programa exhibe as possíveis correções aplicadas aos dados experimentais: desfocalização, ruído de fundo e correção da orientação da direção de laminação (ângulo β). A correção da desfocalização e ruído de fundo é executada automaticamente com base na óptica utilizada no equipamento de raios X (Geometria de Schulz). Foi implementada uma rotina de manipulação gráfica de isolinhas para geração da função distribuição de orientações (FDO), com fácil manipulação do número de linhas e respectivas cores. No gráfico da FDO, com a atuação do cursor do "mouse" sobre uma secção qualquer, visualiza-se os valores dos ângulos de Euler ($\varphi_1, \Phi, \varphi_2$) e da respectiva intensidade da $f(g)$. Ao mesmo tempo, há uma visualização gráfica em 3D da posição do cristal em relação a direção de laminação. Há a possibilidade da visualização gráfica em 3D de qualquer secção da FDO. É possível, também, a visualização do gráfico da fibra de textura. O programa foi batizado de Programa Análise de Textura (PAT).

Development of a computational program for treatment of texture data by the X-ray diffraction technique

Eguiberto Galego

ABSTRACT

In this work it has been developed a computational program for treatment of texture data by the X-ray diffraction technique using pole figures. It has been applied the resolution method by spherical harmonical series expansion for cubic and hexagonal microscopic symmetry and orthorhombic macroscopic symmetry. For yielding the microscopic symmetries it has been necessary the implementation of algorithmic for calculation the spherical harmonic of specific surface. The generation of Legendre Polynomial, based on the experimental data in relation to α and β step angles, is execution in real time. In the introduction of data, the graphical representation of pole figure is drawn in stereographic projection, being possible to the analyst three-dimensional (3D) visualization. An internal routine verify validity of the Miller indexes, being possible to analyst the correction. The program exhibit the possible corrections applied to experimental data: defocusing, background and orientation of lamination direction (β angle). The correction of the defocusing and background is the executed automatically based on the optic used in the X-ray equipment (Schulz geometric). It has been implemented a routine of graphic manipulation of the contour isolines for generation of the orientation distribution function (ODF), with easy manipulation of the number of lines and colors. In the ODF graphic, with the action of the mouse cursor on any section, it is visualized the values of Euler angles (φ_1 , Φ , φ_2) and of the respective $f(g)$ intensity. Concomitantly, there is 3D graphic visualization of the crystal position in relation to the rolling direction. There is the possibility of graphic visualization in 3D of any section of the ODF. It is also possible the graphic visualization of the texture fiber. This program was named Texture Analysis Program (TAP).

SUMÁRIO

1. Introdução.....	7
2. Objetivos.....	12
3. A análise de textura utilizando a função distribuição de orientações.....	13
3.1 Os sistemas de coordenadas.....	17
3.2. A questão da simetria no estudo da textura	20
3.3. Cálculo da FDO tomando-se como base os dados experimentais.....	23
3.3.1. O método harmônico	24
3.3.2. Harmônicas esféricas generalizadas simétricas $T_{\ell}^{m,n}(g)$	29
3.4. Implicações do centro de inversão.....	31
3.5. Avaliação do erro da função distribuição de orientações	33
3.6. A representatividade da textura através da Função Distribuição de Orientações	34
3.7. O grau de textura.....	36
3.8. A questão das componentes fantasmas	37
3.8.1. Generalização do Método Positivo	40
4. Implementação computacional.....	42
4.1. Implementação computacional – Primeiro bloco.	44
4.1.1. Introdução dos dados.....	44
4.1.2. Correção de erros experimentais e estatísticas dos dados.....	53
4.1.2.1. Desfocalização.....	53
4.1.2.2. Correção para a radiação de fundo (Background)	56
4.1.2.3. Média de quadrantes.....	56
4.1.2.4. Erro de angulo β rodado.....	57
4.1.2.5. Execução das correções.....	59
4.2. Implementação computacional - Segundo bloco.....	59
4.2.1. Geração dos coeficientes fundamentais – biblioteca.....	60
4.2.1.1. Cálculo dos ângulos entre orientações.....	62
4.2.1.2. Cálculo dos polinômios $P_{\ell}^{m,n}(x)$ associados com os polinômios de Jacobi:	64
4.2.1.3. Cálculo das constantes fundamentais $Q_{\ell}^{m,n}$	68
4.2.1.4. Cálculo dos coeficientes de Fourier $a_{\ell}^{m,n,s}$	68

4.2.1.5. Cálculo dos coeficientes $a_{\ell}^{m,n,s}$	69
4.2.1.6. Cálculo das funções associadas de Legendre:.....	69
4.2.1.7. Cálculo dos coeficientes $B_{\ell}^{m,\varpi}$	70
4.2.1.8. Cálculo de $k_{\ell}^{\mu}(h_i)$ para simetria cúbica:.....	71
4.2.1.9. Cálculo de $k_{\ell}^{\mu}(h_i)$ para outras simetrias:	71
4.2.2. Rotinas de cálculo dos coeficiente $C_{\ell}^{\mu\nu}$	72
4.2.3. Cálculo da Função Distribuição e Orientação.....	73
4.2.4. Função Distribuição de Orientações – Visualização gráfica	74
4.2.5. Levantamento de fibras de textura.....	80
4.3. Implementações gráficas – Terceiro bloco	83
4.4. Miscelânea	83
5. Resultados experimentais	87
5.1. Alumínio Laminado.....	87
5.2. Aço laminado.....	92
5.3. Titânio laminado.....	94
6. Conclusões.....	98
Referências Bibliográficas	100
Anexo A.....	103
Anexo B.....	105

1. Introdução

A grande maioria dos materiais metálicos e cerâmicos está constituída na forma de agregados policristalinos, isto é, um sólido formado pela união de inúmeros monocristais microscópicos. Devido ao emprego tecnológico destes materiais, suas propriedades físicas tem sido objeto de estudo nas mais diversas áreas do conhecimento humano.

Em um material policristalino são vários os fatores que afetam as propriedades físicas. Uma das dependências que atuam de forma significativa nestas propriedades reside no fato de como os grãos ou cristalitos estão distribuídos no material e de sua orientação um em relação aos outros. Logo, as propriedades mecânicas, magnéticas, elétricas, etc. do material policristalino são dependentes da direção cristalográfica. Isto é, a magnitude de uma propriedade tem diferentes valores nas diferentes direções cristalográficas. Portanto, em um material policristalino as propriedades físicas são determinadas por dois fatores: as propriedades do monocristal e da sua distribuição ou, em resumo, da microestrutura do material.

No material policristalino teoricamente os cristalitos ou grãos deveriam apresentar uma distribuição de orientações aleatória. Porém, devido a processamentos que são submetidos como: deformação, tratamento térmico, magnetização, entre outros, a distribuição deixa de ser aleatória podendo apresentar uma ou mais orientações preferenciais em relação a um sistema de coordenadas situada no material. Esta orientação cristalográfica preferencial do material é denominada de textura cristalográfica.

A importância tecnológica da orientação preferencial reside no fato de que as propriedades físicas que possuem anisotropia serão influenciadas pela distribuição desigual das direções cristalográficas, de maneira que a magnitude das propriedades é maior em uma determinada orientação do material policristalino do que em outra. Uma vez que as propriedades podem ser úteis no emprego tecnológico ou científico, dependendo da aplicação do material, o controle da distribuição das orientações dos monocristais é de vital importância no desenvolvimento de novos materiais e suas aplicações.

A aplicação do estudo da textura e seu objetivo podem ser divididos em três grupos, como mostra a tabela 1.1 (Bunge, 1985):

Tabela 1.1 – Objetivos do estudo da textura.

I – Anisotropia:
Monocristal ← Textura → Policristal
Tecnologicamente
1. Parâmetro de Lankford (valor r);
2. “Orelhamento” em estampagem profunda.

II – Processos no estado sólido (trocas de textura):
1. Recristalização primária;
2. Deformação plástica;
3. Recristalização;
4. Transformação de fase:
a) Estudo de processos (pesquisa fundamental);
b) Produção de texturas específicas;
c) Documentação
i. Metalurgia (falha em materiais);
ii. Geologia (história geológica da rocha);
5. Controle de processos em linha.

III – Textura em outras medidas:
1. Análise de fases;
2. Análise de stress.

A difração de raios X, fenômeno descoberto por Friedrich et al. em 1912, foi a primeira técnica utilizada na caracterização da orientação preferencial dos agregados policristalinos. O primeiro diagrama de difração de raios X de uma amostra de metal com orientação preferencial foi obtido por Knipping em 1913.

O estudo sistemático da textura, somente sob o aspecto qualitativo, foi inicialmente realizado através da não uniformidade dos anéis de Debye-Scherrer, até início da década de 30 no século XX. Em 1924, o metalurgista alemão Wever, utilizou pela primeira vez a projeção estereográfica para a representação da textura. Esta representação foi denominada de figura de pólos. A partir de 1950 com a implementação de contadores eletrônicos nos chamados difratômetros de raios X, tornou-se possível o levantamento experimental das figuras de pólos dando início aos estudos visando quantificar a distribuição de orientações dos grãos em um material policristalino.

Um dos primeiros estudos nesta área foi realizado por Harris, em 1952, calculando a relação entre a intensidade de uma amostra com textura e a intensidade de uma amostra com distribuição aleatória, utilizando ainda a idéia da não uniformidade dos

anéis de Debye, neste caso avaliado com o uso de detectores. Os resultados obtidos, entretanto, eram bastante imprecisos já que somente algumas reflexões podiam ser medidas e, portanto, somente alguns pontos eram representados em forma de gráfico da figura de pólos inversa.

Jetter, McHargue e Williams propuseram um método para a obtenção da figura de pólos inversa baseado na medida da curva da intensidade de reflexão de um plano cristalográfico na condição de difração em dependência do ângulo entre o eixo de fibra e o pólo. Outra idéia, proposta pelos autores, foi a normalização dos dados sem o uso de uma amostra aleatória (muitas vezes impossível de ser obtida) utilizando a integração da intensidade medida. O modelo proposto apresentava uma precisão bastante razoável para a época no caso de amostras com simetria axial da amostra, mas mostrava-se deficiente para outras simetrias, por exemplo, ortorrômbica (chapas laminadas).

O método proposto por Mitchell & Rowland utilizava a medida da figura de pólos, onde a distribuição de orientações, neste caso, era calculada considerando-se que a média sobre todas as orientações é igual a 1. Para amostras com texturas bem definidas os resultados apresentaram boa concordância, porém no caso de amostras com diversas componentes de orientações presentes, uma vez que o produto de duas densidades de probabilidade independentes presentes no método, leva a resultados falsos (Barrett, 1966).

Apesar dos métodos descritos acima não terem alcançado seus objetivos de descrever quantitativamente a orientação preferencial, eles foram importantes dentro do processo de desenvolvimento de um modelo de análise quantitativa mais completo.

Atualmente os métodos para a análise quantitativa podem ser divididos em dois tipos: os realizados no espaço de Fourier (métodos harmônicos) e os realizados diretamente no espaço de orientações (método direto ou discreto).

Na Tabela 1.2, são apresentadas as vantagens e desvantagens de ambos os métodos.

O método harmônico foi proposto por Pursey & Cox (1954) e Viglin (1960), e posteriormente desenvolvido completamente por Bunge e por Roe & Krigbaum, independentemente em 1965. Estes últimos pesquisadores desenvolveram separadamente os métodos que apesar de serem conceitualmente idênticos, apresentavam formalismos diferentes.

O método do vetor, o método Imhof, o método WIMV (sigla formada pelas iniciais do primeiro nome dos autores: *Williams-Imhof-Matthies-Vinel*) e o método ADC de Arbitrary Defined Cells, são baseados no método discreto.

Tabela 1.2: Vantagens e desvantagens dos métodos para cálculo da função distribuição de orientações.

Método	Vantagens	Desvantagens
<i>Harmônico</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Requer menor quantidade de memória do computador para cálculo numérico; • Facilidade de avaliar inconsistências nas e entre as medidas de figuras de pólos; • Facilidade de avaliar a falta de simetria da amostra quando esta é esperada, evitando-se assim introdução de erro do cálculo da função distribuição de orientações; • Uso dos coeficientes da expansão em série no cálculo teórico de propriedades físicas; • Facilidade de mudanças do sistema de coordenadas, permitindo o estudo, sem grandes dificuldades, de transformações de fases; • O método, dentre todos, é o mais conveniente para o estudo teórico da análise de textura; • O truncamento da expansão em série tem o efeito de filtrar dados espúrios; apresentando bons resultados mesmo com dados experimentais de baixa qualidade. 	<ul style="list-style-type: none"> • O truncamento da expansão em série sempre degrada a solução; • O número de figuras de pólos para cristais de baixa simetria pode ser muito elevado; • Os algoritmos computacionais são bastante complexos, uma vez que o cálculo é realizado no espaço de Fourier; • O conjunto entre as possíveis combinações das simetrias da amostra e do cristal implica em maior complexidade na implementação deste método.
<i>Direto ou Discreto</i>	<ul style="list-style-type: none"> • A manipulação das limitações decorrentes da faixa de zero e da imposição de positividade é mais simples; • O problema das componentes fantasmas (<i>ghost</i>) é tratado de maneira mais elegante; • Maior facilidade na manipulação do conjunto das possíveis combinações entre as simetrias da amostra e do cristal; • Requer um menor número de figuras de pólos para se obter um resultado satisfatório. 	<ul style="list-style-type: none"> • É mais susceptível a qualidade dos dados experimentais; • A normalização da figura de pólos incompleta é bastante complexa, sendo realizada pelo método harmônico; • Não é possível utilizar os resultados para o cálculo de propriedades físicas; • Necessita de computadores com mais memória.

No entanto, até o presente momento, o método mais utilizado ainda é o da expansão em série ou método harmônico, proposto por Bunge (1969) e Roe (1964-1965). Este método tem sido implementado computacionalmente por diversos autores (incluindo este trabalho) e utilizando, como dados experimentais, medidas obtidas por difração de

raios X, difração de nêutrons e difração de elétrons retroespalhados (*EBS*D, Electron Backscatter Diffraction).

Mesmo nos dias de hoje, o número de grupos de pesquisas na área da textura é bastante restrito e uma característica interessante é que os programas utilizados para a análise de textura atualmente são em geral desenvolvidos pelo próprio grupo. Este fato vem confirmar ainda mais a validade do método harmônico.

Até meados de 2003, o Brasil contava com alguns grupos dedicados a análise de textura. Em destaque: o grupo do IME - Instituto Militar de Engenharia, RJ e o grupo do IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - SP, tendo cada um destes grupos desenvolvido seu próprio programa para análise de textura.

No caso do grupo do IPEN, o programa foi desenvolvido para a análise de materiais com estrutura cristalina cúbica em amostras com simetria ortorrômbica, como um adendo à tese de doutoramento de Lima (1991).

O programa desenvolvido por Lima está baseado no método proposto por Bunge (1982), o mesmo foi implementado em linguagem FORTRAN para utilização em mainframe, com o objetivo de calcular os valores numéricos da função distribuição de orientação. A representação gráfica destes valores, que realmente permite a análise do resultado, era realizada utilizando-se o programa SAS (Statistical Analysis System).

A diversificação e o aumento das áreas de interesse, assim como a inter-relação com outros grupos de pesquisas, que resultaram na necessidade de um programa com a interface com o usuário mais amigável em ambiente operacional gráfico; e a necessidade do desenvolvimento de um programa para a representação gráfica da função distribuição de orientações em tempo real com maior interatividade com os resultados e, também, aumentar as simetrias cristalinas microscópicas e levantamento de gráficos para análise de fibras foram a motivação deste trabalho.

2. Objetivos

Esta dissertação tem por objetivos:

1. A implementação das rotinas necessárias para o cálculo da função distribuição de orientações para as simetrias do cristal cúbica e hexagonal e para a simetria da amostra ortorrômbica;
2. A implementação das rotinas de adequação dos dados experimentais para o cálculo da função distribuição de orientações;
3. A implementação das rotinas gráficas para representação da função distribuição de orientações em duas dimensões (2D) e em três dimensões (3D) e, também, gráficos de fibras;
4. A implementação de rotinas auxiliares que permitam a obtenção de uma interface amigável ao analista (“user friendly”).

3. A análise de textura utilizando a função distribuição de orientações

A textura de um material policristalino é descrita quantitativamente pela função distribuição de orientações (FDO) (ou ODF, do inglês orientation distribution function). Esta função descreve a probabilidade de se encontrar uma determinada orientação em relação a um sistema de coordenadas adotado como referência. Esta distribuição é independente do tamanho, forma e localização dos cristalitos que compõem o material (Bunge, 1982; Kocks et al, 1998; Cullity & Stock, 2001, Randle & Engler, 2000). Matematicamente têm-se:

$$\frac{dV_g / V}{dg} = f(g) = f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \quad (3.1)$$

na qual: dV_g / V é a fração volumétrica dos cristais com rotação g dentro do elemento de orientação dg .

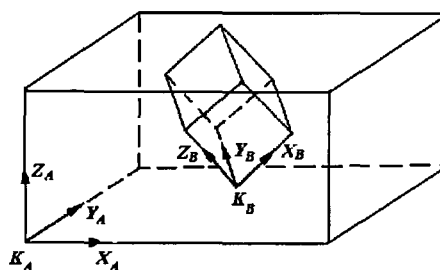


Figura 3.1: Definição de Textura: onde g é a rotação necessária para levar o sistema K_A para o sistema de coordenada K_B .

Para se definir a orientação g , define-se um sistema de coordenadas para a amostra, K_A e, outro sistema de coordenadas para o cristalito, K_B , (Figura 3.1). Isto pode ser equacionado como:

$$K_B = g \cdot K_A \quad (3.2)$$

sendo g a rotação necessária para que os sistemas de coordenadas da amostra e do cristal passem a ser coincidentes. Há vários modos equivalentes para se denotar a rotação g , alguns deles são: por uma matriz de transformação, pela rotação do eixo e ângulo, pelos

ângulos de Euler ou pelos índices de duas direções cristalográficas paralelas a direções escolhidas como referência na amostra ou pelos índices de *Miller*:

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} = \{\vec{d}, \omega\} = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\} = (hkl)[uvw] \quad (3.3)$$

Neste trabalho, usou-se a representação da orientação g pelos ângulos de Euler $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ na notação de Bunge, Figura 3.2, que é a mais conveniente para o emprego do método harmônico. Também é usual, na prática do estudo de textura, principalmente em amostras laminadas, representar a orientação g pelo método dos índices de Miller $(hkl)[uvw]$ (Figura 3.3), onde (hkl) são os índices de Miller do plano que está paralelo com a superfície da chapa e $[uvw]$ é a direção do cristal que está paralela a direção de laminação.

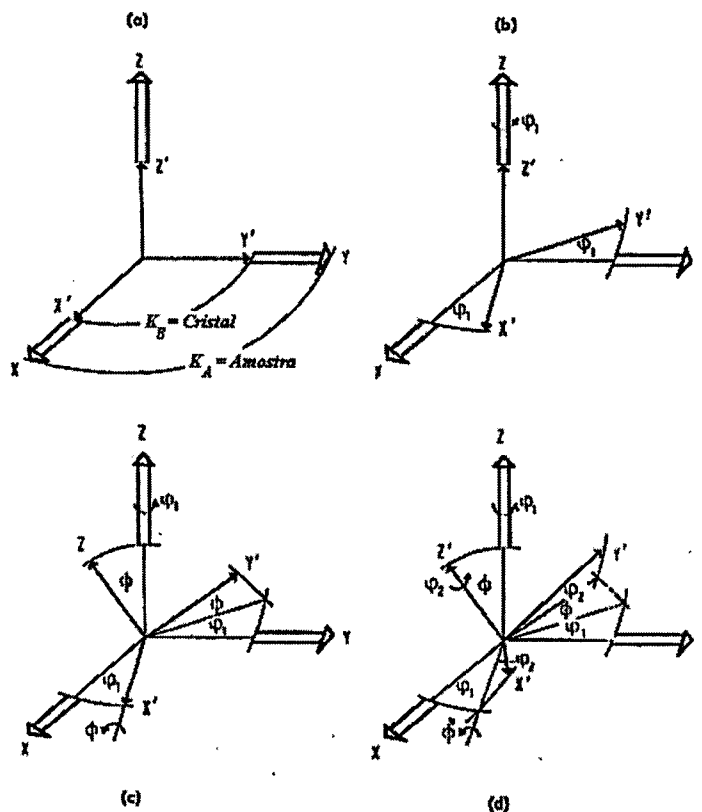


Figura 3.2 - Definição dos ângulos de Euler na notação de Bunge. (a) – os eixos da amostra (X, Y, Z) e do cristal (X', Y', Z') estão coincidentes; (b) – a rotação φ_1 se dá em torno do eixo Z – Z'; (c) – a rotação Φ se dá em torno do eixo X'; (d) – a rotação φ_2 se dá em torno do eixo Z' (adaptado Bunge, 1982)

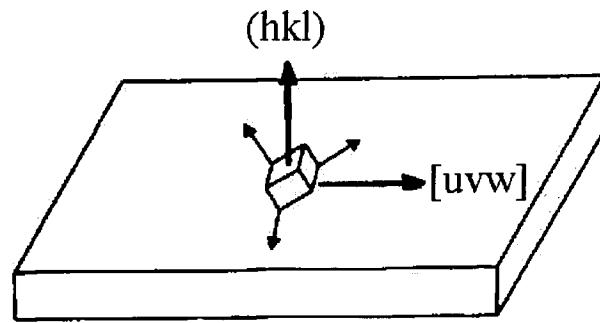


Figura 3.3 - Representação da orientação g pelo método dos índices de *Miller*.

Integrando-se a equação 3.1 seguem-se as seguintes definições:

$$\oint f(g) dg = 1 \quad (3.4)$$

onde:

$$dg = \frac{1}{8\pi^2} \sin\Phi \cdot d\Phi \cdot d\varphi_1 \cdot d\varphi_2 \quad (3.5)$$

portanto, quando um material não apresenta nenhuma orientação preferencial, isto é, os cristalitos estão distribuídos aleatoriamente por todo material têm-se que:

$$f(g)_{\text{aleatório}} = 1 \quad (3.6)$$

logo, a função distribuição de orientação $f(g)$ de um material que apresenta textura (ordinariamente chamado 'texturado') é quantificada em múltiplos da $f(g)_{\text{aleatória}}$, ou seja, vezes o aleatório (Times Random, em inglês, ou T.R. utilizado como unidade para indicar a intensidade de cada orientação).

Os ângulos de Euler podem ser expressos em coordenadas cartesianas. A função e sua intensidade n podem ser desenhadas em forma de gráfico de superfície ou na forma de mapa por isolinhas em segmentos fixos, espacialmente (Figura 3.4), onde:

$$f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = n \quad (3.7)$$

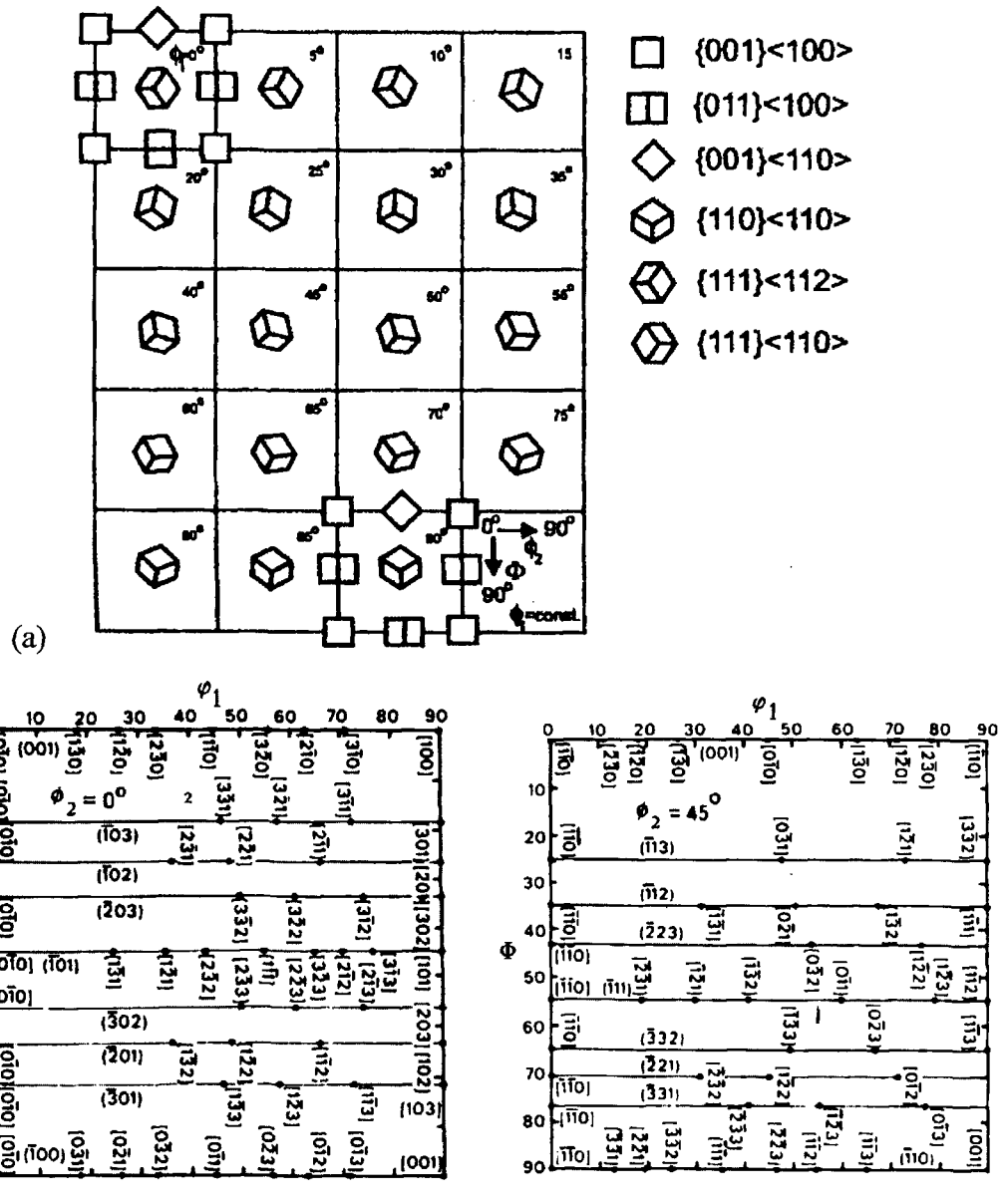


Figura 3.4: (a) Mapa da seção $\phi_2 = 0^\circ$ mostrando as principais orientações presentes (adaptado de Godec & Jenko, 2000) e (b) ábaco da localização das principais orientações no caso das seções $\phi_2=0^\circ$ e $\phi_2=45^\circ$ constante (adaptado Bunge, 1982).

Na representação mais comum, empregam-se como ângulos fixos ϕ_1 ou ϕ_2 , em intervalos discretos em projeções em coordenadas cartesianas. Os outros ângulos, (Φ, ϕ_1) ou (Φ, ϕ_2) são contínuos (Figura 3.4) resultando numa representação espacial gerada pela rotação. As intensidades são representadas em forma de isolinhas escalonadas por intervalos iguais dada a intensidade máxima da FDO. A escolha do ângulo constante é dependente do material e do processo que gerou a textura, de maneira que possibilite a

melhor visualização de orientações que se distribui na amostra ou fibras e, orientações específicas (Figura 3.5).

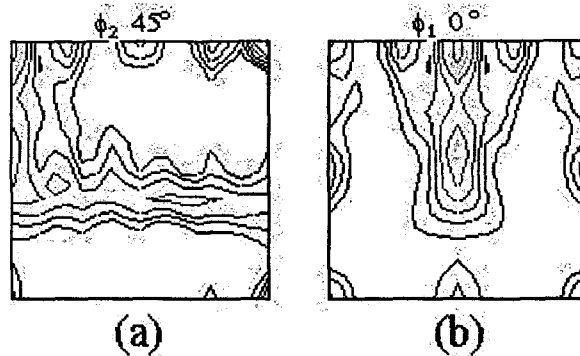


Figura 3.5 - Representação da função distribuição e orientação (FDO) de aço elétrico laminado a 95% através da utilização em (a) do ângulo ϕ_2 constante e em (b) ϕ_1 constante.

3.1. Os sistemas de coordenadas

A direção da amostra é definida por um vetor unitário \vec{y} no sistema de coordenadas da amostra K_A , como:

$$\vec{y} = [y_1, y_2, y_3] = \{\alpha, \beta\} \text{ em } K_A \quad (3.8)$$

os ângulos α e β são as coordenadas polares com o pólo na direção y_3 . Neste caso, a projeção estereográfica é desenhada no plano formado pelas direções y_1 e y_2 .

Desta maneira pode-se definir um vetor \vec{r} no espaço recíproco ou espaço de Fourier:

$$\vec{r} = |\vec{r}| \cdot \vec{y} \text{ em } K_A. \quad (3.9)$$

Da mesma forma, a direção do cristal é definida por um vetor unitário \vec{h} no sistema de coordenadas da amostra K_B , como:

$$\vec{h} = [h_1, h_2, h_3] = \{\Theta, \gamma\} \text{ em } K_B, \quad (3.10)$$

e os ângulos Θ e γ podem ser representados em projeção estereográfica.

Assim o vetor r^* do espaço recíproco de um cristal simples é escrito no sistema de coordenadas da amostra como:

$$r^* = |r^*| \cdot \vec{h} \text{ em } K_B \quad (3.11)$$

Para um cristal com orientação g , as direções \vec{y} e \vec{h} são paralelas e relacionadas por:

$$\vec{y} = g \cdot \vec{h} \text{ com } \vec{y} \parallel \vec{h} \quad (3.12)$$

Em geral as coordenadas do sistema K_A da amostra são escolhidas paralelas à direções conhecidas, por exemplo: uma amostra laminada conhece-se a direção de laminação DL (ou RD de rolled direction, em inglês) e as outras coordenadas ortogonais completam a referência, a direção transversal a de laminação DT (ou TR de Transverse Direction, em inglês) e, a direção normal a de laminação DN (ou ND de Normal Direction, em inglês) representado na Figura 3.6.

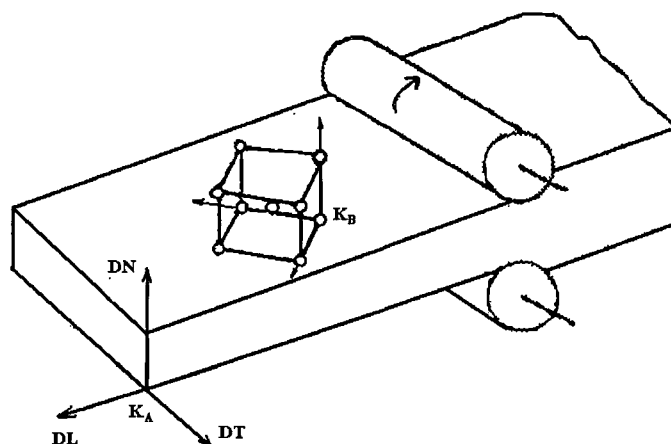


Figura 3.6 – Sistemas de coordenadas empregados usualmente na análise de textura. As coordenadas K_A são coincidentes com as direções DL, DT e DN. K_B são as coordenadas do cristal.

Para determinar a fração de cristalitos, que tem a orientação \vec{h} paralela a direção da amostra \vec{y} de acordo com a equação 3.12, integra-se a função distribuição de orientações:

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h} \parallel \vec{y}} f(g) d\psi \quad (3.13)$$

onde ψ é o ângulo de rotação ao redor da direção $\vec{y} \parallel \vec{h}$.

O eixo da função de distribuição $A(\vec{h}, \vec{y})$ pode ser considerado de duas maneiras diferentes:

a) Mantendo a direção do cristal \vec{h} constante. Particularmente se \vec{h} é ortogonal ao plano (hkl) , ou seja, \vec{h} é normal ao plano (hkl) , tem-se:

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = P_{\vec{h}}(\vec{y}) = P_{hkl}(\alpha, \beta) \quad (3.14)$$

que é a figura de pólos ou também chamada de função distribuição da densidade dos pólos de um plano cristalográfico. Esta função define a fração volumétrica dos cristais que tem como fixo a direção do cristal \vec{h} ortogonal ao plano (hkl) e a direção da amostra como variável $\vec{y} = \{\alpha, \beta\}$, daí:

$$\frac{dV_{\alpha, \beta} / V}{d\Omega} = P; \text{ onde } d\Omega = \sin\alpha d\alpha d\beta \quad (3.15)$$

e, a equação 3.15 é normalizada de tal modo que:

$$\frac{1}{4\pi} \oint P_{(hkl)}(\alpha, \beta) \sin\alpha d\alpha d\beta = 1 \quad (3.16)$$

da equação 3.16 a densidade de distribuição aleatória é definida por:

$$P_{(hkl)}(\alpha, \beta)_{\text{aleatório}} := 1 \quad (3.17)$$

b) Mantendo a direção \vec{y} constante. Têm-se assim,

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = R_{\vec{y}}(\vec{h}) = R_{\vec{y}}(\Theta, \gamma) \quad (3.18)$$

que é a função da figura de pólo inversa. Neste caso a fração volumétrica dos cristalitos com, a direção da amostra \vec{y} é fixa e variando-se a direção do cristal $\vec{h} = \{\Theta, \gamma\}$, temos:

$$\frac{dV_{\Theta, \gamma} / V}{d\Omega} = R_{\vec{y}}(\Theta, \gamma); \text{ onde } d\Omega = \sin\Theta d\Theta d\gamma \quad (3.19)$$

Esta função pode ser normalizada pela integração:

$$\frac{1}{4\pi} \oint R_{\vec{y}}(\Theta, \gamma) \sin\Theta d\Theta d\gamma = 1 \quad (3.20)$$

e,

$$R_{\vec{y}}(\Theta, \gamma) := 1 \quad (3.21)$$

3.2. A questão da simetria no estudo da textura

Uma das vantagens do método proposto por Bunge é a utilização das simetrias do cristal (simetria microscópica) e da amostra (simetria macroscópica) nos cálculos dos coeficientes da expansão em série permitindo desta maneira a redução do número de coeficientes calculados e conseqüentemente economia de memória do computador (Bunge et al, 1997; Matthies, 1980).

Se um cristal está rotacionado por um dos elementos de simetria rotacional g^c , então ele é indistinguível da orientação original. Conseqüentemente, a função distribuição de orientação deverá ser invariante com relação a todos os elementos do subgrupo de rotação da simetria do cristal,

$$f(g^c \cdot g) = f(g), \quad g^c \in G^c \text{ (simetria do cristal)} \quad (3.22)$$

neste ponto, também, há a invariância da simetria desta função com respeito ao grupo de simetria da amostra:

$$f(g \cdot g^s) = f(g), \quad g^s \in G^s \text{ (simetria da amostra)} \quad (3.23)$$

A simetria da amostra é uma simetria estatística requerendo que a fração volumétrica de cristais em orientações relacionadas com a simetria seja a mesma, apesar dos parâmetros cristalinos destes cristais não estarem identicamente orientados. A simetria do cristal, também, se mantém na figura de pólos inversa:

$$R_y(g^c \cdot \vec{h}) = R_y(\vec{h}) \quad (3.24)$$

O mesmo processo ocorre com a simetria da amostra em relação às figuras de pólos:

$$P_h(g^s \cdot \vec{y}) = P_h(\vec{y}) \quad (3.25)$$

A simetria da amostra não é necessariamente uma simetria cristalográfica, podendo conter eixos de simetria de qualquer ordem, particularmente eixos de ordem infinita, por exemplo, a distribuição aleatória que possui simetria axial e isotrópica. Alguns exemplos de simetria em figuras de pólos e em figuras de pólos inversa são apresentados na Figura 3.7.

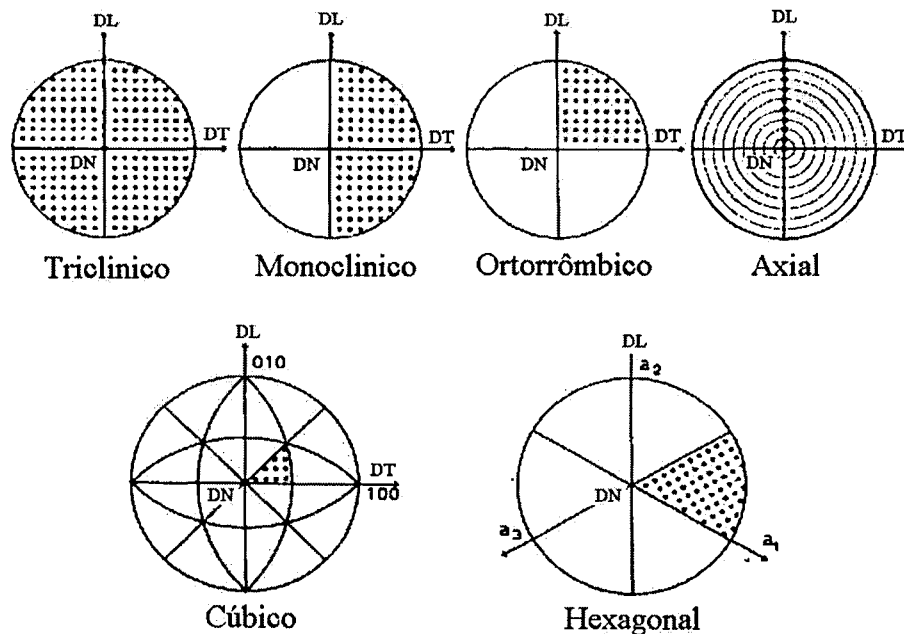


Figura 3.7- Alguns exemplos de simetrias de figuras de pólos e figuras de pólos inversa, onde as áreas pontilhadas indicam a área de assimetria (Snyder et al, 1999).

As condições de simetria das equações 3.24 e 3.25 impõem uma operação de simetria no espaço de Euler. Uma vez que o espaço de Euler é tridimensional e periódico (Pospiech et al, 1974), isto é:

$$\varphi_1 \sim \varphi_1 + 2\pi, \quad \phi \sim \phi + \pi, \quad \varphi_2 \sim \varphi_2 + 2\pi, \quad (3.26)$$

isto estabelece um grupo espacial de simetria no espaço de Euler e define uma unidade assimétrica dentro deste espaço, como listada na Tabela 3.1. O caso particular da simetria da amostra ortorrômbica e a simetria do cristal cúbica, que são as de maior interesse, é mostrado na Figura 3.8. Uma das vantagens no uso das condições de simetria é que há uma grande redução de cálculos, isto deve ser enfatizado, uma vez que, as operações de simetria g^c e g^s são rotações puras. Em muitos casos, a simetria do cristal também contém centro de inversão ou operações de simetria com caráter inversional. Isto, também se aplica, para a simetria da amostra. Por exemplo, amostras policristalinas frequentemente têm uma ou mais simetrias do tipo espelho. Apesar destas simetrias não serem consideradas nas equações 3.22 e 3.23, é possível levá-las em consideração (Bunge et al, 1981). Deve-se salientar que a simetria da amostra (equação 3.23) somente pode ser satisfeita como uma condição aproximada. (Bunge & Nielsen, 1997).

Tabela 3.1: Unidades de assimetria no espaço de Euler em função do grupo espacial.

Simetria do Cristal	Grupo Espacial		
	$\bar{1}$	$2/m$	mmm
$\bar{1}$	$P n$ $2\pi, \pi, 2\pi$	$P \phi n 2$ $2\pi, \pi, \pi$	$P \phi \phi_2 2_1$ π, π, π
$2/m$	$P 2_1 n \phi$ $\pi, \pi, 2\pi$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{n} \frac{2}{\phi}$ π, π, π	$P \frac{2}{\phi} \frac{2}{\phi_2} \frac{2_1}{\phi}$ $\pi, \frac{\pi}{2}, \pi$
mmm	$P 2_1 \phi_1 \phi$ π, π, π	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{\phi_1} \frac{2}{\phi}$ $\pi, \pi/2, \pi$	$P \frac{2}{\phi} \frac{2}{m} \frac{2}{\phi}$ $\pi/2, \pi/2, \pi$
$\bar{3}m$	$P 2_1 n \phi$ $\pi, \pi, 2\pi/3$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{n} \frac{2}{\phi}$ $\pi, \pi/2, 2\pi/3$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{\phi_2} \frac{2}{\phi}$ $\pi/2, \pi/2, 2\pi/3$
$4mm$	$P 2_1 n \phi$ $\pi, \pi, \pi/2$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{\phi_1} \frac{2}{\phi}$ $\pi, \pi/2, \pi/2$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{m} \frac{2}{\phi}$ $\pi/2, \pi/2, \pi/2$
$6/mmm$	$P 2_1 n \phi$ $\pi, \pi, \pi/3$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{\phi_1} \frac{2}{\phi}$ $\pi, \pi/2, \pi/3$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{m} \frac{2}{\phi}$ $\pi/2, \pi/2, \pi/3$
$M3m$	$P 2_1 n \phi$ $\pi, \pi, \pi/2$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{\phi_1} \frac{2}{\phi}$ $\pi, \pi/2, \pi/2$	$P \frac{2_1}{\phi} \frac{2}{m} \frac{2}{\phi}$ $\pi/2, \pi/2, \pi/2$

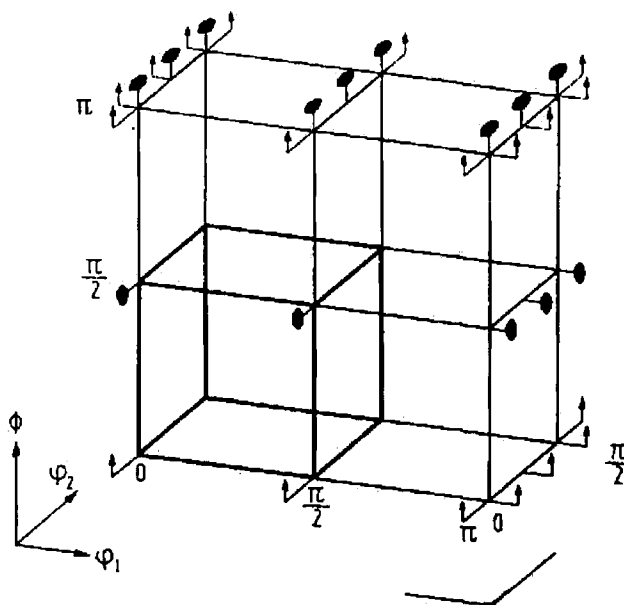


Figura 3.8 – Grupo espacial gerado no espaço de Euler para simetria ortorrômbica da amostra e simetria cúbica do cristal (adaptado Bunge, 1982).

3.3. Cálculo da FDO tomando-se como base os dados experimentais

A densidade de orientações $f(g)$ não pode ser medida diretamente. As orientações g dos cristalitos individuais podem ser determinadas, possibilitando a construção de densidades de orientação valendo-se de um grande número de orientações individuais g . Este método é usado com base na difração de elétrons. No entanto, para se obter uma função distribuição de orientações com boa confiabilidade estatística, é necessária a medida de um grande número de orientações.

O método com melhor confiabilidade estatística na obtenção da função distribuição de orientações é o que está baseado nas medidas de figuras de pólos obtidas por difração de raios X ou difração de nêutrons. Este método tem sido chamado de inversão da figura de pólos. De acordo com a equação 3.13, da função distribuição axial $A(\vec{h}, \vec{y})$, as figuras de pólos são relacionadas com a função distribuição de orientações pela equação:

$$P_{(hkl)}(y) = \frac{1}{2\pi} \int_{|\psi|} f(g) d\psi \quad (3.27)$$

Até o presente momento, vários modelos tem sido descritos na literatura para explicar como se obter a função distribuição de orientações valendo-se de um conjunto de figuras de pólos $P_{(hkl)}(y)$. Os mais importantes são:

- *Discretização* das funções $P_{(hkl)}(y)$ e $f(g)$: Neste método a integral na equação 3.27 é trocada por uma somatória. Este método é também conhecido pelo nome do método do vetor (Ruer e Baro, 1977).
- *Expansão em série*: obtenção da função distribuição de orientações usando-se um conjunto ortogonal de funções harmônicas. Este método também conhecido como método harmônico é o utilizado neste trabalho (Roe, 1964-1965; Bunge 1982).
- *Transformação da integral*: neste método a $f(g)$ é expressa em termos de $A(h,y)$ utilizando-se uma fórmula de inversão (Matthies, 1980-1982). Outros métodos de cálculo aproximativos (métodos iterativos computacionais) têm, também, sido usados com várias variantes. A primeira versão destes foi baseada na densidade de pólo mínima entre as direções \vec{y} , que corresponde a uma orientação g , dado $\vec{y} = g \cdot \vec{h}$, onde \vec{y} é coplanar à \vec{h} . A forma mais avançada dos métodos de

aproximação é conhecida sobre o nome de método *WIMV*, (Matthies & Vinel, 1982; Kallend et al, 1991; Parwlik, 1986; Szpunar & Hinz, 1990).

- *Ajuste da componente*: é um método no qual a função densidade de pólos é aproximada por um (pequeno) número particular de funções distribuições centradas ao redor de certa densidade alta de orientações chamada de componentes. O método do ajuste da componente é usado para o cálculo iterativo de $f(g)$ com base nas figuras de pólos (Helming & Matthies, 1982).

3.3.1. O método harmônico

A premissa básica do método harmônico é que a figura de pólos e a distribuição de orientações são matematicamente bem comportadas, portanto podem ser ajustadas por uma expansão em série com funções matemáticas apropriadas. Funções apropriadas para uso no sistema de coordenadas esféricas são as funções harmônicas esféricas (assim como senos e co-senos são usados em análise de *Fourier* de funções periódicas lineares, e funções de Bessel são usadas em sistema de coordenadas cilíndricas). Funções harmônicas esféricas são mais familiares como soluções da equação de *Schrödinger* para o átomo de hidrogênio para descrever as formas dos orbitais dos elétrons. Funções harmônicas esféricas formam um conjunto ortogonal sobre a faixa $0 \leq \alpha \leq \pi$, $0 \leq \beta \leq 2\pi$ (a superfície de uma esfera, a qual é usada para as figuras de pólos).

Uma das possíveis soluções para a equação diferencial da função distribuição de orientações (equação 3.1) é a expansão em série de harmônicos esféricos, que expressa em termos dos ângulos de Euler tem-se:

$$f(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} C_l^{mn} e^{im\varphi_2} P_l^{mn}(\phi) e^{in\varphi_1} \quad (3.28)$$

onde: $P_l^{mn}(\phi)$ são certas generalizações das funções associadas de Legendre.

Como $f(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ é uma função distribuição de densidades, isto implica que é uma quantidade real então:

$$f(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = f^*(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \quad (3.29)$$

onde: o asterisco denota o complexo conjugado, isto implica que os coeficientes da expansão em série possuem a seguinte propriedade:

$$C_\ell^{-m-n} = (-1)^{m+n} C_\ell^{*mn} \quad (3.30)$$

Outra consideração importante refere-se a simetria presente no cristal, assim como, a simetria estatística presente na amostra que fazem com que várias rotações sejam equivalentes.

Com base nestas considerações, é possível verificar para que $f(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ satisfaça a condição de quantidade real e as condições de simetria é necessário que alguns dos coeficientes sejam nulos e outros iguais entre si. Assim, a expansão em série pode ser substituída pela equação:

$$f(g) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=\ell}^{M(\ell)} \sum_{\nu=\ell}^{N(\ell)} C_\ell^{\mu\nu} \dot{T}_\ell^{\mu\nu}(g) \quad (3.31)$$

onde:

$$\dot{T}_\ell^{\mu\nu}(g) = \dot{T}_\ell^{\mu\nu}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = e^{i\mu\varphi_2} P_\ell^{\mu\nu}(\Phi) e^{i\nu\varphi_1} \quad (3.32)$$

e $\dot{T}_\ell^{\mu\nu}(g)$ são harmônicos esféricos generalizados simétricos. Os pontos a esquerda indicam a simetria do cristal e os da direita a da amostra. As funções simétricas são todas combinações lineares de funções usuais, portanto podem ser escritas como:

$$\dot{T}_\ell^{\mu\nu}(g) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{n=-\ell}^{\ell} A_\ell^{i\mu m} A_\ell^{i\nu n} T_\ell^{mn}(g) \quad (3.33)$$

que pode ser escrita como:

$$\dot{T}_\ell^{\mu\nu}(g) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} A_\ell^{i\mu m} T_\ell^{m\nu}(g) = \sum_{n=-\ell}^{\ell} A_\ell^{i\nu n} T_\ell^{\mu n}(g) \quad (3.34)$$

desta maneira os coeficientes $A_\ell^{i\mu m}$ expressam a simetria do cristal e os coeficientes $A_\ell^{i\nu n}$ a simetria da amostra e devem ser escolhido de maneira a satisfazer as simetrias, os valores de $M(\ell)$ e $N(\ell)$ representam o número de soluções independentes que são enumeradas pelos índice μ e ν , respectivamente. Desta maneira os coeficientes $A_\ell^{i\mu m}$ e $A_\ell^{i\nu n}$ dependem apenas da simetria do cristal e da simetria da amostra, respectivamente.

Os harmônicos esféricos generalizados simétricos compõem um sistema de equações ortonormais de maneira que:

$$\int \dot{T}_\ell^{\mu\nu}(g) \dot{T}_\ell^{*\mu'\nu'}(g) dg = \frac{1}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \quad (3.35)$$

Denotando os índices na equação 3.30 por ℓ' , μ' e ν' e multiplicando ambos os lados por $\dot{\dot{T}}_{\ell'}^{\mu'\nu'}$ temos:

$$\oint f(g) \dot{\dot{T}}_{\ell}^{\mu\nu}(g) dg = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=\ell}^{M(\ell)} \sum_{\nu=\ell}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} \oint \dot{\dot{T}}_{\ell}^{\mu\nu}(g) \dot{\dot{T}}_{\ell'}^{\mu'\nu'}(g) dg, \quad (3.36)$$

usando a equação 3.35 temos,

$$C_{\ell}^{\mu\nu} = (2\ell + 1) \oint f(g) \dot{\dot{T}}_{\ell}^{\mu\nu}(g) dg, \quad (3.37)$$

portanto, conhecendo os valores de $f(g)$ é possível obter os coeficientes da expansão em série ou obtendo-se os coeficientes é possível obter a $f(g)$.

O cálculo dos coeficientes $C_{\ell}^{\mu\nu}$ é possível a partir dos dados de figuras de pólos completas. Porém, a técnica de difração de raios X não permite a obtenção destas utilizando apenas um tipo de arranjo experimental (reflexão ou transmissão) (Cullity & Stock, 2001). Lima et al. (1986) propuseram o seguinte método matemático para a obtenção da figura de pólos completa valendo-se dos dados experimentais da figura de pólos incompleta medida pelo método da reflexão.

O método desenvolvido baseia-se no método proposto por Bunge utilizando também uma expansão em série para descrever matematicamente a figura de pólos:

$$P_{h_i} = \sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\nu=\ell}^{N(\ell)} \left[\frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\mu=\ell}^{M(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} \dot{K}_{\ell}^{\mu}(h_i) \right] \cdot \dot{K}_{\ell}^{\nu}(y) \quad (3.38)$$

onde: $h_i = (h_i, k_i, l_i)$ representa os índices de Miller do plano cristalográfico escolhido, y o sistema de coordenadas da amostra (α, β) , \dot{K}_{ℓ}^{μ} e \dot{K}_{ℓ}^{ν} são os harmônicos esféricos de superfície simétricos do cristal e da amostra respectivamente, e $C_{\ell}^{\mu\nu}$ os coeficientes a serem calculados.

O método se baseia na hipótese que:

$$\sum_i \int_B [P_{h_i}(y)_{\text{observado}} - P_{h_i}(y)_{\text{calculado}}]^2 dy = \text{mínimo} \quad (3.39)$$

onde: i é o número de figuras de pólos incompletas, B é a região analisada para $0 < \alpha < \alpha_{\max}$ e $0 < \beta < \frac{\pi}{2}$, o limite de β é definido pela simetria estatística da amostra.

Substituindo a equação 3.38 na equação 3.39 e introduzindo o fator de normalização N_i , temos:

$$\sum_i w_i \int_B \left[N_i \hat{P}_{h_i}(y)_{\text{observado}} - \sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \left[\frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} \dot{K}_{\ell}^{*\mu}(h_i) \right] \cdot \dot{K}_{\ell}^{\nu}(y) \right]^2 dy = \min \quad (3.40)$$

onde:

$$N_i = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi/\sqrt{2}} \int_0^{\sqrt{2}} \hat{P}_{h_i}(y) dy \quad (3.41)$$

e w_i valor de ajuste da figura de pólos.

Para o caso da simetria do cristal cúbica a equação 3.41 pode ser aproximada por:

$$N_i = \frac{\int_B \hat{P}_{h_i}(y) dy}{\int_B dy} \quad (3.42)$$

Derivando a equação 3.40 em relação à $C_{\ell}^{\mu\nu}$ e re-arranjando as variáveis:

$$\begin{aligned} & \sum_i w_i \int_B \dot{K}_{\ell}^{*\mu'}(h_i) \dot{K}_{\ell}^{*\mu'}(y) \times \\ & \times \left[N_i \hat{P}_{h_i}(y)_{\text{observado}} - \sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \sum_{\mu=1}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} C_{\ell}^{\mu\nu} \dot{K}_{\ell}^{*\mu} \dot{K}_{\ell}^{\nu}(y) \right] dy = 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$

substituindo a primeira somatória,

$$\begin{aligned} & \int_B \hat{P}_{h_i}(y)_{\text{observado}} \times \\ & \times \left[N_i \hat{P}_{h_i}(y)_{\text{observado}} - \sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \sum_{\mu=1}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} C_{\ell}^{\mu\nu} \dot{K}_{\ell}^{*\mu} \dot{K}_{\ell}^{\nu}(y) \right] dy = 0 \end{aligned} \quad (3.44)$$

Para abreviar a notação, substituem-se algumas equações em variáveis:

$$\dot{K}_{h_i}^{*\mu}(h_i) \int_B \hat{P}_{h_i}(y)_{\text{observado}} \dot{K}_{\ell}^{*\nu}(y) dy = a_{\ell}^{\mu\nu}(h_i) \quad (3.45)$$

$$\int_B \left[\hat{P}_{h_i}(y)_{\text{observado}} \right]^2 dy = P_i \quad (3.46)$$

$$\int \dot{K}_{\ell}^{\nu}(h_i) \dot{K}_{\ell}^{\nu}(y) dy = \zeta_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} \quad (3.47)$$

$$\sum_i w_i \frac{4\pi}{2\ell+1} \dot{K}_\ell^{*\mu}(h_i) \dot{K}_{\ell'}^{*\mu'}(h_i) = \alpha_{\ell\ell'}^{\mu\mu'} \quad (3.48)$$

Re-escrevendo a equação 3.43 e 3.44, temos:

$$\sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_\ell^{\mu\nu} \alpha_{\ell\ell'}^{\mu\mu'} \zeta_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} = \sum_i w_i N_i a_{\ell'}^{\mu'\nu'}(h_i) \quad (3.49)$$

$$\sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_\ell^{\mu\nu} \frac{4\pi}{2\ell+1} a_\ell^{\mu\nu}(h_i) = N_i P_i \quad (3.50)$$

Expressando a equação 3.50 normalizando os seus fatores e substituindo na equação 3.49, obtém-se:

$$\sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_\ell^{\mu\nu} \left[\alpha_{\ell\ell'}^{\mu\mu'} \zeta_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} - \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_i \frac{w_i}{P_i} a_\ell^{\mu\nu}(h_i) a_{\ell'}^{\mu'\nu'}(h_i) \right] = 0 \quad (3.51)$$

A equação 3.51 é um sistema de equações lineares na qual somente os coeficientes $C_\ell^{\mu\nu}$ são desconhecidos. Os mesmos podem ser calculados sabendo que a equação 3.51 é um sistema homogêneo onde são determinados por um fator comum que dependa da condição de normalização $C_0^{1,1} = 1$, resultado provindo da equação 3.35.

Para o caso da simetria da amostra ortorrômbica os harmônicos esféricos de superfície simétricos podem ser escritos como:

$$\dot{K}_\ell^\nu(y) = \dot{K}_\ell^\nu(\alpha, \beta) = \frac{\varepsilon^\nu}{\sqrt{2\pi}} \bar{P}_\ell^{2(\nu-1)}(\cos \alpha) \cdot \cos[2(\nu-1)\beta] \quad (3.52)$$

onde: $\varepsilon^\nu = 1$ para $\nu=1$ e $\varepsilon^\nu = \sqrt{2}$ para $\nu \neq 1$ e $\bar{P}_\ell(\cos \beta)$ são os polinômios de Legendre associados. Também, devido à simetria temos:

$$\zeta_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} = \zeta_{\ell\ell'}^\nu \delta_{\nu\nu'}, \text{ sendo } \delta \text{ função delta Kronecker.}$$

onde,

$$\zeta_{\ell\ell'}^\nu = \int_{\alpha_a}^{\alpha_b} \bar{P}_{\ell'}^{2(\nu-1)}(\cos \alpha) \bar{P}_\ell^{2(\nu-1)}(\cos \alpha) \sin \alpha d\alpha \quad (3.53)$$

A equação 3.52 torna-se então:

$$\sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \frac{4\pi}{2\ell+1} \alpha_{\ell\ell'}^{\mu\mu'} \zeta_{\ell\ell'}^{\nu\nu'} = \sum_i w_i N_i a_\ell^{\mu\nu}(h_i) \quad (3.54)$$

onde, os termos $\alpha_{\ell\ell'}^{\mu\mu'}$ e $\xi_{\ell\ell'}^{\nu\nu'}$ dependem apenas da simetria do cristal e da amostra e o termo no segundo membro da equação dos dados experimentais. Desta maneira a partir do sistema formado pelas equações 3.54 é possível obter-se os coeficientes $C_{\ell}^{\mu\nu}$ da expansão em série. Os fatores de normalização, localizados no segundo membro da equação 3.54 (w_i e N_i), podem ser calculado pela equação 3.55,

$$\frac{I}{N_i} = \frac{I}{4\pi} \oint \hat{P}_i(y) dy \quad (3.55)$$

3.3.2. Harmônicas esféricas generalizadas simétricas $T_{\ell}^{m,n}(g)$

Assume-se que um sistema de coordenadas K_A cuja simetria corresponde a um ponto do grupo G_A exista, ao qual esta rodado por elementos g_A . De modo correspondente, um grupo G_B com elementos g_B existe em um segundo sistema de coordenadas. A presença destas simetrias requer uma função g .

$$f(g \cdot g_A) = f(g) \quad (3.56)$$

$$f(g_B \cdot g) = f(g) \quad (3.57)$$

logo, a simetrias entre os dois sistemas de coordenadas K_A e K_B segue as regras da mão-direita e mão-esquerda.

A equação 3.56 não é geralmente representada pela harmônica esférica generalizada $T_{\ell}^{mn}(g)$. Assim, introduziu-se uma nova função, equação 3.58:

$$\hat{T}_{\ell}^{mv}(g) = \sum_{n=-\ell}^{+\ell} \hat{A}_{\ell}^{mnv} T_{\ell}^{mn}(g) \quad (3.58)$$

e a determinação dos coeficientes \hat{A}_{ℓ}^{mnv} , assim como, $\hat{T}_{\ell}^{mv}(g)$ representam a equação 3.56. Isto deve ser verdadeiro desde que:

$$\hat{T}_{\ell}^{mv}(g \cdot g_A) = \hat{T}_{\ell}^{mv}(g) \quad (3.59)$$

com a adição do teorema das harmônicas esféricas generalizadas obtém-se:

$$\hat{T}_{\ell}^{mv}(g \cdot g_A) = \sum_{n=-\ell}^{+\ell} \hat{A}_{\ell}^{mnv} \sum_{n=-\ell}^{+\ell} T_{\ell}^{ms}(g) \cdot T_{\ell}^{sn}(g_A) = \hat{T}_{\ell}^{mv}(g) \quad (3.60)$$

Além disto, de acordo com a equação 3.58

$$\hat{T}_{\ell}^{mv}(g) = \sum_{n=-\ell}^{+\ell} \hat{A}_{\ell}^{msv} T_{\ell}^{ms}(g) \quad (3.61)$$

visto que, a equação 3.56 seja verdadeira para toda rotação g e, desde que a função $T_\ell^{ms}(g)$ são ortogonais para diferentes s , os coeficientes $T_\ell^{ms}(g)$ nas equações (3.60) e (3.61) devem concordar. Isto, devendo ser verdadeiro implica,

$$\sum_{n=-\ell}^{+\ell} \dot{A}_\ell^{ms\nu} T_\ell^{sn}(g_A) = \dot{A}_\ell^{ms\nu} \quad (3.62)$$

assim segue que,

$$\sum_{n=-\ell}^{+\ell} \dot{A}_\ell^{ms\nu} [T_\ell^{sn}(g_A) - \delta_{sn}] = 0 \quad (3.63)$$

Na equação 3.63 os valores de s assumem valores de $-\ell$ até $+\ell$, e g_A transverso a todos elementos do grupo G_A . A equação 3.63 desta forma representa um sistema de equações lineares homogêneas com o termo $\dot{A}_\ell^{ms\nu}$. Os coeficientes deste sistema de equações são independentes do índice m . As soluções de sistema serão independentes de m , mas as soluções são únicas para cada m específico. Omitindo o índice m no termo $\dot{A}_\ell^{ms\nu}$ e utilizando as definições das funções de simetria da mão-direita, obtém-se:

$$\dot{T}_\ell^{m\nu} = \sum_{n=-\ell}^{+\ell} \dot{A}_\ell^{n\nu} T_\ell^{mn}(g) \quad (3.64)$$

neste ponto, o termo $\dot{A}_\ell^{n\nu}$ deve ser determinado pela seguintes condições,

$$\sum_{n=-\ell}^{+\ell} \dot{A}_\ell^{n\nu} [T_\ell^{sn}(g_A) - \delta_{sn}] = 0; \text{ onde } g_A \in G_A; -\ell \leq s \leq +\ell \quad (3.65)$$

O índice ν pode ser relacionado com a seqüência das soluções ortogonais lineares independentes neste sistema de equações. No geral, inicia-se com o valor de $\nu = 1$:

$$1 \leq \nu \leq M_A(\ell) \quad (3.66)$$

$M_A(\ell)$, naturalmente depende da simetria de G_A . Os valores de $M_A(\ell)$ para ordem de ℓ par para vários grupos de simetrias são determinados na Figura 3.9 (Bunge, 1982). Valores correspondentes para ordem de ℓ ímpar, Figura 3.10 (Bunge, 1982).

Na implementação do cálculo da função orientação e distribuição (FDO) os dados são armazenados na forma de tabela para o índice $M(\ell)$, dado a simetria microscópica, retirados diretamente das Figuras 3.9 e 3.10.

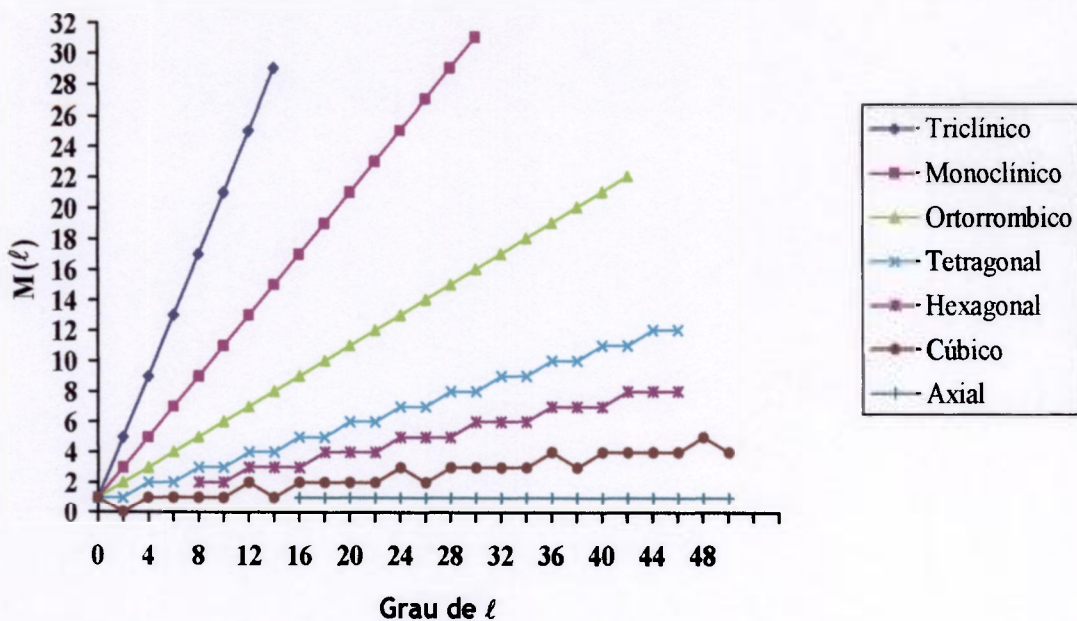


Figura 3.9 – Número de funções harmônicas esféricas independentes em função do grau ℓ par.

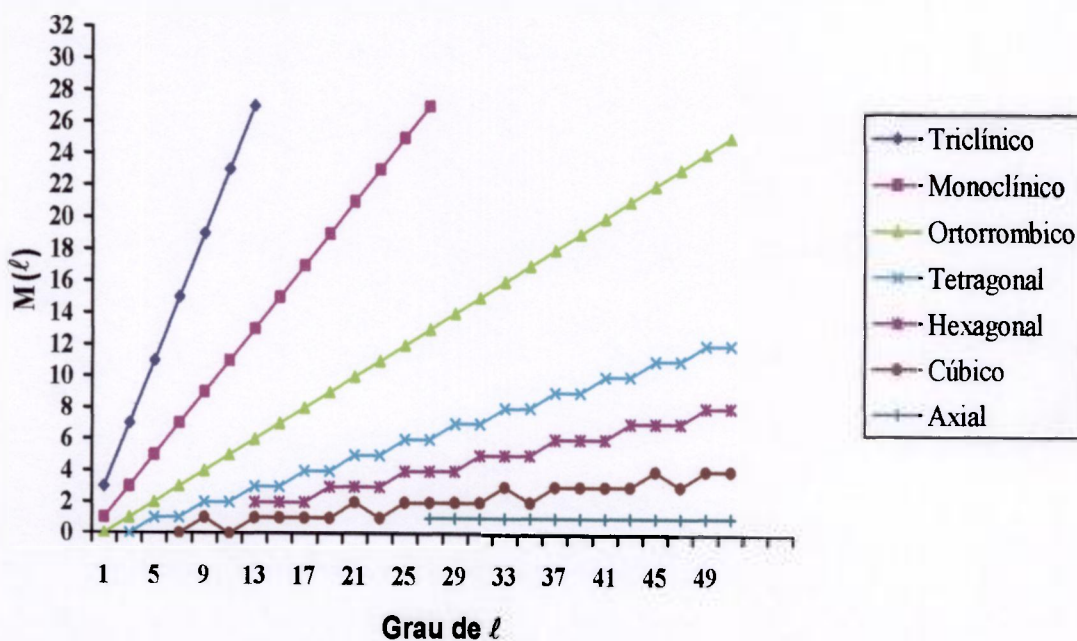


Figura 3.10 – Número de funções harmônicas esféricas independentes em função do grau ℓ ímpar.

3.4. Implicações do centro de inversão

As direções do cristal $+h$ e $-h$ como definidas na equação 3.10 são de direções diferentes. Para uma dada orientação g , elas são paralelas à diferentes direções na amostra

$\pm y$ (equação 3.12) e, conseqüentemente, para uma dada função distribuição de orientações $f(g)$, portanto elas definem diferentes figuras de pólos $P_{+h}(y)$ e $P_{-h}(y)$. Uma vez que o ângulo de Bragg é dado por $|h|$ estas duas figuras de pólos não podem ser medidas separadamente. Por conseqüência, experimentalmente, somente é possível obter as figuras de pólos reduzidas (Matthies, 1979):

$$\bar{P}_{(hkl)}(y) = \frac{1}{2} [P_{+h}(y) + P_{-h}(y)] \quad (3.67)$$

Se estas figuras de pólos são substituídas em $P_{(hkl)}(y)$ na equação 3.27, uma função distribuição de orientações reduzida $\tilde{f}(g)$ é obtida. A FDO completa pode então ser escrita da forma:

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g) \quad (3.68)$$

Se somente figuras de pólos reduzidas são disponíveis, então a parte $\tilde{\tilde{f}}(g)$ não é vista nesta figuras de pólos, ela é projetada em zero. Conseqüentemente, elas podem ser escolhidas deliberadamente sem mudança dos dados experimentais. A variabilidade da $\tilde{\tilde{f}}(g)$ é, entretanto, restrita pela condição de positividade da FDO (Bunge & Esling, 1979):

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g) \geq 0 \quad (3.69)$$

A liberdade na $f(g)$ introduzida por uma escolha deliberada da $\tilde{\tilde{f}}(g)$ na equação 3.68 (por exemplo colocando-se $\tilde{\tilde{f}}(g)$ para zero) leva ao fenômeno de aparecimento de componentes fantasmas ('ghost phenomena') (Truszkowski et al, 1973). Estes são picos positivos na $f(g)$, os quais não são reais, assim como valores negativos, que surgem e são facilmente reconhecidos como errôneos. Usando a condição positiva da equação 3.69, ainda levando algum grau de liberdade na escolha da $\tilde{\tilde{f}}(g)$, obtém-se uma $f(g)$ consistente com os dados experimentais. A condição de positividade da equação 3.69 é particularmente restritiva se a textura tem larga faixas de zero, a qual também leva a largas faixas de zero na figura de pólos. Este assunto será melhor discutido na seção 3.7.

3.5. Avaliação do erro da função distribuição de orientações

Como discutido anteriormente para a obtenção de uma solução única do problema da inversão das figuras de pólos (equação 3.27) é necessário um número infinito de figuras de pólos (hkl) ou, preferencialmente, a função distribuição $A(h,y)$ como uma função contínua de h . Isto não é possível se as figuras de pólos $P_{(hkl)}(y)$ são deduzidas com base em experimentos de difração de policristais. Conseqüentemente, qualquer solução prática da equação 3.27 terá algum grau de arbitrariedade em virtude do uso de um conjunto finito de figuras de pólos (hkl). A magnitude deste erro pode ser estimada e comparada com a exatidão experimental da medida da figura de pólos. Assim, condições podem ser definidas sobre as quais uma solução pode ser considerada como praticamente única. Este fato, também tem mostrado que as equações 3.27 ou 3.13 não tem uma solução para todas as funções arbitrárias $P_{(hkl)}(y)$ ou $A(h,y)$. Isto é facilmente entendido uma vez que as direções $h \perp (hkl)$ são cristalograficamente relacionadas entre si. Analisando-se as figuras de pólos obtidas experimentalmente pode-se vislumbrar os aspectos gerais da distribuição $f(g)$, isto é, a medida da figura de pólo deve assim ser aproximadamente compatível, a menos de erros experimentais como será discutido na capítulo 4. Entretanto, em um senso estritamente matemático, eles não são exatamente compatíveis. Os vários modelos para inversão de figuras de pólos mencionados anteriormente enfrentam esta situação de várias maneiras. Há, essencialmente duas possibilidades:

- *Primeira:* O método falha e declara que o problema não tem solução (problema não posicionado) (Volkov & Savyolova, 1983).
- *Segunda:* O método emprega alguns compromissos na solução $f^{comp}(g)$, por exemplo, de acordo com o ajuste pelo mínimos quadrados (Bunge, 1996).

Do ponto de vista físico, esta última possibilidade é preferível. O novo conjunto calculado das figuras de pólos obtidas a partir da solução compromisso $f^{comp}(g)$, usando a equação 3.38 é então comparado com as figuras de pólos obtidas experimentalmente. Isto permite uma estimativa da magnitude dos erros experimentais, por exemplo:

$$\int [P_{(hkl)}(y)_{(exp)} - P_{(hkl)}(y)_{(comp)}]^2 dy = \overline{\Delta P}_{(hkl)} \quad (3.70)$$

para cada figura de pólos individual ou para todas as figuras de pólos medidas

$$\sum_{(hkl)} \overline{\Delta P}_{(hkl)} = \overline{\Delta P} \quad (3.71)$$

Deve-se mencionar que várias outras quantidades de erro tem sido definidas, mas todas elas estão baseadas no mesmo princípio do desvio padrão.

3.6. A representatividade da textura através da função distribuição de orientações.

A textura é definida pela fração volumétrica de cristalitos com a orientação g . Esta definição é independente de todos os outros parâmetros da estrutura do grão, por exemplo: tamanho de grão, forma do grão e arranjo mútuo dos grãos, isto é, igualmente independente de uma estrutura bem definida de grãos. Porém, os grãos existem e nestes casos uma FDO por número pode ser definida a partir da medida individual da orientação de cada grão:

$$\frac{dN_g/N}{dg} = f^{\text{número}}(g) \quad (3.72)$$

Dividindo a textura por número pela textura por volume obtém-se a orientação dependente do tamanho médio de grão do material,

$$\bar{v}(g) = \frac{V}{N} \cdot \frac{f^{\text{vol}}(g)}{f^{\text{número}}(g)} \quad (3.73)$$

se a densidade de orientação f é definida com base de N cristalitos, então a incerteza da probabilidade é dada por \sqrt{N} . Portanto, a relevância estatística da FDO (por número e por volume da mesma maneira) é dada por:

$$\frac{df}{f} = \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (3.74)$$

o número N depende do volume da amostra, V^{amostra} ; do volume médio do grão, $V^{\text{grão}}$; do poder de resolução angular, Δg e do tamanho da unidade assimétrica da FDO no espaço de orientação expresso pelo tamanho total, $8\pi^2$, e a multiplicidade m . Introduzindo estas quantidades na equação 3.56:

$$\frac{df}{f} = \left[\frac{V^{\text{grain}}}{V^{\text{sample}}} \cdot \frac{8\pi^2}{\Delta g \cdot m} \cdot \frac{1}{f(g)} \right]^{1/2} \quad (3.75)$$

Pode-se ver que, a relevância estatística e o poder de resolução angular estão intimamente relacionados (Figura.3.11). Considerações similares, também, pode ser aplicadas para a função densidade dos pólos $P_{(hkl)}(\alpha, \beta)$. Neste caso, diferentes técnicas experimentais da medida da figura de pólos como elétrons, raios X e nêutrons devem ser distinguidos no que tange à equação 3.75.

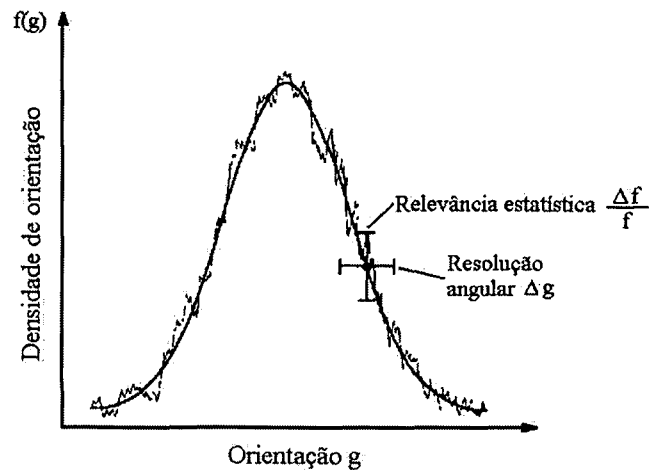


Figura 3.11 – Gráfico referente à relevância estatística e resolução angular.

No caso da difração de nêutrons, a absorção é desprezível e o volume da amostra irradiado é bem conhecido e a equação 3.56 pode ser expressa na forma de:

$$\frac{dP}{P} = \left[\frac{V^{grain}}{V^{sample}} \cdot \frac{4\pi}{\Delta\Omega \cdot m_{(hkl)}} \cdot \frac{I}{P_{(hkl)}(y)} \right]^{1/2} \quad (3.76)$$

onde: $\Delta\Omega$ é o poder de resolução angular na figura de pólos, $m_{(hkl)}$ é a multiplicidade da reflexão (hkl) e 4π é a área total da figura de pólos. De acordo com o fator m figuras de pólos de baixo índice (normalizada) tem uma melhor relevância estatística que as de alto índice.

Na difração de raios X, o volume irradiado pode variar com os ângulos ϖ e χ da orientação da amostra dependendo da técnica usada. Na técnica convencional de reflexão usando a inclinação do ângulo α , a área irradiada aumenta com $1/\text{sen}\alpha$ e a profundidade de penetração dos raios X diminui com $\text{sen}\alpha$. Então a efetiva contribuição do volume da amostra é independente de α . Entretanto, a dependência do ângulo 2θ do

goniômetro deve ser levada em consideração para o conjunto de fendas que definem a óptica dos raios X. Se a área irradiada da amostra é levada em consideração como constante (em relação a 2θ), então o volume efetivo da amostra é proporcional ao $\text{sen } \theta$,

$$V^{\text{amostra}} \sim \text{sen } \theta \quad (3.77)$$

então, em razão deste efeito figuras de pólos com baixos ângulos de Bragg tem uma menor relevância estatística.

Como exemplo: um tamanho de grão de $5\mu\text{m}$, uma área irradiada de $1\text{cm}^2 \times 1\text{cm}^2$, uma profundidade de penetração de $10\mu\text{m}$, um poder de resolução angular de $1^\circ \times 1^\circ$ e $m = 8$ para plano (111) no caso cúbico, então obtém-se a partir da equação 3.76, a relevância estatística $dP/P \sim 3\%$, em relação a densidade de orientação.

3.7. O grau de textura

Os gráficos de secções de φ_1 ou φ_2 do espaço de Euler são a forma mais completa de representar os dados da função distribuição de orientações porem, esta representação é de múltiplos valores, ou seja, um valor para cada orientação g . No entanto, muitas vezes é mais conveniente definir a textura por um valor único. Neste sentido foram propostas diversas definições:

1. A densidade de orientação máxima,

$$f(g)_{\text{máx}} = f_{\text{máx}} \text{ com } 1 \leq f_{\text{máx}} \leq \infty \quad (3.77)$$

2. O grau de textura,

$$\varphi = f_{\text{máx}} - 1 \text{ com } 0 \leq \varphi \leq \infty \quad (3.78)$$

3. O índice de textura, ou J de textura,

$$J = \int [f(g)]^2 dg \text{ com } 1 \leq J \leq \infty \quad (3.79)$$

4. Kocks propõe que a melhor maneira de representar a textura por um único valor é através da raiz quadrada do índice de textura J calculado na equação 3.79.

$$TS = \sqrt{J} \quad (3.80)$$

onde, TS é a força da textura ('Texture Strenght').

3.8. A questão das componentes fantasmas.

“The ghosts are ours brothers,
we have to live with them together....”
Dr.J.Jura, Crakow 1979

Os métodos de expansão em série usados até agora tem mostrados uma falha fundamental, devido a limitação básica no conjunto de funções esféricas generalizadas aplicadas, o qual somente inclui os $T_\ell^{mn}(g)$ com ℓ par. Esta limitação surge devido a aceitação das propriedades de simetria das funções esféricas de superfície (bidimensional) $k_\ell^m(\vec{r})$ para as funções esféricas generalizadas $T_\ell^{mn}(g)$. Estas imprecisões podem ser facilmente remediadas na reprodução das FDO's a partir de conjuntos de orientações simples pelo cálculo dos termos da série de ℓ ímpar no formalismo conhecido. No entanto a reprodução da FDO $f(g)$ a partir de figuras de pólos $\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y})$ obtidas por medidas de difração de raios x encontram o seguinte problema grave descritos a seguir.

Os experimentos de difração não distinguem o sinal do vetor normal \vec{h} do plano espalhador, conforme discutido na seção 3.2,. Se por $P_{\vec{h}}(\vec{y})$ denotarmos a figura de pólos definida da maneira usual, então as figuras de pólos $\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y})$ obtidas por medidas de difração tem a forma:

$$\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y}) = \frac{1}{2} [P_{\vec{h}}(\vec{y}) + P_{-\vec{h}}(\vec{y})] \quad (3.81)$$

Se a $f(g)$ é colocada na forma de expansão em série:

$$f(g) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m,n=-\ell}^{\ell} C_\ell^{mn} T_\ell^{mn}(g) \quad (3.82)$$

a figura de pólos $P_{\vec{h}}(\vec{y})$ é descrita como

$$P_{\vec{h}}(\vec{y}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m,n=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} (-1)^{m+n} C_\ell^{mn} k_\ell^{m*}(\vec{h}) k_{\ell n}^n(\vec{y}) \quad (3.83)$$

Substituindo a equação 3.66 na equação 3.64 e empregando a propriedade das funções esféricas que diz que:

$$k_\ell^m(-\vec{r}) = (-1)^\ell k_\ell^m(\vec{r}) \quad (3.84)$$

tornando a equação:

$$\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m,n=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} (-1)^{m+n} C_\ell^{mn} k_\ell^{m*}(\vec{h}) k_\ell^n(\vec{y}) \frac{1+(-1)^\ell}{2} \quad (3.85)$$

a partir da qual tem-se a propriedade de simetria observada experimentalmente,

$$\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y}) = \tilde{P}_{-\vec{h}}(\vec{y}) = \tilde{P}_{\vec{h}}(-\vec{y}) \quad (3.86)$$

Se a $f(g)$ for definida como a somatória dos dois termos:

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g) \quad (3.87)$$

onde:

$$\tilde{f}(g) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m,n=-\ell}^{\ell} \tilde{C}_\ell^{mn} T_\ell^{mn}(g) \quad (3.88)$$

e,

$$\tilde{\tilde{f}}(g) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m,n=-\ell}^{\ell} \tilde{\tilde{C}}_\ell^{mn} T_\ell^{mn}(g) \quad (3.89)$$

com o ‘ \sim ’ denotando ℓ par e ‘ \approx ’ ℓ ímpar, portanto segue da equação 3.85 que as figuras de pólos obtidas experimentalmente somente contém informação sobre a função $\tilde{f}(g)$.

Pelo fato que parte da função distribuição de orientações permanecer indeterminada a partir de experimentos de difração leva a um resultado falseado da verdadeira função distribuição, pelo aparecimento de componentes de textura inexistentes, chamadas de componentes fantasmas ou “*ghosts*”, este fenômeno tem sido extensivamente estudados (Matthies 1980,1981; Matthies & Pospiech, 1980; Bunge et al, 1981).

Estes estudos têm resultado na proposição de vários modelos para a correção deste fenômeno. Dahms & Bunge (1989) propõe um método iterativo para o cálculo da parte ímpar ($\tilde{\tilde{f}}(g)$) da função distribuição de orientações correspondente a parte ímpar da figura de pólos.

Neste método adota-se que $f(g)$ não assume valores negativos; e que há uma aproximação de ordem $(n-1)$ para a $f(g)$, isto é $^{(n-1)}f(g)$. Então uma enésima aproximação é obtida pela adição de uma enésima função de correção:

$$^{(n)}f(g) = ^{(n-1)}f(g) + ^{(n)}\tilde{f}(g), \quad ^{(0)}f(g) = \tilde{f}(g) \quad (3.90)$$

Aqui, a aproximação de ordem zero para a função completa $f(g)$ é a função par $\tilde{f}(g)$. A função correção $^{(n)}\tilde{f}(g)$ é uma série de ordem ímpar de grau L_l ,

$$^{(n)}\tilde{f}(g) = \sum_{l=1(2)}^{L_l} \sum_{\mu=l}^{M(l)} \sum_{v=l}^{N(l)} C_l \overset{\mu\nu}{T}_l(g), \quad (3.91)$$

que aproxima a parte negativa da função $f(g)$ de ordem $(n-1)$. Define-se a função negativa como:

$$^{(n)}\hat{f}(g) = \begin{cases} -^{(n-1)}f(g), & \text{para } ^{(n-1)}f(g) \leq 0 \\ 0, & \text{para } ^{(n-1)}f(g) > 0 \end{cases} \quad (3.92)$$

A enésima correção $^{(n)}\tilde{f}(g)$ é definida pela condição dos mínimos quadrados:

$$\oint \left[^{(n)}\hat{f}(g) - ^{(n-1)}\tilde{f}(g) \right]^2 dg = \min \quad (3.93)$$

a qual é resolvida pela solução de um sistema de equações características:

$$\sum_{l=1(2)}^{L_l} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{v=1}^{N(l)} C_l \left[\oint \overset{\mu\nu}{T}_l(g) \overset{\mu'\nu'}{T}_l(g) dg \right] = \left[\oint ^{(n)}\hat{f}(g) \overset{\mu'\nu'}{T}_l(g) dg \right] \quad (3.94)$$

Desde que a integração seja feita sobre todo o espaço de orientação, as integrais do lado esquerdo desaparecem como consequência da ortogonalidade. Assim a solução tem a forma de:

$$C_l \overset{\mu\nu}{C}_l = (2l+1) \left[\oint ^{(n)}\hat{f}(g) \overset{\mu'\nu'}{T}_l(g) dg \right] \quad (3.95)$$

Este procedimento pode ser repetido até que a função negativa pela equação 3.91 convirja para zero. Os coeficientes $\overset{\mu\nu}{C}_l$ da função ímpar final são a somatória de todas as aproximações:

$$\hat{C}_\ell^{\mu\nu} = \sum_n^{(n)} \hat{C}_\ell^{\mu\nu} \quad (3.96)$$

O método positivo deve convergir para a solução $f(g)$ da equação fundamental, a qual não possui regiões negativas. Se as figuras de pólos experimentais usadas para entrada de dados equação 3.83 pertencem a uma textura que realmente existe, então a solução da equação 3.83 deve existir, e o procedimento deve convergir para ela. Na prática, as figuras de pólos são modificadas pelas funções estatísticas e pelo erro sistemático. Matematicamente falando, estas figuras de pólos modificadas podem não ser consistente com nenhuma função de textura sob qualquer condição, e particularmente não com uma que obedeça a condição de positividade. Conseqüentemente a convergência do procedimento pode não ser obtida de qualquer modo, ou pelo menos a convergência pode somente ser considerada dentro dos limites do erro experimental das figuras de pólos.

3.8.1. Generalização do método positivo

No método positivo, a “função objetivo” é a função negativa definida na equação 3.87. De modo geral procura-se por uma solução $f(g)$ que tenha um valor positivo mínimo r . Então a equação 3.87 pode ser expressa como:

$$\hat{f}^{(n)}(g) = \begin{cases} -(n-1)f(g) + r, & \text{para } (n-1)f(g) \leq r \\ 0, & \text{para } (n-1)f(g) > r \end{cases} \quad (3.97)$$

Uma solução, com esta propriedade, é então obtida com o mesmo método como descrito acima. É evidente que este procedimento somente pode convergir se a solução com as propriedades definidas pela equação 3.95 realmente existirem.

Uma solução com $r = 1$ é a distribuição randômica. Em todos os outros casos, r deve ser menor que a unidade. Pela escolha de diferentes valores de r , a “amplidão” da faixa de soluções pode deste modo ser estimada. A solução com o maior valor de r corresponde ao máximo “phone” conceito usado por Matthies (1980) no método WINV.

Finalmente, a “função objetivo” pode ainda ser mais bem generalizada pela escolha:

$$\hat{f}^{(n)}(g) = \begin{cases} -(n-1)f(g) + r(g), & \text{para } (n-1)f(g) \leq r(g) \\ 0, & \text{para } (n-1)f(g) > r(g) \end{cases} \quad (3.98)$$

onde $r(g)$ é qualquer função escolhida por tentativa que satisfaça a condição:

$$r(g) \leq 1 \quad (3.99)$$

Com este método todas as possíveis soluções para equação 3.85 podem ser encontradas para que sejam consistentes com o conjunto de figuras de pólos de entrada.

4. Implementação computacional.

O programa foi desenvolvido para análise de textura em amostras com simetria ortorrômbica e que contenham simetria do cristal cúbica de face centrada ou corpo centrado e, também, simetria do cristal hexagonal. A simétrica da amostra pode ser chamada de simetria macroscópica, assim como, a simetria do cristal de simetria microscópica. Implementações futuras poderão ser feitas para abranger um maior número de simetrias macroscópicas e para simetrias microscópica.

O programa foi implementado em linguagem Pascal - Delphi 6 Professional (*Object Pascal*) desenvolvido pela Borland® em ambiente operacional Windows® e foi batizado como PAT de Programa de Análise de Textura. O código fonte do programa pode ser compilado para operar no sistema operacional UNIX e seus derivados (linux, HP-UX, etc). Para isto, utiliza-se um compilador adequado para este sistema operacional. Existe compilador Kylix, também desenvolvido pela Borland® para este fim.

Os menus, botões de chamada, títulos, etc., do programa PAT foram escrito em inglês para que o mesmo tenha uma aplicação mais universal.

O programa PAT consiste de três blocos principais descritos a seguir:

- Primeiro bloco: os dados do arquivo de análise experimental são adequados para o posterior processamento, efetuando-se correções como: eliminação da radiação de fundo (Background), efeito de desfocalização do feixe de raios X e correção para rotação do ângulo β . Foram implementadas rotinas para a leitura dos dados experimentais obtidos em equipamento da *Rigaku Denki* com câmera *Multipurpose* MPA-2000 (Figura 4.1), que consiste em uma câmera com inclinação planar em relação à amostra α de 15° a 90° , com rotação da amostra β de 0° a 360° , aproximação Z (normal a amostra) de $\pm 10\text{mm}$ e oscilação γ de $\pm 20\text{mm}$ controlada por microprocessador dedicado e computador IBM-PC compatível com software de controle geral projetado pelo fabricante utilizando ambiente operacional WINDOWS® NT 4.0, instalado em um equipamento modelo DMAX acoplado em goniômetro tipo horizontal. Porém, o laboratório de difração de raios X do IPEN já possuía um

equipamento da *Rigaku Denki* com câmera de três eixos para levantamento de figura de pólos controlado por uma estação de trabalho com sistema operacional HP-UX (UNIX). Como os arquivos possuem pequenas diferenças, foi necessária a implementação de uma rotina própria para poder identificá-los ficando, assim, transparente ao analista de qual sistema originou-se os arquivos. Rotinas adicionais poderão ser implementadas, no futuro, para compatibilizar os dados gerados por equipamentos de outros fabricantes como, por exemplo, Philips, Shimatzu, etc.

- Segundo bloco: consiste na implementação do algoritmo matemático para a obtenção dos coeficientes $C_i^{\mu\nu}$, equação 3.51, utilizando os dados tratados no primeiro bloco. É gerada, também, a biblioteca de dados que depende da simetria microscópica (crystal) requerida. A partir dos coeficientes $C_i^{\mu\nu}$ é calculada a função distribuição de orientações (FDO), também podendo ser calculada a figura de pólos completa.
- Terceiro bloco: consiste no desenvolvimento das representações gráficas da figura de pólos por projeção estereográfica e da função distribuição de orientações representada no espaço de *Euler*, para visualização em monitor de vídeo, geração de arquivos de imagem no formato JPEG ou Bitmap (BMP) e levantamento de gráficos de fibra.

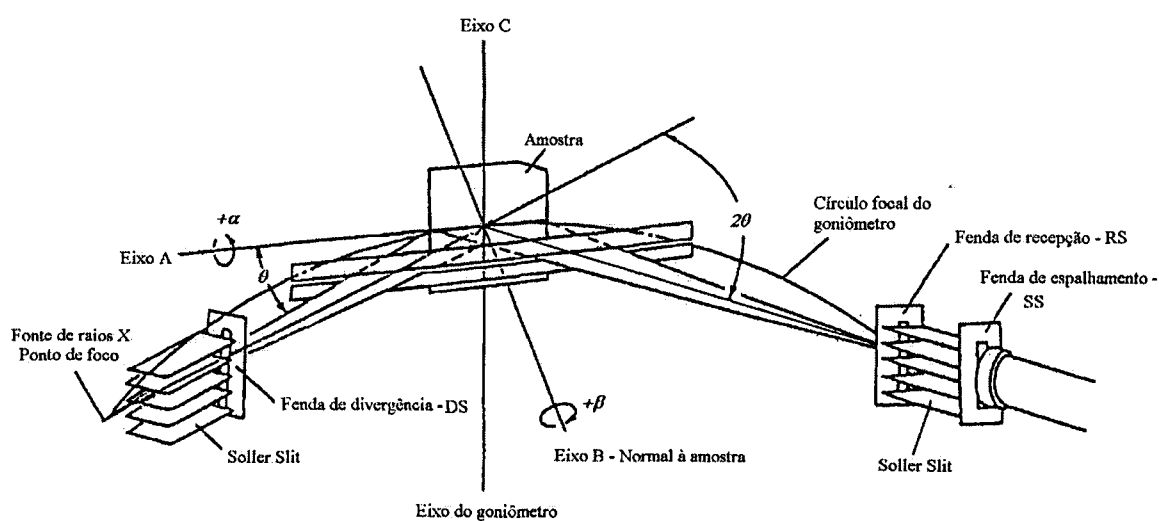


Figura 4.1 – Esquema da geometria óptica do raios X utilizada (método de Schulz) para o levantamento da figura de pólos (adaptado Manual nº13203A04, Rigaku Coporation).

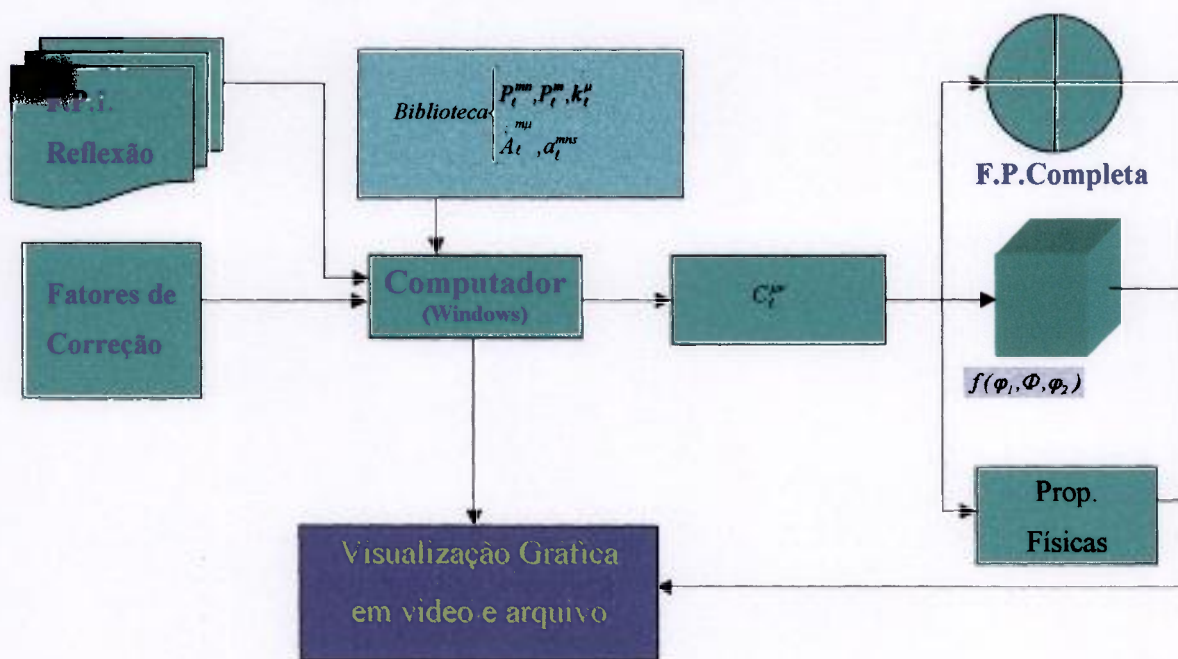


Figura 4.2 – Fluxograma de dados processados pelo programa PAT

O fluxograma da Figura 4.2 mostra a seqüência das rotinas desde o processamento de dados iniciais até a determinação dos coeficientes C_t^{uv} e a geração da visualização gráfica.

O primeiro e segundo blocos foram implementados nesta seqüência, uma vez que segundo depende do primeiro. Já o terceiro bloco foi implementado em paralelo com os dois primeiros, pois se faz necessária a visualização gráfica dos resultados obtidos em ambos os blocos, uma vez que não se possui nenhum programa comercial com este fim.

4.1. Implementação computacional – Primeiro bloco.

4.1.1. Introdução dos dados.

Neste item descrevem-se as rotinas e sub-rotinas associadas para se processar as correções e a adequação dos dados dos arquivos de dados experimentais para utilização no segundo bloco.

Como pode ser visualizado na figura 4.3 o programa apresenta uma janela com o título 'Main' e um quadro branco com figuras quadradas e circulares que são relativas a visualização gráfica dos dados experimentais da figuras de pólos. Dentro da janela 'Main' visualiza-se um caixa de escolha para o sistema do cristal "Crystal System". Clicando-se na seta dentro da caixa visualizam-se os sistemas disponíveis como verificado na Figura 4.4.

A atual versão do programa PAT está somente implementada para sistemas de simetria cúbica e hexagonal. Os outros sistemas existentes na escolha são para implementação futura.

Quando o sistema hexagonal é requisitado, faz-se necessário digitar a relação c/a . Este dado é necessário para o programa calcular o ângulo de projeção estereográfica azimutal (equação 4.15 e 4.16). Uma caixa de introdução deste dado aparecerá automaticamente para que o analista digite o valor desta relação.

Escolhido o sistema de simetria do cristal, o programa apresentará na janela 'Main' componentes de entrada dos arquivos experimentais e de pré-processamento conferidos pelo analista, figura 4.5. Mas antes, faz-se necessário escolher o número de arquivos que será usado no processamento da FDO. No caso do programa PAT, a escolha é de 3 ou 4 arquivos. A necessidade desta escolha decorre que em determinados materiais com mais de uma fase pode ocorrer a sobreposição dos picos de difração inviabilizando um possível levantamento da figura de pólos, como por exemplo: liga de ferro que contenha ferrita + austenita em sua composição. Cabe ao analista verificar a existência de outros planos cristalográficos que são difratados onde não ocorra esta sobreposição, podendo-se não chegar aos quatro picos possíveis. Daí a necessidade de um número menor de planos. O único problema decorrente é verificado na perda de precisão dos dados, Figura 4.6.

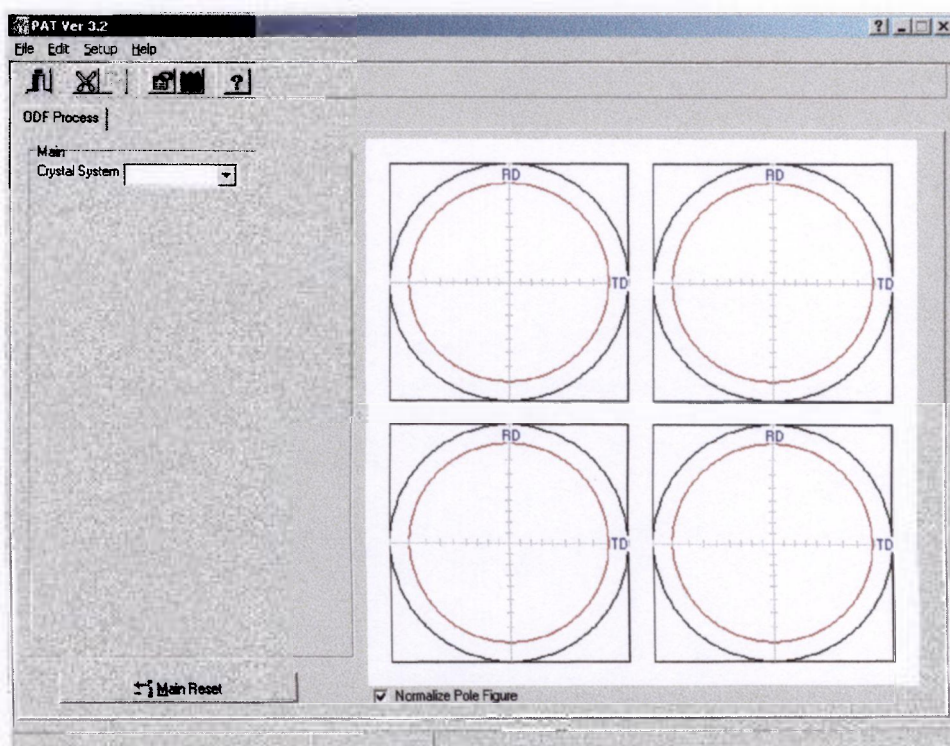


Figura 4.3- Visualização inicial do programa PAT



Figura 4.4 – Escolha do sistema do cristal.

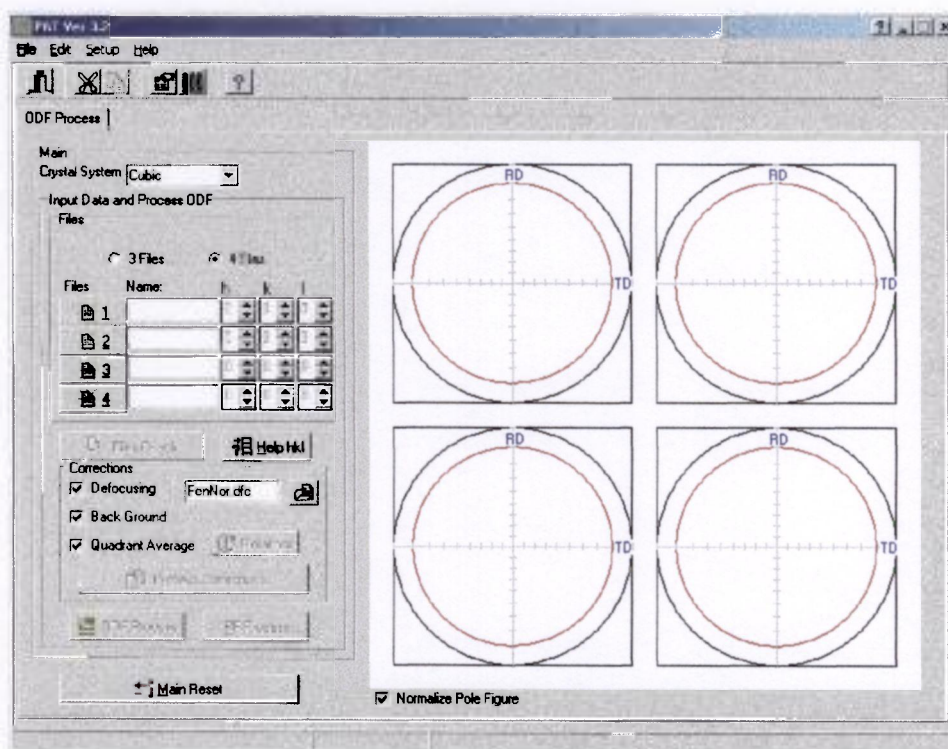


Figura 4.5 – Janela de processamento de dados.

O arquivo originado, quando da medida da figura de pólos, carrega todas informações necessárias para que o programa funcione corretamente. Uma sub-rotina verifica a validade do arquivo, analisando se o mesmo é de figura de pólos. Caso contrário uma mensagem aparecerá informando ao analista do erro. Nesta mesma sub-rotina é verificado se os dados foram obtidos usando-se um equipamento com controle de software em ambiente WINDOWS ou UNIX. Uma amostra de como o arquivo é gerado pelo

sistema de aquisição pode ser visto na Figura 4.7. O arquivo de dados experimentais adquiridos pela medida da figura de pólos é um arquivo em *ASCII* (American Standard Code for Information Interchange). Este arquivo consiste de um cabeçalho na qual são descritas as condições de análise tais como faixa de ângulo α e β , passo utilizado em cada uma das varreduras, valor da radiação de fundo para cada ângulo α , etc. A intensidade medida é disposta na forma de quatro dados de intensidade por linha, separados por vírgula, logo após *COUNT (Figura 4.7).

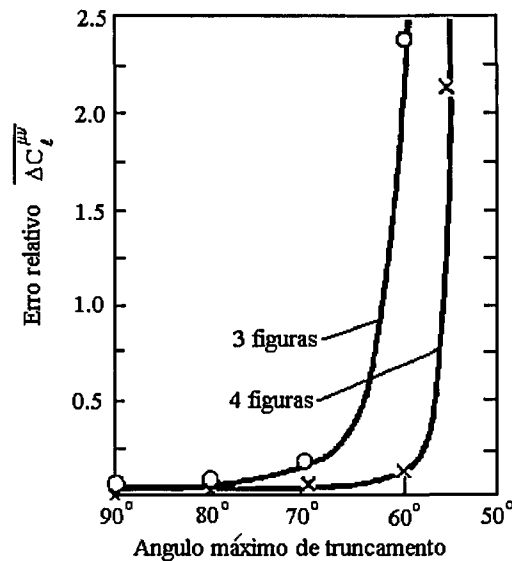


Figura 4.6 – Número de figuras de pólos e precisão de cálculo dos coeficientes $C_l^{\mu\nu}$.

Os botões indicados com '1', '2', '3' e '4' no caixa 'Files' são relativos a introdução dos arquivos para análise. Ao acionar um deles abre-se uma caixa de diálogo para que o usuário introduza o arquivo, Figura 4.8. Ao se introduzir o arquivo, aparecerá ao lado do botão que foi clicado, na caixa de texto, o nome do arquivo escolhido e, automaticamente na leitura do arquivo, os índices de *Miller hkl* nos respectivos lugares. Caso o analista encontre algum erro neste índice, o acerto poderá ser feito digitando o valor correto ou usando as setas para cima e para baixo dentro da respectiva caixa. Existe na caixa 'Main' um botão 'Help hkl' para ajudar em possível dúvida dos índices, relativo ao sistema microscópico analisado. Os índices de *Miller* são um fator importante para o cálculo dos coeficientes $C_l^{\mu\nu}$, por isto, o programa verificará a validade do mesmo, tanto que, qualquer erro reiniciará o programa e, se isto ocorrer o programa avisará o analista qual o erro verificado, que pode ser para o sistema escolhido (cúbico CFC, cúbico CCC e hexagonal), assim como para os valores dos índices de *Miller* não condizentes com o

sistema ou em duplicidade. Para o sistema hexagonal esta verificação é intrínseca aos ângulos dos planos conseguidos e carregados por meio de arquivo específico.

```

*TYPE          = Raw
*CLASS         = Polefig
*SAMPLE       = A01-20-03-Centro
*COMMENT      = Alpha-R=15.000
*FNAME        = Reg034C-02-111.raw
*DATE         = 19-Mar-02 18:08
*GROUP_COUNT  = 1
*GONIO        = RINT2000 wide angle
goniometer, 185
*ATTACHMENT   = Multipurpose attachment for Pole Fig.
*ASC          = 0, 0, 0.000000, 0.000000
*FILTER       = K-beta filter
*SLIT_NAME    = 0, DivSlit
*SLIT_NAME    = 1, SctSlit
*SLIT_NAME    = 2, RecSlit
*SLIT_NAME    = 3, DivH.L.Slit
*COUNTER      = Scintillation counter, 0
*POS_FORMAT   = 0
*SCAN_AXIS    = beta
*MEAS_MODE    = FT
*TARGET       = 42
*XRAY_CHAR    = K-ALPHA1
*WAVE_LENGTH1 = 0.7093
*WAVE_LENGTH2 = 0.71359
*THICKNESS    = 0, 0.000000
*MU           = 0, 0.000000
*SCAN_MODE    = beta
*SPEED_DIM    = sec./step(FT)
*XUNIT        = deg.
*YUNIT        = counts
*SCALE_MODE   = 1
*REP_COUNT    = 1
*SE_COUNT     = 0
*STD_MATERIAL = Unknown, Unknown,
*LATT_CONS    = 0, Cubic, Unknown,
*SEC_COUNT    = 16
*TSPEC_SIZE   = 0
*EXTRA_SIZE   = 0
*PF_MEASUR   = Coaxial circle scan
*PF_DATATYPE  = Integral intensity
*PF_METHOD    = 0, Unknown
*PF_METHOD    = 1, Schulz reflection method
*PF_PCOUNT  = 0, 0
*PF_PCOUNT  = 1, 16
*PF_ASTART   = 0, 15
*PF_ASTART   = 1, 15
*PF_ASTOP    = 0, 80
*PF_ASTOP    = 1, 90
*PF_ASTEP    = 0, 5
*PF_ASTEP    = 1, 5
*PF_ASPEED   = 0, 0.000000
*PF_ASPEED   = 1, 0.000000
*PF_GAMMA    = 0, 0.000000
*PF_GAMMA    = 1, 0.000000
*PF_2THANGLE = 0, 0.000000
*PF_2THANGLE = 1, 19.6
*PF_2THSTART = 0, 0.000000
*PF_2THSTART = 1, 0.000000
*PF_2THSTOP  = 0, 0.000000
*PF_2THSTOP  = 1, 0.000000
*PF_2THSTEP  = 0, 0.000000
*PF_2THSTEP  = 1, 0.000000

*PF_ASPEED   = 0, 0.000000
*PF_ASPEED   = 1, 0.000000
*MEMO        = Eluma
*BEGIN
*GROUP       = 0
*START       = 0.000000
*STOP        = 360
*STEP        = 5
*OFFSET      =
*SPEED       = 4
*SLIT_SPEC   = 0, 1deg., 1.75, 10 ✓
*SLIT_SPEC   = 1, 5mm, 5, 20
*SLIT_SPEC   = 2, 4mm, 4, 20
*SLIT_SPEC   = 3, 1.2mm, 1.2, 1.2
*KV           = 40
*MA          = 20
*LOW         = 4370.88
*HIGH        = 0.000000
*CTEMPER     = 0, 0.000000
*CTEMPER     = 1, 0.000000
*CTEMPER     = 2, 0.000000
*PAREX       = 0, 0.000000
*PAREX       = 1, 0.000000
*PAREX       = 2, 0.000000
*PAREX       = 3, 0.000000
*PAREX       = 4, 0.000000
*PAREX       = 5, 0.000000
*PAREX       = 6, 0.000000
*PAREX       = 7, 0.000000
*PAREX       = 8, 0.000000
*PAREX       = 9, 0.000000
*PAREX       = 10, 0.000000
*PAREX       = 11, 0.000000
*PAREX       = 12, 0.000000
*PAREX       = 13, 0.000000
*PAREX       = 14, 0.000000
*PAREX       = 15, 0.000000
*FULL_SCALE  = 1000
*PF_ANGLE    = 15
*PF_BANGLE   = 0.000000
*INDEX       = 1, 1, 1
*COUNT      = 73
3916, 5747, 5368, 4579
4924, 5059, 4674, 4318
5611, 5339, 5762, 5073
5422, 5752, 5457, 6168
5575, 4245, 4266, 5192
6242, 4845, 4874, 5382
5448, 5230, 6135, 4573
4725, 4860, 4869, 4892
5051, 6366, 5367, 4603
4423, 6497, 5353, 4809
4367, 4204, 4463, 4870
5031, 6313, 5528, 5552
5380, 6106, 5746, 6281
5910, 4293, 4235, 5244
5353, 4446, 5435, 5396
6101, 5855, 5840, 5422
5154, 5185, 5345, 5021
4910, 6732, 6185, 4573
3949
*END
etc...

```

Figura 4.7 – Exemplo de parte arquivo de dados de figura de pólos.

Logo após a introdução do arquivo de dados das figuras de pólos, o programa automaticamente a desenhará no espaço ao lado, em branco, que contém 4 retângulos e 2 círculos inscritos com um em preto e outro em vermelho. Cada retângulo define a área em que será desenhada a figura de pólos referente ao arquivo introduzido e, logo acima, aparecerá o nome do arquivo. O círculo preto representa α igual a 90° . Já o círculo vermelho define α igual a 75° , ângulo máximo conseguido utilizando-se o método da

reflexão nos equipamentos disponíveis. Em cada área de desenho da figura de pólos é representado o eixo α , linha vertical e horizontal, com marcações de 10° em 10° (Figura 4.9).

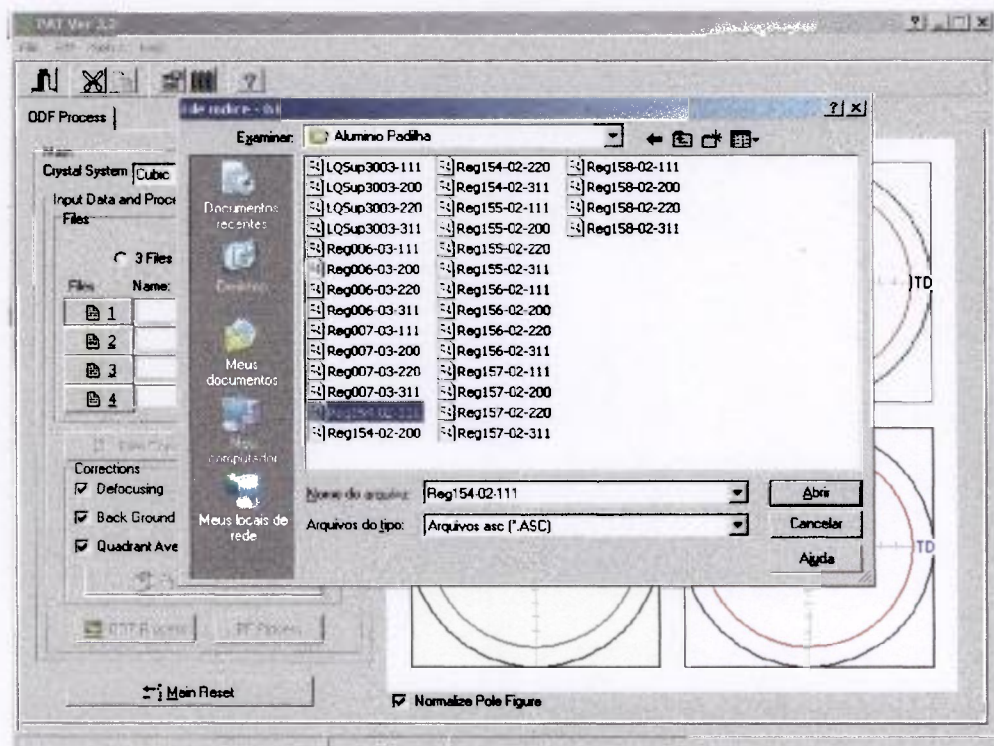


Figura 4.8 – Caixa de diálogo para introdução dos arquivos experimentais

A representação dos dados experimentais obtidos no levantamento das figuras de pólos é realizada pela representação de isolinhas em uma projeção estereográfica. A rotina para o traçado das isolinhas utiliza uma matriz quadrada de 36×36 elementos com o passo determinado na época da aquisição de dados tanto para α como para β . A montagem da matriz é feita utilizando-se as equações:

$$i = \frac{\cos(\beta)\sin(\alpha)}{1 + \cos(\beta)} \cdot 18 + 18;$$

$$j = \frac{\sin(\beta)\sin(\alpha)}{1 + \cos(\beta)} \cdot 18 + 18$$
(4.1)

onde: i e j são as coordenadas da matriz de desenho de contorno e α e β os ângulos de varredura do levantamento de dados.

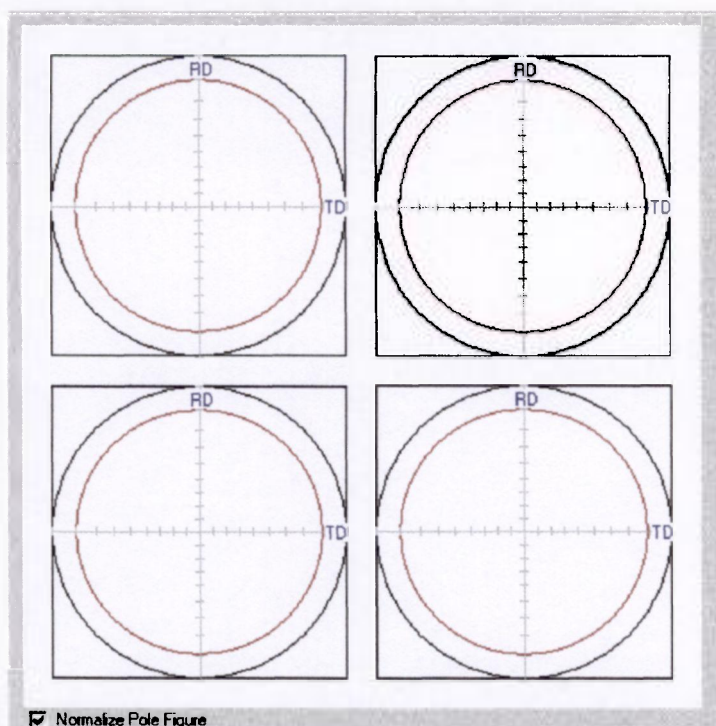


Figura 4.9 – Tela ao qual é desenhada a projeção estereográfica dos dados de figura de pólos.

Como pode ser visto na Figura 4.9, no lado inferior esquerdo, existe uma caixa de checagem com a frase - “*Normalize Pole Figure*” que, quando checada, normaliza os dados experimentais com base na equação 3.41. Esta normalização é útil para se ter noção da intensidade dos pólos em relação ao aleatório, por isto a intensidade numérica calculada é dada em vezes o aleatório ou *Times Random*, em inglês. Esta normalização só terá efeito visual ao se clicar com o cursor sobre a figura de pólos com o botão direito do mouse, que acionará uma janela de diálogo (‘popup-menu’), veja Figura 4.10, indicada pela seta. Ao clicar em “*3D Polefig*”, aparecerá uma janela mostrando a figura de pólos em três dimensões. Nesta janela, o analista poderá executar algumas operações para melhorar a visualização do gráfico, como: rodar, expandir, controlar a transparência, imprimir, copiar em clipboard para introduzir em texto digital, controlar as cores, etc. Esta visualização gráfica faz parte de um software produzido pela Steema[®] software – TeeChart Pro v6.01 com licença teste (‘*Trial*’). Como pode ser verificada, a legenda do gráfico 3D, os valores numéricos relativos às cores que estão na Figura 4.11 estão normalizados. Retirando-se a checagem da caixa “*Normalize Pole Figure*” e chamando novamente o gráfico 3D, na legenda aparecerá o valor numérico das intensidades medidas quando da aquisição de dados.

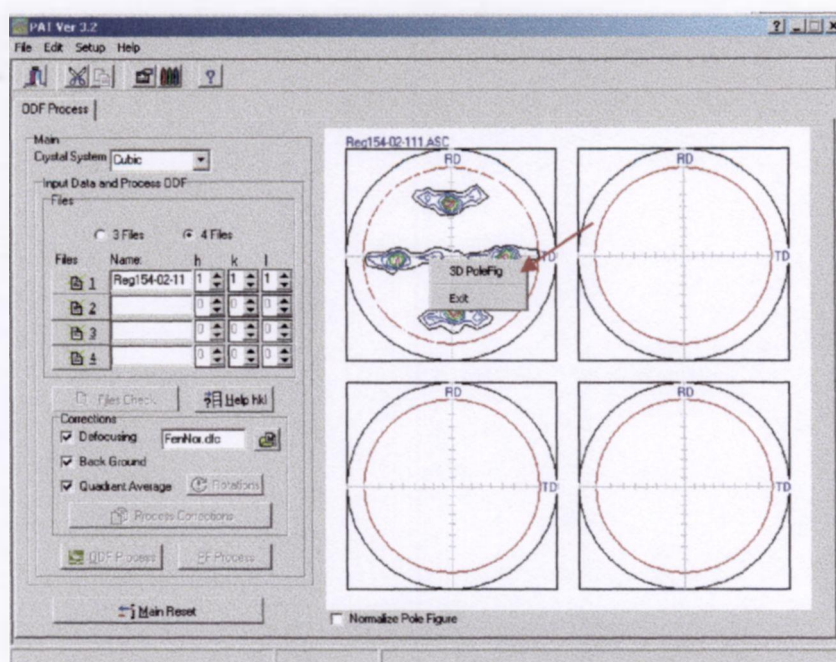


Figura 4.10 – Chamada de tela de gráfico 3D para figura de pólos.

Continuando com o procedimento de introdução de dados, obtém-se a seguinte tela no programa conforme mostrado na figura 4.12. A seqüência de introdução de dados não faz diferença quanto ao número do botão do arquivo acionado. O gráfico da projeção estereográfica é executado da esquerda para direita, de cima para baixo e esta relacionado ao número do botão do arquivo acionado na mesma seqüência. Todos os gráficos em 3D podem ser visualizados conforme seqüência anteriormente descrita, tendo somente que acionar o botão direito em cima do gráfico desejado. Além disto, acima de cada gráfico da projeção estereográfica aparecerá o nome do arquivo correspondente. Se o analista tiver dúvida sobre os arquivos introduzidos, o botão 'Files Check' pode ser acionado abrindo, assim, uma janela com os principais dados do arquivo (Figura 4.13).

Os dados experimentais da figura de pólos carregam dois erros importantes que devem ser corrigidos: radiação de fundo (B.G.) e desfocalização.

Devido a simetria da amostra (macroscópica), pode-se utilizar uma média dos quadrantes para melhorar a estatística dos dados. Vale lembrar que, quando do levantamento da figura de pólos, o tempo de contagem influencia no número de contagens de aquisição. Para isto, o analista ajusta um tempo fixo de contagem para cada passo em β para que seja em torno de 10^4 contagens, garantindo um erro menor que 1%, ou seja, o erro é inerente a raiz quadrada do número de contagem logo, $E\% = \pm \sqrt{10^4} = \pm 100$ contagens,

que equivale a 1% porém, na prática, nem sempre é possível este ajuste pois para determinadas reflexões este tempo seria muito longo devido a baixa intensidade difratada do raios X.

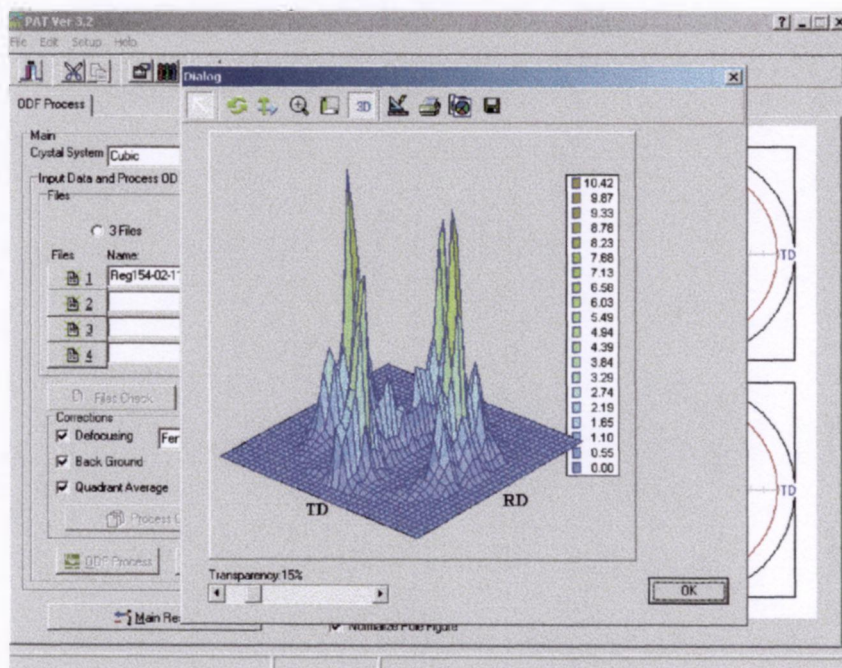


Figura 4.11 – Janela de exibição da figura de pólos em 3D e menus interativos.

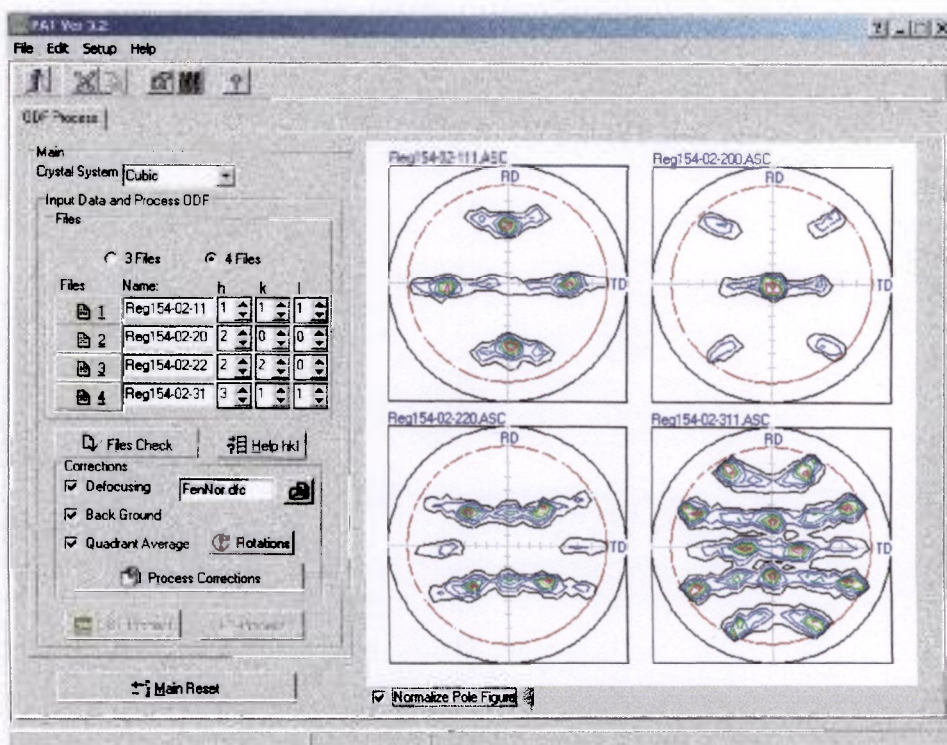


Figura 4.12 – Tela após a introdução de dados.

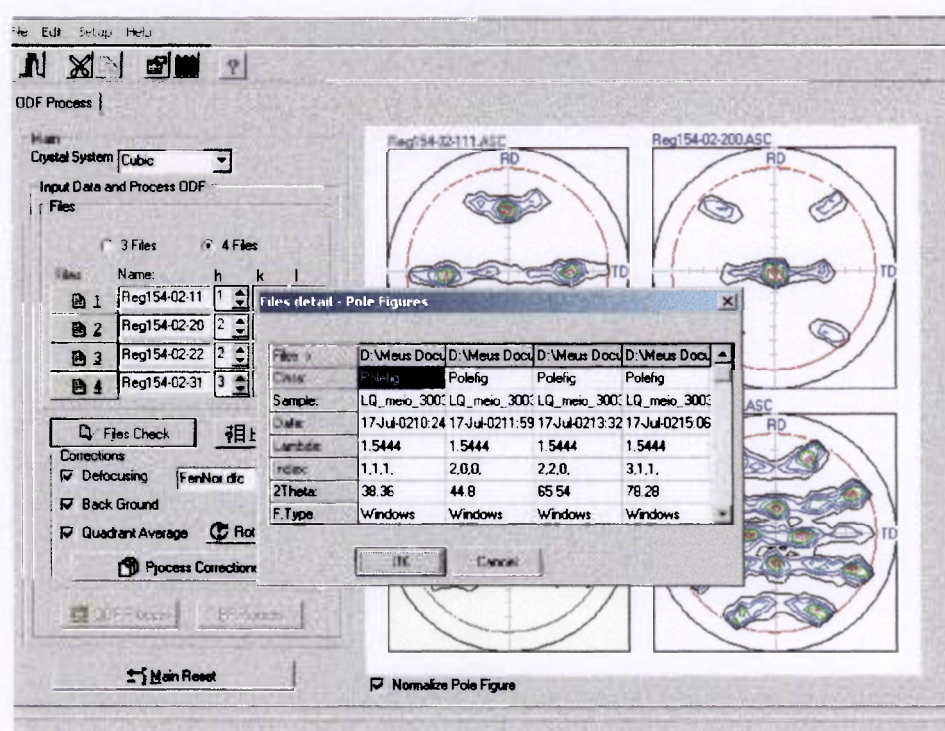


Figura 4.13 – Janela de verificação dos arquivos introduzidos.

4.1.2. Correção de erros experimentais e estatísticas dos dados

4.1.2.1. Desfocalização

A desfocalização é um erro experimental devido à mudança da geometria da área iluminada quando da inclinação da amostra em relação ao eixo ortogonal de incidência do feixe de raios X (varredura do ângulo α) que implica na variação da intensidade medida. A desfocalização também é influenciada pelo ângulo de medida da condição de difração (ângulo 2θ) e das fendas de colimação do feixe (divergência, espalhamento e recepção).

Para se realizar esta correção é necessário o levantamento da figura de pólos de uma amostra que não apresente orientação preferencial (orientação aleatória). Para isto, os arquivos de desfocalização foram preparados utilizando silício e alumínio em pó. Os dados adquiridos foram normalizados para 1 (em base da maior contagem de cada arquivo) e posto na forma de tabela de texto. As Figuras 4.14, 4.15 e 4.16 apresentam os gráficos obtidos para as curvas de desfocalização medidas para os três conjuntos de fendas da geometria utilizada no goniômetro (geometria de Schulz). Esta geometria é composta de 3 fendas distintas: divergência (DS), recepção (RS) e espalhamento (SS). Deram-se nomes distintos para identificar os conjuntos: Grossas (DS=1°, RS=5mm e SS=4mm), Normal

(DS=1/2°, RS=5mm e SS=4mm) e Finas: (DS=1/4°, RS=4mm e SS=3mm). Estes são os conjuntos de fendas mais utilizadas no dia a dia. A escolha da geometria do feixe é feita pelo analista de forma a ajustar as condições de medida da amostra no que se refere ao seu tamanho físico em relação a área iluminada. Na legenda interna das Figuras 4.14, 4.15 e 4.16, os valores numéricos referem-se ao ângulo 2θ em que foram realizadas as medidas.

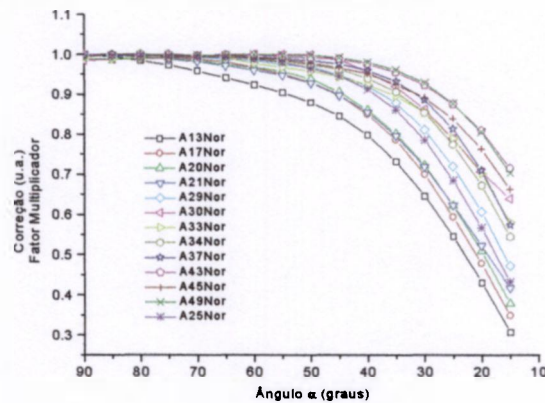


Figura 4.14 Curvas de desfocalização para o conjunto de Fendas Grossas.

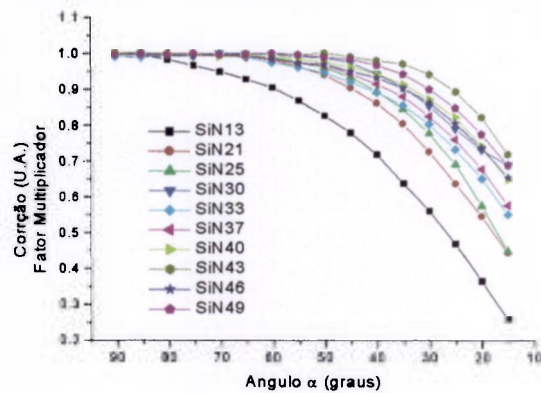


Figura 4.15 Curvas de desfocalização para o conjunto de Fendas Normais.

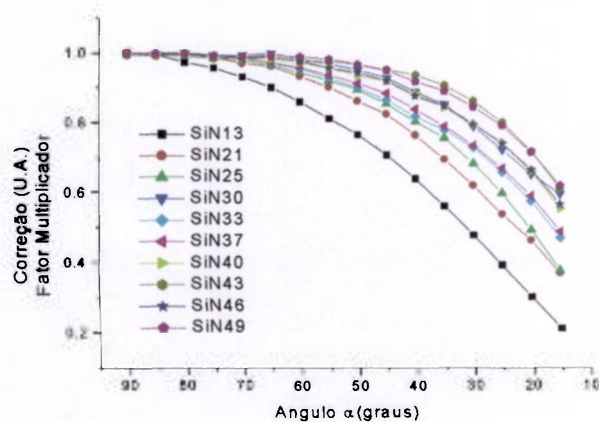


Figura 4.16 Curvas de desfocalização para o conjunto de Fendas Finas.

A escolha do arquivo, a ser utilizado na correção, é feita pelo analista na qual é introduzido o nome do arquivo na caixa de diálogo situado à esquerda do item “*desfocusing*” (Figura 4.12). Para escolher o nome, existe do lado direito da caixa de nome do arquivo de desfocalização um botão que acionará uma caixa de diálogo para a escolha do arquivo. A extensão adotada para este arquivo é ‘.dfc’. Se não for assinalada a correção de desfocalização, a caixa do nome do arquivo será desabilitada e a correção não será efetuada.

A correção é realizada por uma sub-rotina que verifica o ângulo 2θ em que foi realizada a medida e aplica a correção utilizando a equação:

$$I(\alpha, \beta)_{cF} = \frac{I(\alpha, \beta)_{exp}}{F} \quad (4.2)$$

onde: $I(\alpha, \beta)_{exp}$ é o valor da intensidade medida experimentalmente e F o fator de correção para o efeito de desfocalização obtido no respectivo arquivo.

Se o ângulo 2θ em que foi realizada a medida não existir, uma outra sub-rotina calcula o valor do fator através de interpolação entre os dois ângulos próximos ao requerido. O arquivo de desfocalização é de fácil montagem no caso de necessidade. O arquivo é montado em forma de texto, conforme Figura 4.17. A primeira linha do arquivo refere-se ao número de ângulos existentes no arquivo. A primeira coluna logo abaixo contém os ângulos 2θ que foram feitas as medidas. A linha seqüente, à esquerda destes ângulos, refere-se ao valor de desfocalização de correção F que será utilizado na equação 4.2 dado o passo α . Os arquivos foram gerados para um passo de α de 5° em 5° . Se o passo de α for diferente, uma sub-rotina interpola o valor correto calculando a curva de ajuste do fator F da equação 4.2, com as curvas adjacentes.

```

10
13 0.26 0.37 0.47 0.56 0.64 0.72 0.78 0.83 0.87 0.90 0.93 0.95 0.97 0.98 0.99 1.00
21 0.44 0.55 0.64 0.73 0.80 0.86 0.90 0.94 0.96 0.98 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00
25 0.45 0.58 0.69 0.78 0.85 0.89 0.93 0.96 0.98 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00
30 0.69 0.73 0.79 0.85 0.91 0.94 0.97 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00 0.99 0.99 0.99 0.99
33 0.55 0.65 0.73 0.80 0.86 0.89 0.92 0.94 0.96 0.97 0.99 0.99 1.00 1.00 0.99 0.99
37 0.58 0.68 0.76 0.82 0.88 0.91 0.94 0.97 0.97 0.98 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00
40 0.65 0.74 0.82 0.87 0.91 0.94 0.96 0.97 0.98 0.99 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00
43 0.72 0.82 0.89 0.94 0.97 0.98 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00
46 0.65 0.74 0.81 0.86 0.90 0.93 0.95 0.97 0.97 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99 1.00 1.00
49 0.69 0.78 0.85 0.90 0.94 0.97 0.98 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 0.99 1.00

```

Figura 4.17 – Exemplo de arquivo empregado na correção de desfocalização.

4.1.2.2. Correção para a radiação de fundo (Background).

A medida da radiação de fundo pode ser realizada em dois ângulos 2θ distintos, quando assim programado pelo analista, identificados como *HighBG* e *LowBG* no cabeçalho do arquivo de dados gerados pelo programa do goniômetro (Figura 4.7). Uma rotina identifica estes valores e calcula o valor a ser descontado utilizando a equação:

$$BG = \frac{LowBG + HighCG}{2} \quad (4.3)$$

onde:

$$LowBg = \left[\frac{*Low}{*COUNT} \right] x (*Speed) \quad (4.4)$$

e

$$HighBg = \left[\frac{*High}{*COUNT} \right] x (*Speed) \quad (4.5)$$

Sendo: **Low* e **High* → contagens, mais baixa e mais alta na tomada de dados respectivamente; **count* → contagem no ângulo e, **Speed* → velocidade de contagem ou tempo fixo na aquisição do dado (Rigaku – informação verbal).

O valor obtido utilizando a equação 4.3 é subtraído de todos os valores de intensidade medidos. A medida da radiação de fundo, também, pode ser realizada em um único ângulo 2θ , programado pelo analista e, o programa de aquisição, mede no ângulo β de menor intensidade do ângulo α especificado. Quando ocorre isto, a sub-rotina de subtração de *B.G.* somente subtrai este valor dos dados. Em alguns casos, devido a características-próprias da amostra ou da má escolha do valor de 2θ especificado, o valor medido de *B.G.* é maior que o valor da intensidade medida. Neste caso foi implementada uma sub-rotina de *B.G.* que calcula o erro estatístico do número de contagens do pico e do *B.G.* e os compara. Se o resultado for um número negativo é dado um alerta ao analista para a existência deste problema, que pode optar zerar os dados negativos ou mesmo não efetuar a correção.

4.1.2.3. Média de quadrantes

Uma característica importante das amostras com simetria ortorrômbica é a simetria dos quadrantes da figura de pólos (característica de amostras que sofreram laminação), como pode ser visto na Figura 4.11. Ao se considerar esta característica, a

medida pode ser realizada para a faixa de β de 0° a 90° (1° quadrante) diminuindo o tempo de análise. Porém, durante o processamento do material, esta simetria pode ser alterada exibindo intensidade do pólo diferente de quadrante para quadrante. Por este motivo, em geral, as medidas são realizadas para todos os quadrantes. No entanto, quando a medida é realizada em todos os quadrantes, é possível aproveitar os dados para a obtenção de uma média entre os pontos simétricos dos quadrantes, melhorando desta maneira a estatística de contagem. Uma sub-rotina foi implementada operacionalizando esta média e reconstruindo os dados para os quatro quadrantes, obtendo como resultado uma figura de pólos totalmente simétrica. Caso não seja requerida esta operação o processamento se dará somente para os dados do primeiro quadrante (β de 0° à 90°).

A simetria existente entre os quadrantes reduz bastante o processamento geral para obtenção dos coeficientes $C_t^{\mu\nu}$, uma vez que os coeficientes somente precisam ser calculados de 0° à 90° , ganhando-se tempo de processamento.

4.1.2.4. Erro de ângulo β rodado.

No levantamento de dados, o analista ao colocar a amostra no goniômetro de textura, pode cometer um erro de posicionamento colocando-a girada em relação a direção de laminação (DL) ou defasada de alguns graus em relação a posição de 0° do ângulo β , devido a não inicialização correta do eixo que aciona o ângulo β . Este não alinhamento entre as referências, pode ser visto na figura de pólos mostrada na Figura 4.18. Esta rotação inviabiliza o processo de levantamento da FDO. Para corrigir este erro, uma sub-rotina é chamada acionando-se o botão '*Rotation*' que abre uma janela de diálogo como mostrado na Figura 4.19. Na caixa de diálogo, o analista coloca o valor de rotação para a correção de todos os arquivos. Para isto, ele pode digitar o valor da correção diretamente na caixa de texto branca ao lado do arquivo correspondente ou, acionar as setas adjacentes à caixa de texto para aumentar ou diminuir o valor correspondente. Os valores que são aceitos na caixa de texto, via teclado, são múltiplos do passo de β ou no uso das setas, o valor se atualizará com o passo de β . Após a correção (que no exemplo é de 30°) a rotina redesenhará a figura de pólos (Figura 4.20). Caso o analista considere não estar correta a rotação o mesmo poderá executá-la quantas vezes quiser.

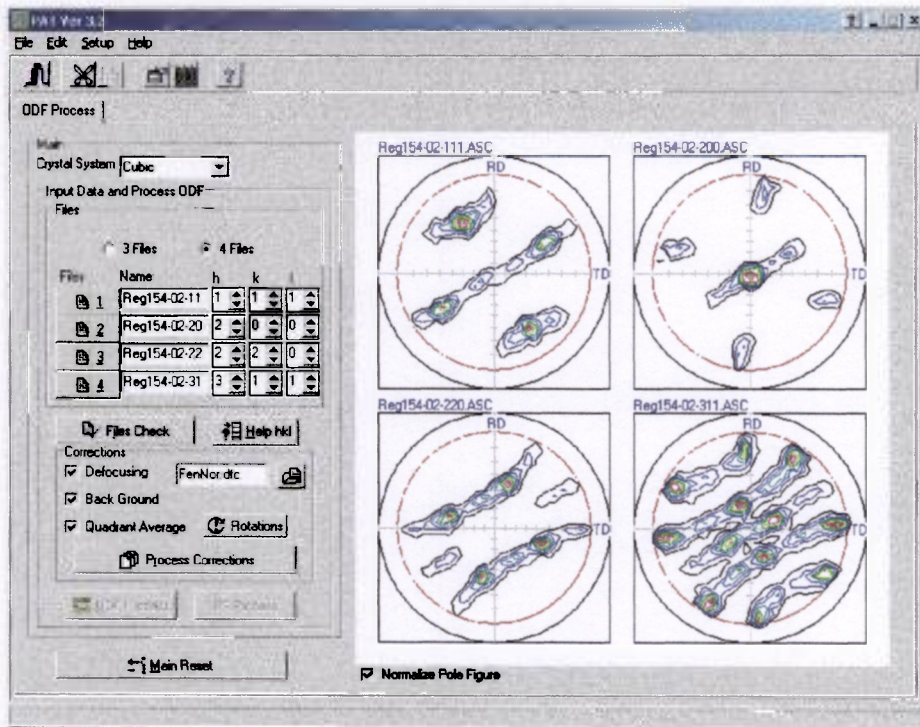


Figura 4.18 – Figuras de pólos mostrando rotação do eixo de simetria quando da aquisição dos dados devido a erro de posicionamento ou inicialização do eixo do β .

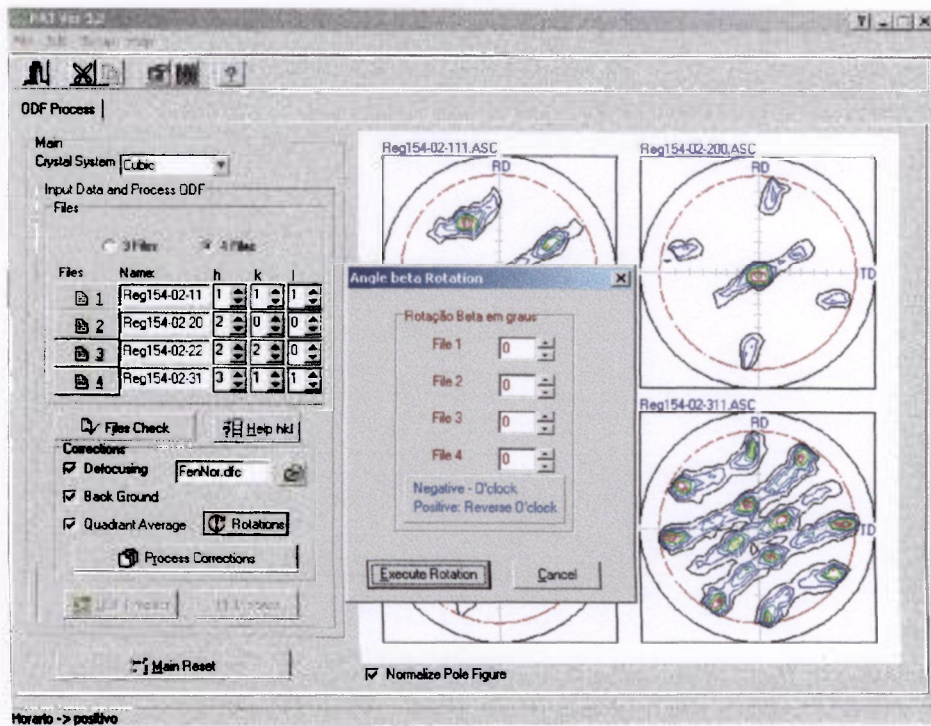


Figura 4.19 – Caixa de diálogo aberta ao se acionar o botão 'Rotations'.

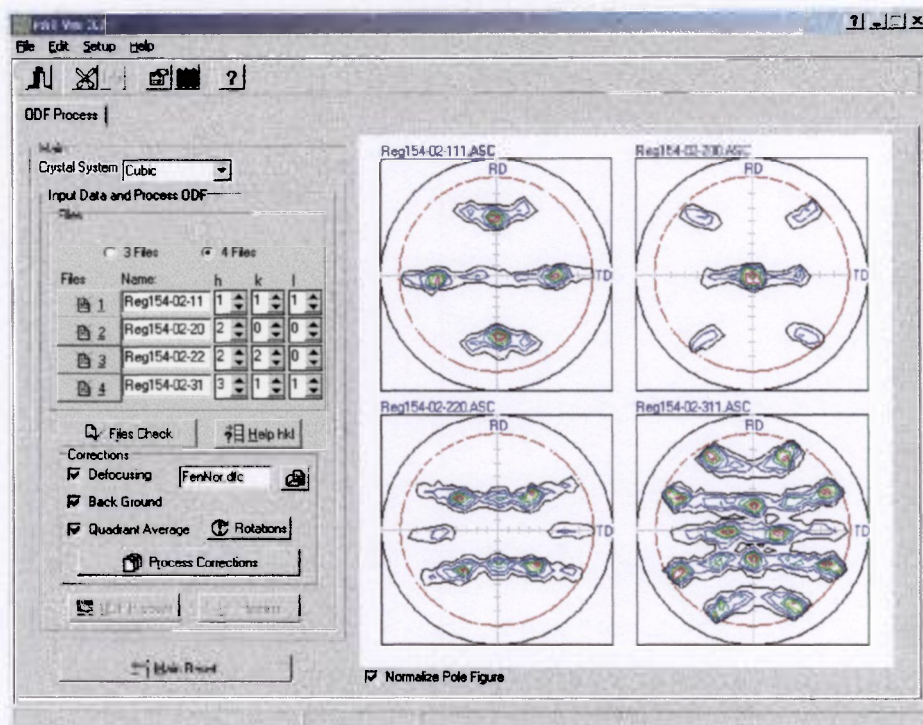


Figura 4.20 – Figuras de pólos após aplicada a correção de rotação.

4.1.2.5. Execução das correções.

Após o analista verificar todas as correções que considera necessárias, o acionamento do botão '*Process Corrections*' executará os procedimentos na seqüência mostrada no fluxograma do ANEXO A. Qualquer erro de processamento o programa avisará o analista discriminando o erro abrindo uma janela de aviso. Quando o erro não é crítico, a janela de aviso pede uma ação correspondente. Se o erro for crítico, como falta de dados, dados incorretos, divisão por zero, etc., o programa se reinicializará automaticamente, avisando antes, ao analista do erro crítico ocorrido.

4.2. Implementação computacional - Segundo Bloco

O segundo bloco consiste na programação de algoritmo matemático para a obtenção dos coeficientes C_l^{mn} descrito no capítulo 3. A partir do cálculo destes coeficientes, é possível calcular a função distribuição de orientação (FDO) e a figura de pólos completa.

Os algoritmos gerados, neste segundo bloco, são baseados nos algoritmos implementados por Lima (1991) em sua tese de Doutorado. Estes algoritmos, na ocasião, foram escritos em FORTRAN para mainframe IBM-360 no qual foram testados e

verificados quanto a sua validade para análise. Posteriormente, o programa desenvolvido por Lima foi compilado para ambiente DOS (Disk Operation System – Microsoft) em computador compatível IBM-PC no qual, também, foi utilizado o compilador FORTRAN versão V. A transcrição entre compiladores FORTRAN-PASCAL foi de fácil execução, embora o compilador PASCAL seja estruturado de concepção e o FORTRAN não. O compilador PASCAL - Delphi 6, admite o uso de UNITS que são programas que consistem em sub-rotinas ('procedures') e funções ('functions') que, depois de escritas e testadas são de fácil utilização pelo programador, podendo ser usadas em vários pontos de execução do programa.

4.2.1. Geração dos coeficientes fundamentais - biblioteca

O cálculo dos coeficientes da expansão em série $C_l^{\mu\nu}$ requer a utilização de várias constantes indexadas e funções. Alguns destes cálculos podem ser facilitados se alguns coeficientes forem disponibilizados na forma de biblioteca, necessitando somente da leitura do arquivo atribuindo-os às variáveis inerentes. A geração desta biblioteca segue um procedimento lógico que se inicia nas funções harmônicas esféricas pelo cálculo dos polinômios associados com os polinômios de Jacobi e, por conseguinte, a determinação das constantes fundamentais (Bunge, 1974). Para simetria cúbica utiliza-se somente os termos pares dos polinômios, mas há necessidade de incluir os termos ímpares que são utilizados em algoritmos para se eliminar o problema do fenômeno de pólos fantasmas ('ghost phenomena') gerados pelo processamento matemático, a ser implementado.

Os dados numéricos dos coeficientes gerados em pré-processamento e disponibilizados na forma de biblioteca fazia sentido na época dos anos 80. Limitações devido a memória e velocidade do processador central (CPU) era um problema relevante, não esquecendo o custo de processamento devido ao alto tempo para execução do programa que na época eram os grandes MainFrames IBM e Digital. Os atuais computadores de mesa (*desktop*) e do tipo *notebook* ou *laptop* contém processadores de alto desempenho (muitas vezes com frequência de *clock* acima de 1 GHz) e uma quantidade de memória física (em centenas de MBytes) e virtual (em GBytes), trabalhando em um ambiente operacional gráfico de 16 ou 32 bytes de barramento de dados, sanando qualquer problema operacional tanto físico (memória) como de custo para processamento integral do programa de análise de textura.

Neste trabalho optou-se por gerar estas constantes e funções em tempo real não necessitando, assim, da biblioteca em forma de arquivos de leitura. Isto também trouxe uma maior flexibilidade para o programa, viabilizando o uso de outras simetrias do cristal e, também, em caso de necessidade, flexibilizar o passo dos ângulos de mapeamento dos picos de difração (ângulos α, β) para o do levantamento das figuras de pólos. Outro detalhe é que estes valores são calculados somente depois da carga dos arquivos das figuras de pólos, uma vez que estes arquivos contém toda informação necessária para o processamento como: passo do ângulo α , passo do ângulo β , índices hkl , ângulo θ e simetria microscópica da amostra.

A terminologia e notações dos termos calculados seguem de acordo com o artigo de Wagner (1977) e o livro de referência de H. J. Bunge (1982). Tanto assim, que estas terminologias são usadas, também, para as expressões analíticas, válidas para todo grau de ℓ , que é fixado para o cálculo de todas as constantes, polinômios e funções.

Características especiais do programa que gera a biblioteca:

- 1 – O cálculo numérico está baseado na determinação exata das constantes fundamentais $Q_\ell^{m,n}$ (Bunge, 1974), por isto, esta variável requer precisão dupla na compilação (variável *extended* em *object-pascal*);
- 2 – Todos os valores numéricos são gerados em computador; deste modo, não há valor pré-determinado de entrada, exceto alguns parâmetros que são organizados para gerar biblioteca alternativa e valores pré-definidos por definição (Bunge, 1974);
- 3 – De acordo com a escolha do usuário, as constantes numéricas e funções se adaptam à maioria das simetrias do cristal (microscópica): cúbica, hexagonal e trigonal; e simetria da amostra (macroscópica): ortorrômbica.

Fundamentos matemáticos para geração da biblioteca

Os fundamentos matemáticos exigidos neste programa são descritos neste item com a devida funcionalidade aplicada em cálculo numérico. Inicialmente calcula-se os polinômios $P_\ell^{mm}(\phi)$ associados com os polinômios de Jacobi; calcula-se as constantes fundamentais $Q_\ell^{m,n}$, que são definidas como $Q_\ell^{m,n}(\phi) = i^{m+n} P_\ell^{mm}(\phi)$ com polinômios $P_\ell^{mm}(\phi)$ adotando $\phi = \cos(\pi/2)$ que, definido desta maneira, as constantes tornam-se valores reais. A partir dos $Q_\ell^{m,n}$ calcula-se os coeficientes $a_\ell^{m,n,s}$ de uma série de Fourier que expressam $P_\ell^{mm}(\phi)$ para outros ϕ . A partir de $a_\ell^{m,n,s}$ calcula-se os $a_\ell^{\prime m,n,s}$ que separa os $a_\ell^{m,n,s}$

em reais e imaginários; calcula-se as funções associadas de Legendre $\bar{P}_l^m(\phi)$ com ϕ variável em função do passo de β usado na aquisição de dados. Para simetria cúbica calcula-se os coeficientes $\dot{B}_l^{m\mu}$ para posterior cálculo dos coeficientes $\dot{k}_l^\mu(h_i)$. Para outras simetrias, os coeficientes $\dot{k}_l^\mu(h_i)$ são calculados por determinadas condições inerentes ao grupo de simetria do cristal.

Na implementação, foi utilizado o compilador Object-Pascal (Delphi 6 Professional) gerando uma 'UNIT' com o nome BBLPASCAL.pas (ANEXO B). Os valores conseguidos foram comparados aos valores expressos no livro de referência do H.J. Bunge (1982) e artigo publicado por Wagner et al. (1982).

4.2.1.1. Cálculo dos ângulos entre orientações

Para o processamento do programa, faz-se necessário conhecer os ângulos entre o sistema de orientação da amostra (Figura 3.6) DL, DT e DN e a projeção dos planos em relação a sua normal na esfera de referência, quanto aos ângulos Φ e β em coordenadas esféricas, Figura 4.21.

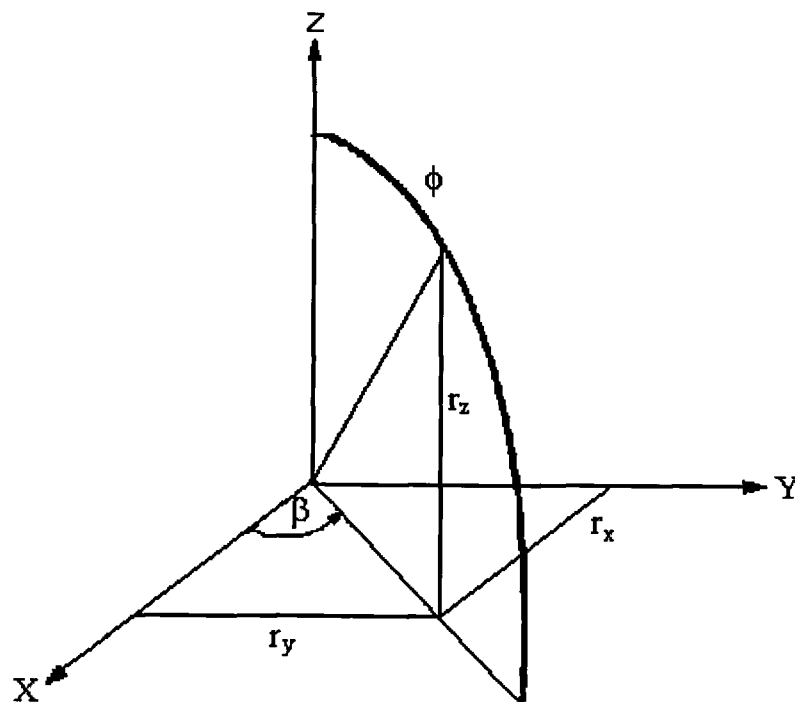


Figura 4.21 – Relações entre coordenadas polar esféricas Φ e β e coordenadas cartesianas (co-senos diretores) r_x, r_y, r_z (adaptado Bunge, 1982).

A relação entre os ângulos Φ e β em coordenadas esféricas e o sistema cartesiano r_x , r_y e r_z da Figura 4.21 são as seguintes:

$$\begin{aligned} r_x &= r \cdot \text{sen}\Phi \cos \beta \\ r_y &= r \cdot \text{sen}\Phi \sin \beta \\ r_z &= r \cdot \cos \Phi \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde r é o comprimento do vetor.

Das equações 4.6, obte-se:

$$\begin{aligned} \Phi &= \arccos \frac{r_z}{r} \\ \beta &= \arcsin \frac{r_y}{\sqrt{r^2 - r_z^2}} = \arccos \frac{r_x}{\sqrt{r^2 - r_z^2}} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Freqüentemente é usada a representação da orientação do cristal (microscópica), em materiais laminados com os índices de Miller na qual o plano do cristal escolhido é paralelo ao plano de orientação da amostra (equivalente a equação 3.3),

$$g = (hkl)[uvw] \quad (4.8)$$

onde: (hkl) é o plano do cristal na direção normal DN do sistema da amostra e $[uvw]$ é a direção de laminação DL do sistema da amostra.

Da equação 4.6 e equação 4.8 obte-se,

$$\begin{aligned} h &= n \cdot \text{sen}\Phi_{DN} \cos \beta_{DN} \\ k &= n \cdot \text{sen}\Phi_{DN} \sin \beta_{DN} \\ \ell &= n \cdot \cos \Phi_{DN} \end{aligned} \quad (4.9)$$

com $n = \sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}$ e

$$\begin{aligned} u &= n' \cdot \text{sen}\Phi_{DL} \cos \beta_{DL} \\ v &= n' \cdot \text{sen}\Phi_{DL} \sin \beta_{DL} \\ w &= n' \cdot \cos \Phi_{DL} \end{aligned} \quad (4.10)$$

com $n' = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$.

Usando-se as relações dos índices de Miller das direções de laminação e normal (DL e DN), para coordenadas polares da direção normal obtém-se:

$$\Phi_{DN} = \arccos \frac{\ell}{\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}} \quad (4.11)$$

$$\beta_{DN} = a \operatorname{sen} \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}} = a \cos \frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}} \quad (4.12)$$

para coordenadas polares da direção normal, e

$$\Phi_{DL} = a \cos \frac{w}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}} \quad (4.13)$$

$$\beta_{DL} = a \operatorname{sen} \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}} = a \cos \frac{u}{\sqrt{u^2 + v^2}} \quad (4.14)$$

para coordenadas polares na direção de laminação. As equações de 4.11 a 4.14 são relações utilizadas para o sistema cristalino cúbico utilizado para o cálculo dos coeficientes $k_{\ell}^{\mu}(h_i)$ descrito adiante. Para outros sistemas adaptam-se as equações de 4.11 a 4.14 de forma a se ter os ângulos Φ e β em base das equações 4.9 e 4.10 para a simetria microscópica utilizada. A relação entre os vértices da simetria microscópica deverá ser considerada, como no caso do sistema hexagonal, implementado no programa PAT, há a necessidade da relação c/a antes do processamento dos arquivos.

Para o cálculo dos ângulos Φ e β para outras simetrias microscópicas utiliza-se as seguintes equações (Krigbaum et al., 1964):

$$a \cos \beta = \frac{\ell}{c} \left[\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{\ell}{c} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (4.15)$$

$$a \cos \Phi = \frac{k}{a} \left[\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (4.16)$$

onde: a , b e c são os parâmetros de rede e h k ℓ índices de Miller em relação a simetria macroscópica com direção (001).

4.2.1.2. Cálculo dos polinômios $P_{\ell}^{mn}(x)$ associados com os polinômios de Jacobi:

Definição de $P_{\ell}^{mn}(x)$ (Gelfand et al., 1963):

$$P_{\ell}^{mn}(x) = \frac{(-1)^{\ell-m} \cdot i^{n-m}}{2^{\ell} (\ell-m)!} \left[\frac{(\ell-m)! (\ell+n)!}{(\ell+m)! (\ell-n)!} \right]^{1/2} \times \quad (4.17)$$

$$\times (1-x)^{\frac{-(n-m)}{2}} \cdot (1+x)^{\frac{-(n+m)}{2}} \frac{d^{\ell-n}}{dx^{\ell-n}} \left[(1-x)^{\ell-m} (1+x)^{\ell+m} \right]$$

para $P_\ell^{m\ell}(x)$ onde, $\ell = m = n$, tem-se:

$$\begin{aligned}
 P_\ell^{m\ell}(x) &= \frac{(-1)^{\ell-m} \cdot i^{n-m}}{2^\ell (\ell-m)!} \left[\frac{(\ell-m)! (\ell+n)!}{(\ell+m)! (\ell-n)!} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\quad \times (1-x)^{\frac{-(\ell-\ell)}{2}} \cdot (1+x)^{\frac{-(\ell+\ell)}{2}} \frac{d^{\ell-\ell}}{dx^{\ell-\ell}} \left[(1-x)^{\ell-\ell} (1+x)^{\ell+\ell} \right] \\
 \Rightarrow P_\ell^{\ell,\ell}(x) &= \frac{1}{2^\ell} \\
 \therefore P_\ell^{\ell,\ell}(x) &= P_\ell^{m,\ell}(x) = P_\ell^{n,\ell}(x) = \frac{1}{2^\ell}
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

O segundo termo possível de ser calculado analiticamente é $P_\ell^{m\ell}(x)$ de maneira que:

$$\begin{aligned}
 P_\ell^{m,\ell}(x) &= \frac{(-1)^{\ell-m} \cdot i^{\ell-m}}{2^\ell (\ell-m)!} \left[\frac{(\ell-m)! (\ell+\ell)!}{(\ell+m)! (\ell-\ell)!} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\quad \times (1-x)^{\frac{-(\ell-m)}{2}} \cdot (1+x)^{\frac{-(\ell+m)}{2}} \frac{d^{\ell-\ell}}{dx^{\ell-\ell}} \left[(1-x)^{\ell-m} (1+x)^{\ell+m} \right]
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

$$p/x=0 \Rightarrow P_\ell^{m,\ell}(0) = \frac{(-1)^{\ell-m} \cdot i^{\ell-m}}{2^\ell (\ell-m)!} \left[\frac{(\ell-m)! (2\ell)!}{(\ell+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{4.20}$$

Fazendo $n: = \ell-1$ tem-se $P_\ell^{m,\ell-1}(x)$, aplicando na definição, tem-se:

$$\begin{aligned}
 P_\ell^{m,\ell-1}(x) &= \frac{(-1)^{\ell-m} \cdot i^{(\ell-1)-m}}{2^\ell (\ell-m)!} \left[\frac{(\ell-m)! (\ell + (\ell-1))!}{(\ell+m)! (\ell - (\ell-1))!} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\quad \times (1-x)^{\frac{-((\ell-1)-m)}{2}} \cdot (1+x)^{\frac{-((\ell-1)+m)}{2}} \frac{d^{\ell-(\ell-1)}}{dx^{\ell-(\ell-1)}} \left[(1-x)^{\ell-m} (1+x)^{\ell+m} \right]
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

$$p/x=0 \Rightarrow P_\ell^{m,\ell-1}(0) = 2 \cdot m \cdot \frac{(-1)^{\ell-m} \cdot i^{(\ell-1)-m}}{2^\ell (\ell-m)!} \left[\frac{(\ell-m)! (2\ell-1)!}{(\ell+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{4.22}$$

para os polinômios $P_\ell^{0,n}(x)$, tem-se:

$$P_\ell^{0,n}(x) = \frac{\alpha_\ell^{n+1} P_\ell^{0,n-1}}{\alpha_\ell^n} \tag{4.23}$$

onde

$$\alpha_t^k = \sqrt{(\ell + k)(\ell - k + 1)} \quad (4.24)$$

Estudo do sinal do polinômio para $i^{(m-n)}$, para implementação de algoritmo.

i) caso para $(m-n)$ positivo:

$$\text{iniciais } (m-n) = \begin{cases} 0 \Rightarrow 1 \\ 1 \Rightarrow i \\ 2 \Rightarrow -1 \\ 3 \Rightarrow -i \\ 4 \Rightarrow 1 \\ 5 \Rightarrow i \\ \dots \end{cases}$$

a) para $m-n = \text{par} \Rightarrow \frac{m-n}{2} = \text{par} \Rightarrow i^{m-n} = 1;$

b) para $m-n = \text{par} \Rightarrow \frac{m-n}{2} = \text{impar} \Rightarrow i^{m-n} = -1;$

c) para $m-n = \text{impar} \Rightarrow \frac{m-n-1}{2} = \text{par} \Rightarrow i^{m-n} = i;$

d) para $m-n = \text{impar} \Rightarrow \frac{m-n-1}{2} = \text{impar} \Rightarrow i^{m-n} = -i.$

ii) caso para $(m-n)$ negativo, tem-se:

$$\text{iniciais } (m-n) = \begin{cases} 1 \Rightarrow -i \\ 2 \Rightarrow -1 \\ 3 \Rightarrow i \\ 4 \Rightarrow 1 \\ 5 \Rightarrow -i \\ \dots \end{cases}$$

onde:

a) para $m-n = \text{par} \Rightarrow \frac{m-n}{2} = \text{par} \Rightarrow 1;$

b) para $m-n = \text{par} \Rightarrow \frac{m-n}{2} = \text{impar} \Rightarrow -i;$

c) para $m-n = \text{impar} \Rightarrow \frac{m-n+1}{2} = \text{par} \Rightarrow 1;$

iii) para $(-1)^{\ell-m}$:

a) para $\ell-m = \text{par} \Rightarrow (-1)^{\ell-m} = 1;$

b) para $\ell - m = \text{ímpar} \Rightarrow (-1)^{\ell-m} = -1$.

Polinômios de $P_\ell^{mn}(\phi = 0)$ fixos:

1) por definição,

$$P_0^{0,0} = 1; \quad (4.25)$$

2) por definição,

$$P_1^{0,0} = 0; \quad (4.26)$$

3) $P_\ell^{0,0}$ é obtido pela seguinte relação de recorrência:

$$P_{\ell+1}^{0,0} = -\frac{\ell}{(\ell+1)} P_{\ell-1}^{0,0} \quad (4.27)$$

Utilizando as equações 4.25, 4.26 e 4.27 é possível calcular as duas primeiras colunas e linhas e as duas últimas linhas e colunas das matrizes de $P_\ell^{mn}(0)$. Utilizando as equações de recorrência para a coluna de mesmo índice ℓ , é possível obter todos os outros polinômios.

Primeiro, escrevendo $P_\ell^{m,n}$ em função da expressão de recorrência da linha (índice n), temos:

$$\alpha_\ell^{n+1} P_\ell^{m,n+1} - \alpha_\ell^n P_\ell^{m,n-1} = \left(\frac{2im}{\sin \phi} - \frac{2in \cos \phi}{\sin \phi} \right) P_\ell^{m,n} \quad (4.28)$$

$$\text{para } \phi = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \begin{cases} \sin \phi = 1 \\ \cos \phi = 0 \end{cases}$$

implicando, como resultado na expressão de recorrência:

$$\alpha_\ell^{n+1} P_\ell^{m,n+1} - \alpha_\ell^n P_\ell^{m,n-1} = 2im P_\ell^{m,n} \quad (4.29)$$

logo,

$$P_\ell^{m,n} = \frac{1}{2im} (\alpha_\ell^{n+1} P_\ell^{m,n+1} - \alpha_\ell^n P_\ell^{m,n-1}) \quad (4.30)$$

Pela fórmula da recorrência para a coluna (índice m), tem-se:

$$\alpha_\ell^{m+1} P_\ell^{m+1,n} - \alpha_\ell^m P_\ell^{m-1,n} = 2in P_\ell^{m,n} \quad (4.31)$$

Substituindo $P_\ell^{m,n}$ pela equação 4.17, obtém-se:

$$\alpha_\ell^{m+1} P_\ell^{m+1,n} - \alpha_\ell^m P_\ell^{m-1,n} = \frac{2in}{2im} (\alpha_\ell^{n+1} P_\ell^{m,n+1} - \alpha_\ell^n P_\ell^{m,n-1}) \quad (4.32)$$

re-arranjando e cortando, tem-se:

$$P_\ell^{m-1,n} = \frac{m\alpha_\ell^{m+1}P_\ell^{m+1,n} - n\alpha_\ell^{n+1}P_\ell^{m,n+1} + n\alpha_\ell^n P_\ell^{m,n-1}}{m\alpha_\ell^m} \quad (4.33)$$

com a equação 4.33 é possível determinar o resto dos polinômios $P_\ell^{m,n}(0)$.

Na implementação pode-se calcular os elementos de α_ℓ^m ou α_ℓ^{m+1} , que está definido na equação 4.24, em uma sub-rotina aumentando o desempenho. É importante salientar que o sinal dos polinômios dá-se pelas condições exigidas na matemática dos números complexos. Neste caso, também, foi implementada uma sub-rotina adequada para se determinar o sinal.

4.2.1.3. Cálculo das constantes fundamentais $Q_\ell^{m,n}$

A introdução dos coeficientes $Q_\ell^{m,n}$ têm por objetivo transformar os valores do $P_\ell^{m,n}$ imaginários em valores reais. Os $Q_\ell^{m,n}$ são definidos como:

$$Q_\ell^{m,n}(\cos \pi/2) = i^{m+n} P_\ell^{m,n}(\cos \pi/2) \quad (4.34)$$

- Estudos dos i^{m+n} , ao qual se aplica o algoritmo:

$$m+n = \begin{cases} \text{par} \Rightarrow \text{real} \\ \text{ímpar} \Rightarrow \text{imaginário} \cdot \text{puro} \end{cases}$$

$$\text{se} \cdot \text{ímpar} \begin{cases} (+) \Rightarrow iP_\ell^{m,n} \\ (-) \Rightarrow i^{-1} P_\ell^{m,n} = -iP_\ell^{m,n} \end{cases}$$

Da mesma forma que no caso aplicado aos $P_\ell^{m,n}(\phi)$, o sinal é tratado separadamente empregando-se a matemática dos números complexos.

4.2.1.4. Cálculo dos coeficientes de Fourier $a_\ell^{m,n,s}$:

Os polinômios de Jacobi, definidos por Bunge (Bunge, 1982), podem ser expresso na forma de uma série de Fourier:

$$P_\ell^{m,n}(\phi) = \sum_{s=-\ell}^{\ell} a_\ell^{m,n,s} e^{is\phi} \quad (4.35)$$

Uma vez que os coeficientes são independentes dos ângulos ϕ , os coeficientes $a_\ell^{m,n,s}$ podem ser definidos como:

$$a_\ell^{m,n,s} = i^{m+n+2} P_\ell^{m,s}(\phi = \pi/2) \cdot P_\ell^{n,s}(\phi = \pi/2) \quad (4.36)$$

Utilizando os coeficientes $Q_\ell^{m,n}$, tem-se:

$$a_\ell^{m,n,s} = Q_\ell^{m,s} Q_\ell^{n,s} \quad (4.37)$$

esta equação pode ser utilizada no lugar da equação 4.34, uma vez que $Q_\ell^{m,n}$ já estão calculados.

4.2.1.5. Cálculo dos coeficientes $a_\ell^{m,n,s}$:

Os polinômios são reais ou puramente imaginários dependendo do resultado de $m+n$. Pode-se separar a equação 4.35 em:

a) para $m+n$ par

$$P_\ell^{m,n}(\phi) = a_\ell^{m,n,0} + 2 \sum_{s=1}^{\ell} a_\ell^{m,n,s} \cos(s\phi) \quad (4.38)$$

b) para $m+n$ ímpar

$$P_\ell^{m,n}(\phi) = 2i \sum_{s=1}^{\ell} a_\ell^{m,n,s} \sin(s\phi) \quad (4.39)$$

Definindo:

$$\left. \begin{array}{l} a_\ell^{m,n,s} = 0 \\ a_\ell^{m,n,s} = 2a_\ell^{m,n,s} \end{array} \right\} m+n = \text{par} \quad (4.40)$$

e

$$\left. \begin{array}{l} a_\ell^{m,n,s} = 0 \\ a_\ell^{m,n,s} = 2ia_\ell^{m,n,s} \end{array} \right\} m+n = \text{ímpar} \quad (4.41)$$

Logo,

$$m+n = \text{par} \Rightarrow P_\ell^{m,n}(\phi) = \sum_{s=0}^{\ell} a_\ell^{m,n,s} \cos(s\phi) \quad (4.42)$$

e

$$m+n = \text{ímpar} \Rightarrow P_\ell^{m,n}(\phi) = \sum_{s=1}^{\ell} a_\ell^{m,n,s} \sin(s\phi) \quad (4.43)$$

4.2.1.6. Cálculo das funções associadas de Legendre:

Da mesma maneira que os polinômios, as funções associadas de Legendre podem ser expressas como uma série de Fourier:

$$\bar{P}_\ell^m(\phi) = \sum_{s=-\ell}^{\ell} a_\ell^{m,s} e^{is\phi} \quad (4.44)$$

com os coeficientes $a_\ell^{m,n,s}$ definidos como:

$$a_\ell^{m,0,s} = i^{-m} \sqrt{\frac{2}{2\ell+1}} a_\ell^{m,s} \Rightarrow a_\ell^{m,s} = \frac{1}{i^{-m}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} a_\ell^{m,0,s} \Rightarrow a_\ell^{m,s} = i^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} a_\ell^{m,0,s} \quad (4.45)$$

Das relações de comutação dos índices implica que $a_\ell^{m,n,s} = 0 \Rightarrow \ell + s = \text{ímpar}$, portanto, isto requer que a somatória seja feita somente sobre os pares ou somente sobre os ímpares.

Analogamente às definições dadas pelas equações 4.44 e 4.45:

$$\left. \begin{array}{l} a_\ell^{m,0} = a_\ell^{m,0} \\ a_\ell^{m,s} = 2a_\ell^{m,s} \end{array} \right\} m = \text{par} \quad (4.46)$$

e

$$\left. \begin{array}{l} a_\ell^{m,0} = 0 \\ a_\ell^{m,s} = 2ia_\ell^{m,s} \end{array} \right\} m = \text{ímpar} \quad (4.47)$$

Conseqüentemente tem-se:

$$\bar{P}_\ell^m(\phi) = \sum_{s=0}^{\ell} a_\ell^{m,s} \cos(s\phi) \rightarrow m = \text{par} \quad (4.48)$$

e

$$\bar{P}_\ell^m(\phi) = \sum_{s=1}^{\ell} a_\ell^{m,s} \sin(s\phi) \rightarrow m = \text{ímpar} \quad (4.49)$$

4.2.1.7. Cálculo dos coeficientes $B_\ell^{m,\mu}$

Os coeficientes $B_\ell^{m,\mu}$ são necessários para construir as funções harmônicas esféricas simples ou generalizadas para a simétrica cúbica microscópica. Estas funções simetrizadas podem ser determinadas pela aplicação de operadores matemáticos, os quais são chamados de operadores de projeção ou co-seno diretor, para a função ordinária (Wagner 1982). No caso da simetria cúbica, mais complexa, o uso do co-seno diretor leva a um conjunto de funções a partir das quais pode-se extrair um conjunto de funções ortogonais normalizadas as quais são simetrizadas (o algoritmo implementado é iterativo).

Com o cálculo dos $B_\ell^{m,\mu}$ pode-se assim calcular as funções harmônicas esféricas generalizadas $T_\ell^{m,\mu}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$.

4.2.1.8. Cálculo de $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ para simetria cúbica

As harmônicas esféricas simetrizadas para a simetria cúbica, $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$, onde h_i é relativo ao plano, são definidas como:

$$\dot{k}_\ell^\mu(h_i) = \sum_{\substack{m=0 \\ \Delta m=4}}^{\ell} \dot{B}_\ell^{m,\mu} P_\ell^{m,\mu}(\Phi_i) \cos\left(m\beta_i - \delta \frac{\pi}{2}\right) \quad (4.50)$$

onde: $\delta = \begin{cases} 0 \Rightarrow \ell = \text{par} \\ 1 \Rightarrow \ell = \text{impar} \end{cases}$

Os valores de Φ_i e β_i são os ângulos conseguidos pelas equações 4.13 e 4.14.

4.2.1.9. Cálculo de $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ para outras simetrias

A aplicação do co-seno diretor para se determinar $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ leva a expressões analíticas a serem mais simples que na simetria cúbica. Pode-se calcular os termos das harmônicas esféricas simetrizadas para o sub-grupo holoédrico (que tem todas as faces exigidas para a simetria completa) para todo sistema cristalino (exceto para triclínica). Somente simetrias com rotação serão levadas em conta na simetria da função textura (Bunge et al., 1980; Esling, 1981). Desta maneira temos que as funções $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ são exatamente as mesmas quando, por exemplo, o grupo de ponto de simetria de dois materiais são 3-m e 32. No programa, o cálculo é realizado para os seguintes grupos de simetria: $6 / mmm, \bar{6}22, \bar{3}m, 32, 4 / mmm, 422, mmm, 222, 2 / m, 2$. Para estes cálculos, o sistema de coordenadas do cristal (x,y,z) em cartesianas, é assumido ser fixo no cristal de maneira que y coincide com o duplo eixo e z com o eixo de maior ordem J entre os eixos remanescente. Esta condição leva a um conjunto não usual de sistema de coordenadas no caso da simetria monoclínica na qual y coincide com o eixo duplo e z com um eixo de ordem (J - 1).

Para estas condições as harmônicas simetrizadas $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ são dadas por:

$$\dot{k}_\ell^\mu(h_i) = \dot{k}_\ell^\mu(\Phi_i, \beta_i) = \varepsilon(\pi)^{1/2} (-1)^{m'} \bar{P}_\ell^{m'}(\Phi_i) \cos\left(m' \beta_i - \delta \frac{\pi}{2}\right) \quad (4.51)$$

com: $\delta = 0$ para $\ell = \text{ímpar}$ e, $\delta = 1$ para $\ell = \text{par}$, $m' = J(\mu + 1)$, onde J é a ordem de simetria do eixo z (isto é: 6,4,3,2, ou 1) e $0 \leq m' \leq \ell$.

Estas funções são calculadas para:

$$\varepsilon \begin{cases} = (2)^{-1/2} se \cdot \mu = 1; \\ = 1 \cdot se \cdot \mu \neq 1. \end{cases} \quad (4.52)$$

Os valores de Φ_i e β_i são os ângulos calculados pelas equações 4.15 e 4.16 na sua variação para o sistema cristalino requisitado.

A existência de eixos duplos paralelos a y implica que uma função $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ é definida como a soma de duas harmônicas ordinárias $\dot{k}_\ell^{m'}(h_i)$, com valores de m' opostos, assim levando ao fator co-seno na equação 4.51. Além disso, o eixo de multiplicidade J paralelo a z introduz uma regra de seleção: m' é múltiplo de J .

Quando não há eixo duplo paralelo a y , como é o caso para grupos de simetria pontual: $6mm, \bar{6}, 6, 3m, \bar{3}, 3, 4mm, 4/m, \bar{4}, 4, m$ a função simetrizada $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ aparece como uma harmônica $\dot{k}_\ell^{m'}(h_i)$ particular a qual satisfaz, para este índice m' , a regra de seleção imposta pelo eixo de simetria paralelo a z . Nestes casos, na sub-rotina do programa desta funções $\dot{k}_\ell^\mu(h_i)$ são calculadas trocando a equação (4.50) por :

$$\dot{k}_\ell^\mu(h_i) = \dot{k}_\ell^\mu(\Phi_i, \beta_i) = \dot{k}_\ell^{m'}(\Phi_i, \beta_i) (2\pi)^{1/2} \bar{P}_\ell^{m'}(\Phi_i) \cdot e^{(im'\beta_i)} \quad (4.53)$$

com, $m' = J(\mu + 1)$ mas agora com $-\ell \leq m' \leq \ell$. O grupo pontual $\bar{6}m2 \cdot e \cdot \bar{4}2m$ tem o mesmo sub-grupo rotacional como 32 e 222, respectivamente.

4.2.2. Rotinas de cálculo dos coeficiente $C_\ell^{\mu\nu}$

Para o cálculo dos coeficiente $C_\ell^{\mu\nu}$ foram implementadas rotinas seguindo o procedimento de cálculo desenvolvido por Bunge (1982) utilizando dados experimentais de figura de pólos incompleta obtidos somente por reflexão. Utilizando a equação 3.51 e separando os termos importantes, a rotina de cálculo segue o fluxo de dados a seguir:

- Normalização dos dados (equação 3.42);
- Cálculo da integral de todo espaço de todas as figuras de pólos ao quadrado;
- Cálculo dos termos $a_\ell^{\mu\nu}(h_i)$ (equação 3.45);
- Cálculo dos termos $\zeta_{\ell\ell'}^{\nu\nu'}$ (equação 3.55);

- e) Cálculo dos termos $\alpha_{\ell\ell}^{\mu\mu'}$ (equação 3.48);
- f) Montagem do sistema linear de equações (equação 3.51);
- g) Cálculo dos termos $C_{\ell}^{\mu\nu}$.

O método gera um sistema linear de 124 incógnitas com 124 equações, sabendo que $C_0^{\ell\ell} = 1$, é possível calcular os coeficientes aplicando um algoritmo de inversão de matriz.

4.2.3. Cálculo da função distribuição de orientações

O cálculo da FDO em função dos ângulos de Euler $f(g) = f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ é feita no sistema de coordenadas da amostra. Como descrito anteriormente, no caso de chapas laminadas (sistema macroscópico ortorrômbico) os eixos cristalinos (100), (010) e (001) coincidem com as direções de laminação, transversal e normal respectivamente, quando φ_1 , Φ e φ_2 são iguais a zero.

A $f(g)$ pode ser expandida em série,

$$f(g) = \sum_{\ell=0}^{\ell} \cdot \sum_{\mu=-\ell}^{\ell} \cdot \sum_{\nu=-\ell}^{\ell} C_{\ell}^{\mu\nu} \ddot{T}_{\ell}^{\mu\nu} \quad (4.54)$$

onde,

$$\ddot{T}_{\ell}^{\mu\nu} = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \cdot \sum_{n=-\ell}^{\ell} A_{\ell}^{\mu m} A_{\ell}^{n\nu} T_{\ell}^{mn}(g) \quad (4.55)$$

com $T_{\ell}^{mn} = e^{im\varphi_2} P_{\ell}^{mn}(\cos \Phi) e^{in\varphi_1}$, os termos $A_{\ell}^{\mu m}$ e $A_{\ell}^{n\nu}$ são determinados de forma a reproduzir a $f(g)$ da simetria da amostra e da simetria cristalina. A equação 4.55 é a função harmônica esférica generalizada. No caso de simetria não cúbica os coeficientes $A_{\ell}^{n\nu}$ são de fácil determinação. A equação 4.53 pode ser expandida em:

$$\begin{aligned} \ddot{T}_{\ell}^{\mu\nu} = \varepsilon_n \sqrt{2\pi} \sum_{m=0}^{\ell/4} B_{\ell}^{m\mu} \cdot \left[\sum_{s=0,2,\dots}^{\ell} a_{\ell}^{\prime mns} \cos(s\Phi) \cos(m\varphi_2) \cos(n\varphi_1) - \right. \\ \left. - \sum_{s=1,3,\dots}^{\ell} a_{\ell}^{\prime mns} \cos(s\Phi) \cos(m\varphi_2) \cos(n\varphi_1) \right] \quad (4.56) \end{aligned}$$

com

$$\varepsilon_n = \begin{cases} 1, & \text{para } m = 0 \\ 1/2, & \text{para } m \neq 0 \end{cases} \quad (4.57)$$

Os valores de $f(g)$ são calculados em passos espaçados de 5°. O gráfico da FDO então obedecerá este espaçamento angular em seções de φ_1 ou de φ_2 . Em implementação

futura, o passo das seções poderá ser escolhido pelo analista, sendo por vezes necessário, para uma melhor precisão seções diferentes da usual de 5°.

4.2.4. Função Distribuição de Orientações – Visualização gráfica

No programa PAT, após a adequação dos dados descrito na secção 4.1.2.5, o botão ‘*ODF Process*’ ficará ativo, ao se acionar este botão (Figura 4.22) desencadeia-se vários processos de chamadas de sub-rotinas: cálculo primeiro dos termos de biblioteca, o cálculo dos coeficientes $C_i^{\mu\nu}$ e o cálculo da função distribuição de orientações – FDO.

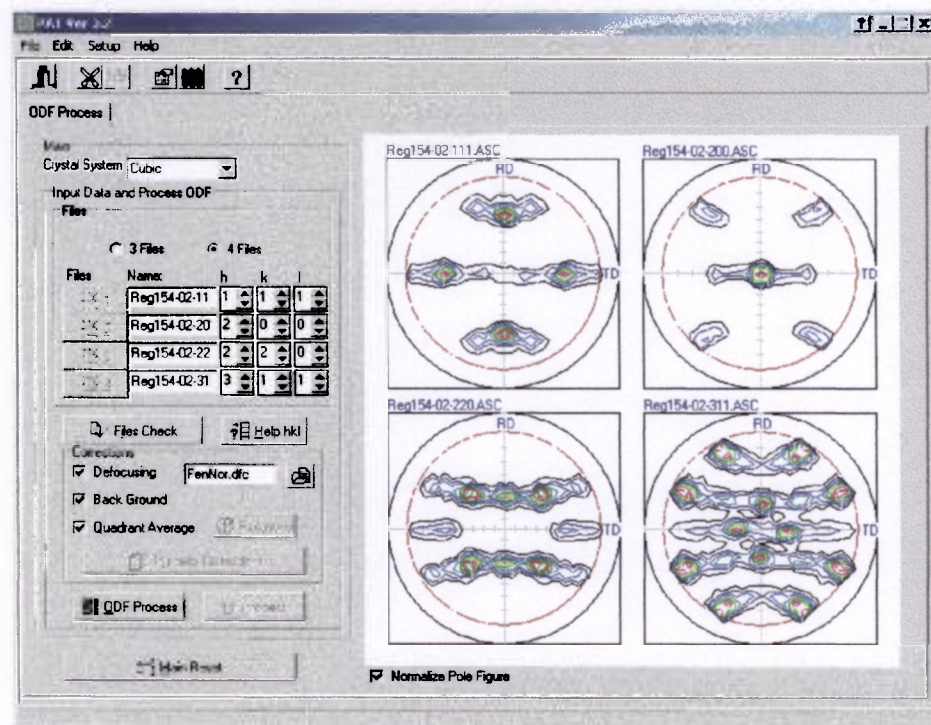


Figura 4.22 - O botão ‘*ODF Process*’ fica ativo após o processamento das correções.

Ao término do processamento, o programa avisará com uma mensagem. Ao mesmo tempo aparecerão novas abas, ‘*ODF Map*’ e ‘*Fiber Plot*’, Figura 4.23.

A aba ‘*ODF Map*’ ao ser acionada, mudará a tela de modo a mostrar o gráfico da FDO para visualização e interpretação pelo analista, Figura 4.24. Por motivo de melhor visualização o gráfico está desenhado em tamanho um pouco maior que o espaço reservado para isto. Para sanar este problema, barras de deslizamento vertical e horizontal ajudam na visualização geral do gráfico.

Na tela do gráfico da FDO, à esquerda, existem alguns comandos e informações do gráfico da FDO. Na caixa 'Lines Contour', acionando-se as setas da caixa de texto, aumentará ou diminuirá o número de linhas de contornos para o detalhamento do gráfico da FDO, Figura 4.23. Normalmente, como padrão o número inicial é de 7 linhas de contornos. Os valores correspondentes a cada linha formam a legenda do gráfico localizado à direita da última secção, vide Figura 4.25.

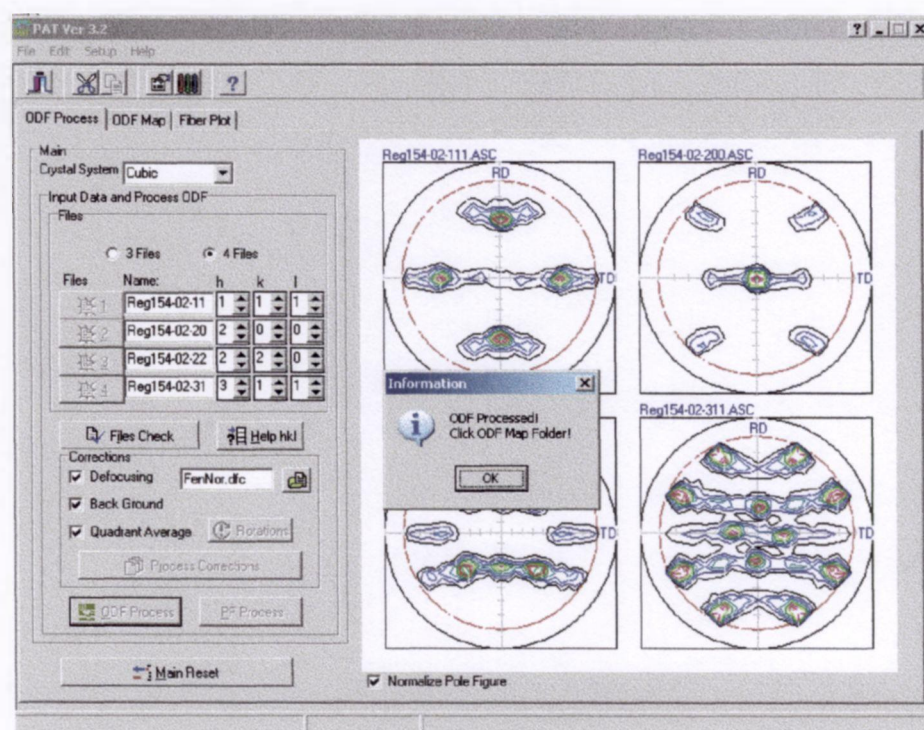


Figura 4.23 – Tela do programa após o processamento da FDO. O programa emite um aviso ao analista após o termino, ao mesmo tempo novas abas aparecerão, 'ODF Map' e 'Fiber Plot'.

Na caixa 'Constant Angle', escolhe-se qual dos ângulos φ_1 e φ_2 será constante nas secções do gráfico. No caso da FDO da Figura 4.26 o ângulo constante da secção é o φ_2 indicado logo acima das secções individuais do gráfico. A Figura 4.27 mostra o gráfico para secções de φ_1 constante para a mesma FDO da Figura 4.26.

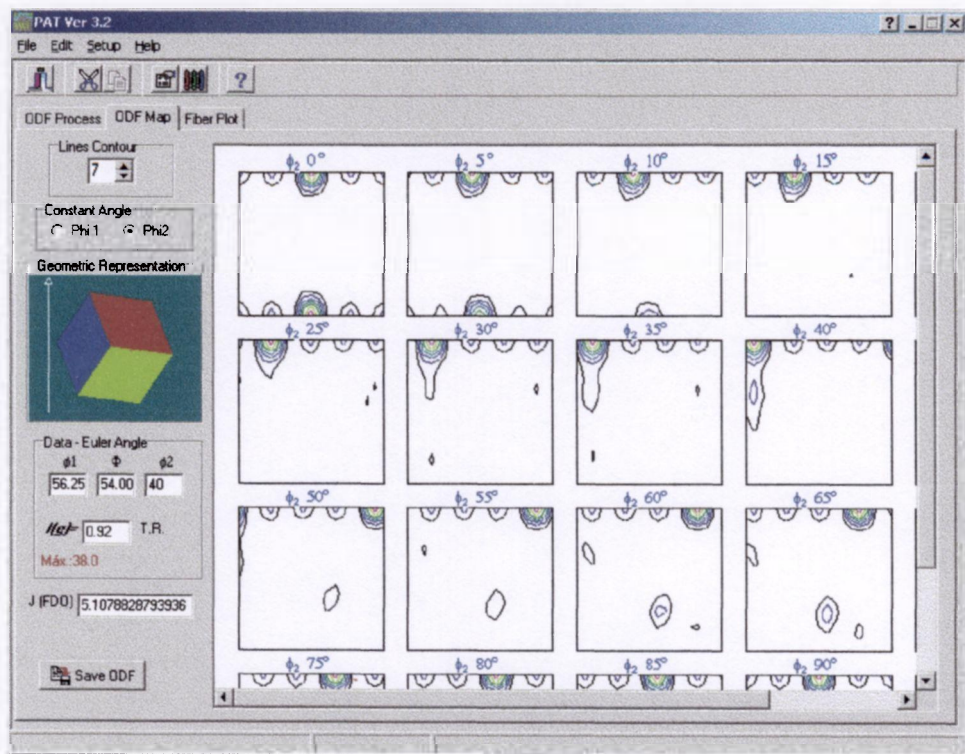


Figura 4.24 – Tela do gráfico da FDO.

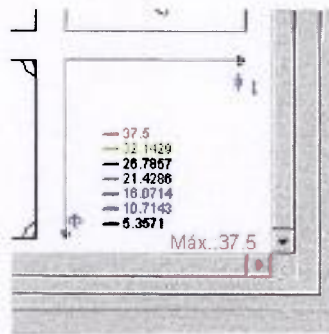


Figura 4.25 – A legenda da FDO informa o valor da intensidade em “*times random*” de cada linha, assim como, os eixos dos ângulos variáveis e a intensidade máxima.

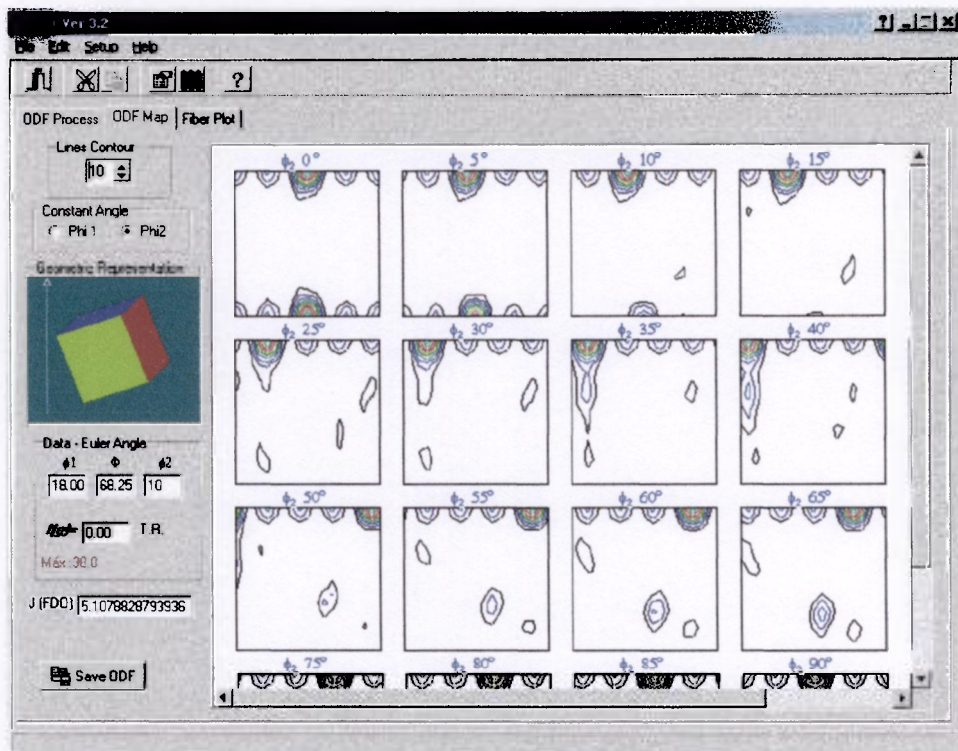


Figura 4.26 – FDO após o aumento do número de linhas do gráfico de contorno, aumentando o detalhamento.



Figura 4.27 – FDO com seções de ϕ_1 constantes.

A caixa 'Geometric Representation' mostra a orientação do cristal em relação à direção de laminação DL da amostra, indicada pela flecha branca, quando da passagem do cursor do mouse sobre as secções da FDO. A Figura 4.28 indica a posição do cristal na secção $\varphi_2 - 0^\circ$, na posição indicado pela seta vermelha.

A caixa 'Data - Euler Angle', mostra os valores de φ_1 , Φ e φ_2 referente a posição do cursor do mouse. Na Figura 4.29 pode-se visualizar os valores dos ângulos de Euler respectivos da posição indicada pela flecha vermelha. A caixa de texto abaixo da indicação dos ângulos mostra o valor da $f(g)$, em *times random* ou T.R. (vezes o aleatório), respectivo a estes ângulos e, logo abaixo, um texto em vermelho indicando o valor máximo da $f(g)$ do gráfico.

O valor numérico que aparece na caixa de texto com o nome ' $J (FDO)$ ' indica o valor do J de textura calculado pela equação 3.62.

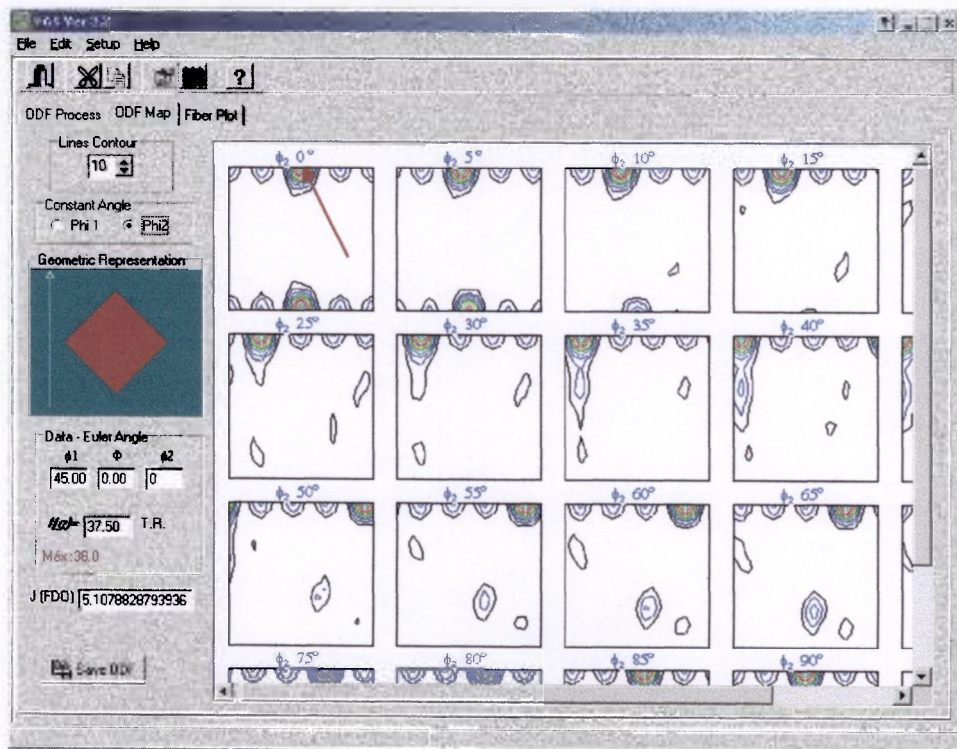


Figura 4.28 – Indicado pela seta vermelha, a posição do cursor do mouse sobre a secção $\varphi_2 - 0^\circ$ e a respectiva posição do cristal em relação à direção de laminação DL. O exemplo indica a orientação chamada de cubo rodado.

O botão 'Save ODF', ao ser acionado, abre uma janela de diálogo para que se grave em arquivo a FDO na forma de gráfico para aplicação em texto digital. O arquivo pode ser gravado em formatação JPEG (*Join Photographic Experts Group*) ou BMP (*BitMap*

Image), Figura 4.29. O gráfico gravado é de visualização total, incluindo informações relativas às curvas de nível quanto ao seu valor da $f(g)$ em relação as cores respectivas e, também, a orientação dos ângulos variáveis quanto ao seu crescimento. Há, também, no gráfico a indicação do valor máximo da $f(g)$ escrito em vermelho.

Da mesma forma que nas figuras de pólos dos arquivos de dados experimentais pode-se, através do acionamento do botão direito do mouse com o cursor dentro de uma secção, acionar a visualização gráfica em terceira dimensão da FDO. Uma janela aparecerá logo acima da janela principal do programa, como mostra a Figura 4.30. O analista poderá executar algumas operações para melhorar a visualização do gráfico, como: rodar, expandir, controlar a transparência, imprimir, copiar em 'clipboard' para introduzir em texto digital, controlar as cores, etc. Para isto é só acionar o botão respectivo na barra de controle logo acima da figura. Ao lado da caixa de exibição do gráfico em 3D é mostrada qual secção que foi desenhada em 'Section FDO Angle: xx degree'. No caso do exemplo da Figura 4.30 a secção zero (0) foi desenhada. Uma barra de controle de transparência, 'transparency, xx%', abaixo do gráfico ajuda o analista a visualizar possíveis concavidades não visíveis dependendo do ângulo de observação.

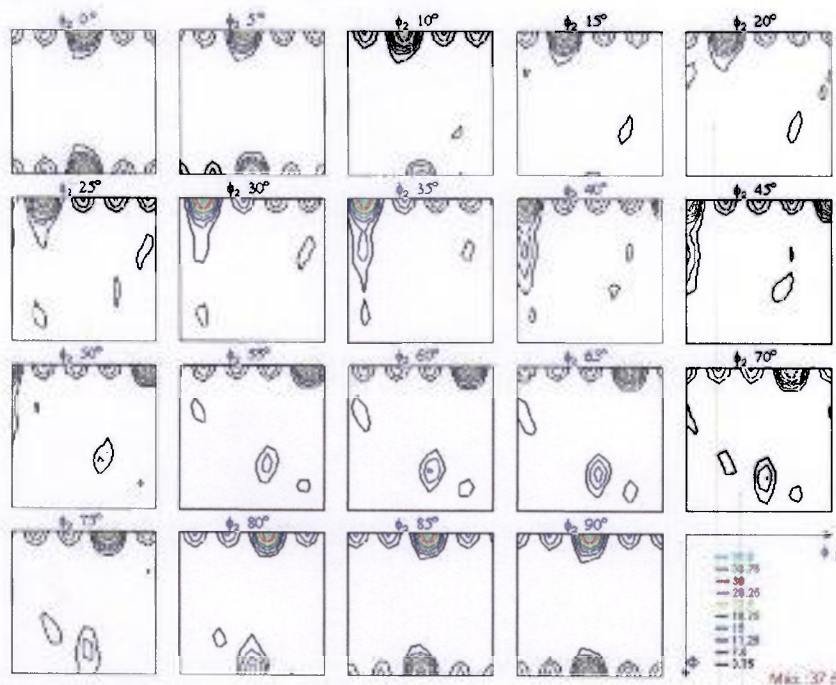


Figura 4.29 – Visualização do gráfico gravado e inserido no texto. No gráfico há indicações das intensidades relativas às curvas de nível, orientação dos ângulos variáveis e $f(g)$ máxima (em vermelho).

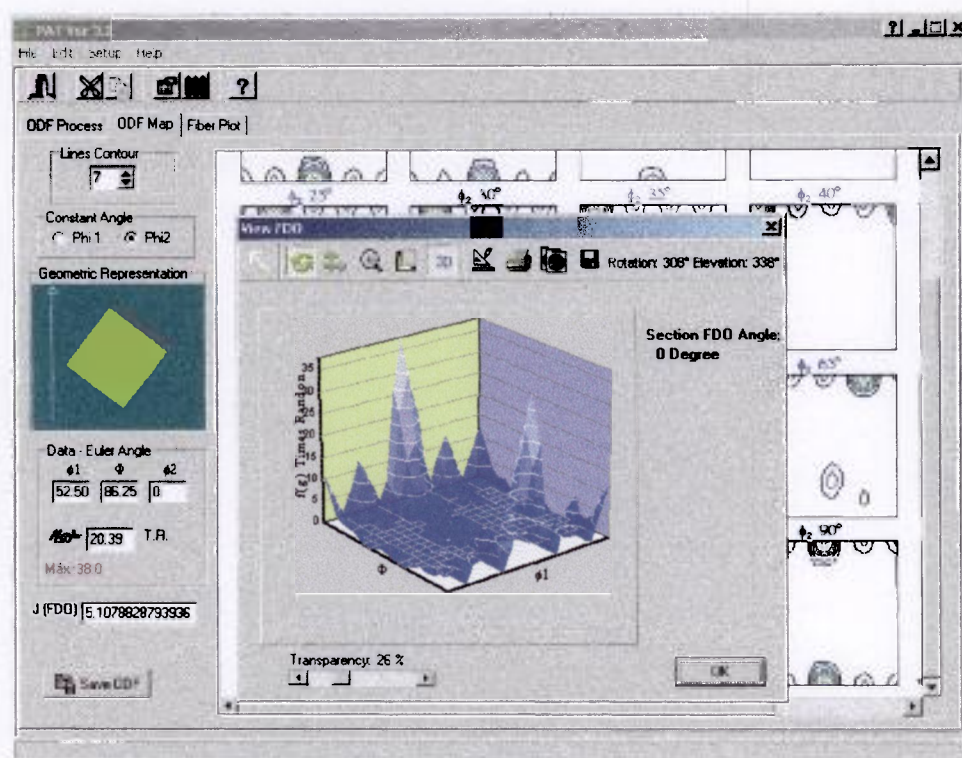


Figura 4.30 – Exemplo da representação gráfica em terceira dimensão da FDO.

4.2.5. Levantamento de fibras de textura.

Fibra de textura é assim chamada o comportamento da $f(g)$ em determinadas orientações em segmentos angulares para os ângulos de *Euler* na FDO.

Para se levantar uma fibra de textura, mantêm-se dois ângulos de *Euler* constante e faz-se variar o outro em uma faixa determinada pelo analista conseguindo-se assim, um gráfico da intensidade de textura em *Times Random* (vezes o aleatório) da $f(g)$ ao longo do ângulo variável. No programa PAT para se levantar as fibras de textura, processa-se primeiro a FDO, conforme descrito na secção 4.2.4. Uma aba aparece com o título '*Fiber plot*'. Ao acionar-se esta aba com o cursor do mouse aparecerá a tela mostrada na Figura 4.31.

As fibras mais usadas têm nomes de letras gregas. Para ajudar o analista, uma lista das fibras mais comuns pode ser verificada acionando-se o botão '*Fiber table support*' que abrirá uma janela informando as fibras em forma de tabela, Figura 4.32.



Figura 4.31 – Tela para levantamento do gráfico da fibra de textura.

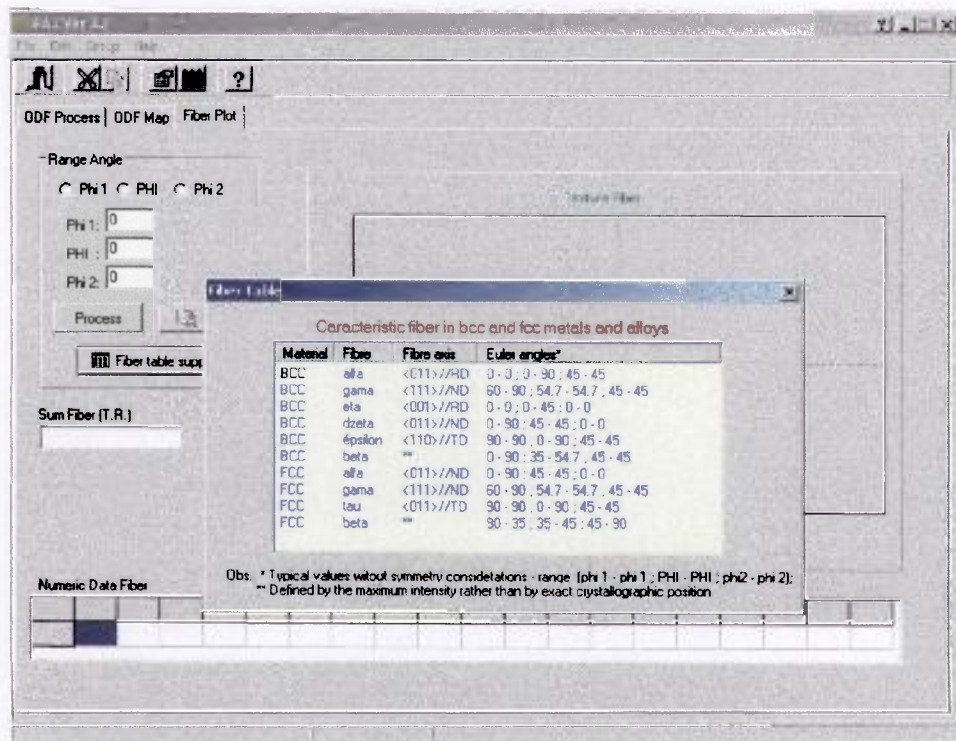


Figura 4.32 – Tabela de fibras mais empregadas.

Para se levantar a fibra, por exemplo, a Figura 4.33 contém uma FDO de um aço processado (laminado). Na secção de $\varphi_2 = 45^\circ$ existe uma fibra comumente chamada de gama, para a faixa angular de 60° a 90° para φ_1 e Φ constante em 54.7° . Para levantar esta fibra, o analista escolhe corretamente o ângulo variável, no caso φ_1 , digitando os valores correspondentes e aciona o botão 'Process'.

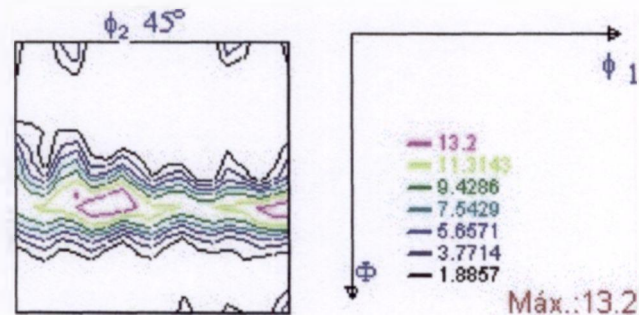


Figura 4.33 – FDO de aço laminado.

O programa foi desenvolvido para trabalhar com valores inteiros para os ângulos de *Euler*, logo para $\Phi = 54.7^\circ$, digita-se o ângulo inteiro mais próximo 55° . Também, como exemplo, digitou-se toda a faixa angular para φ_1 , 0° a 90° em lugar de 60° a 90° . O resultado aparecerá na área do gráfico, Figura 4.34. Verifica-se a simetria tipo espelho da fibra gama para o ângulo de 0° à 30° , de 30° à 60° e 60° à 90° . Abaixo do gráfico, visualiza-se uma grade de dados numéricos da fibra processada, contendo o valor angular e a intensidade, em *times random*, respectivas. Há, também, na tela uma caixa de texto com o nome de 'Sum fiber (TR)' que, ao se levantar a fibra aparecerá um valor referente a soma de todos os valores. Este valor pode ser um comparativo de análise do material com outros do mesmo processo.

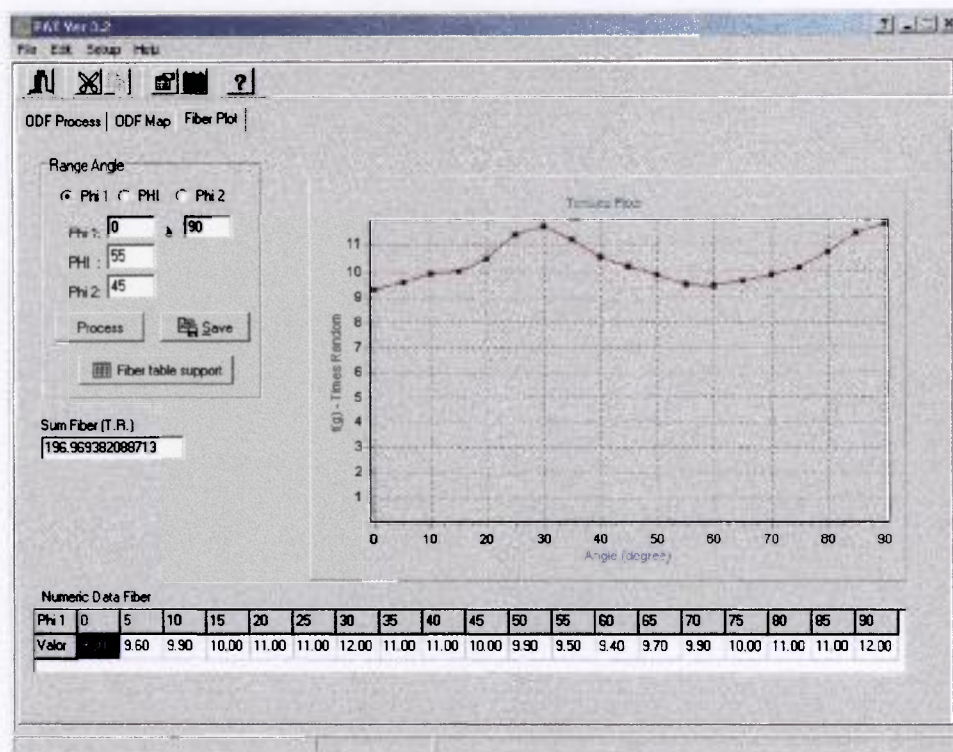


Figura 4.34 – Exemplo do levantamento de fibra de textura.

Através do botão ‘Save’ os dados numéricos são gravados em arquivo de forma que se possa utilizá-los em outros programas gráficos quando é interessante realizar a comparação das mesmas fibras para diversas amostras.

4.3. Implementações gráficas –Terceiro bloco.

Este bloco foi desenvolvido junto com os demais blocos descritos devido a sua importância na visualização gráfica, principalmente da FDO em suas isolinhas e nas Figuras de pólos dos dados de entrada. A rotina utilizada é um método de triangulação por meio da diferencial da função indicando a variação da intensidade a varredura de pontos adjacentes. É uma rotina complexa dependendo da precisão da variáveis do compilador. A rotina automaticamente desenha o gráfico utilizando as rotinas de desenho *canvas* do Delphi. As cores são pré-definidas, podendo ser modificadas pelo analista. Veja secção 4.4. O número de isolinhas é uma variável de fácil modificação como explicado anteriormente, veja secção 4.2.4.

4.4. Miscelânea

O programa contém determinados controles para que o analista personalize algumas das visualizações. Para isto, ao acionar o mouse com o cursor acima de ‘setup’

aparecerá sub-itens: '*line color*', '*filter*' e '*path environment*'. Ao clicar sobre '*line color*' aparecerá um menu para se modificar as cores das linhas de isolinhas, Figura 4.35. Esta tela pode, também, ser chamada acionando o quinto botão (da esquerda para direita) da barra de comandos.

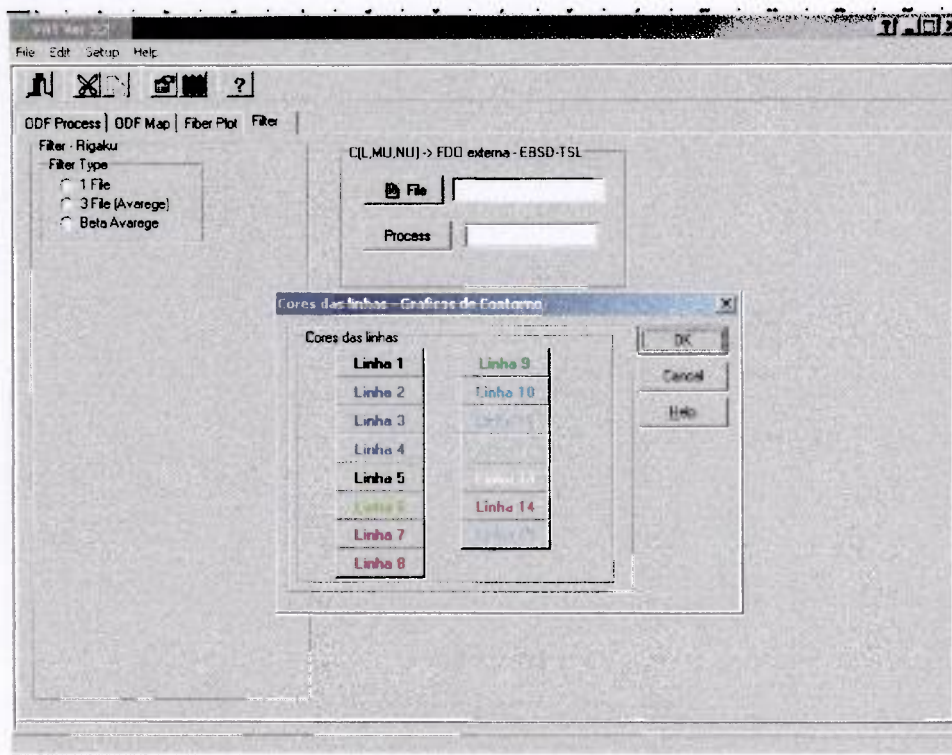


Figura 4.35 – Janela de modificação das cores do gráfico das isolinhas.

Clicando em '*filter*' aparecerá sub-itens: '*on-off*'. Clicando em '*on*', aparecerá uma aba na janela principal com o nome '*filter*', Figura 4.36. A tela '*filter*' pode, também, ser chamada acionando o quarto botão (da esquerda para direita) na barra de comando. Nesta tela a caixa com o nome '*Filter - Rigaku*' é utilizado para converter arquivos UNIX para WINDOS e vice-versa, para fazer a média de três arquivos de uma mesma amostra (útil para melhorar a estatística de dados de uma amostra) e beta médio (útil para levantar perfil de figuras de pólos que contém fibra axial, como eixo de magnetização). O funcionamento destes filtros segue uma lógica ao qual o programa pergunta ao analista o que deve ser feito. As outras telas, são de tratamento estatístico e comparação com outro método de medida (EBSD).

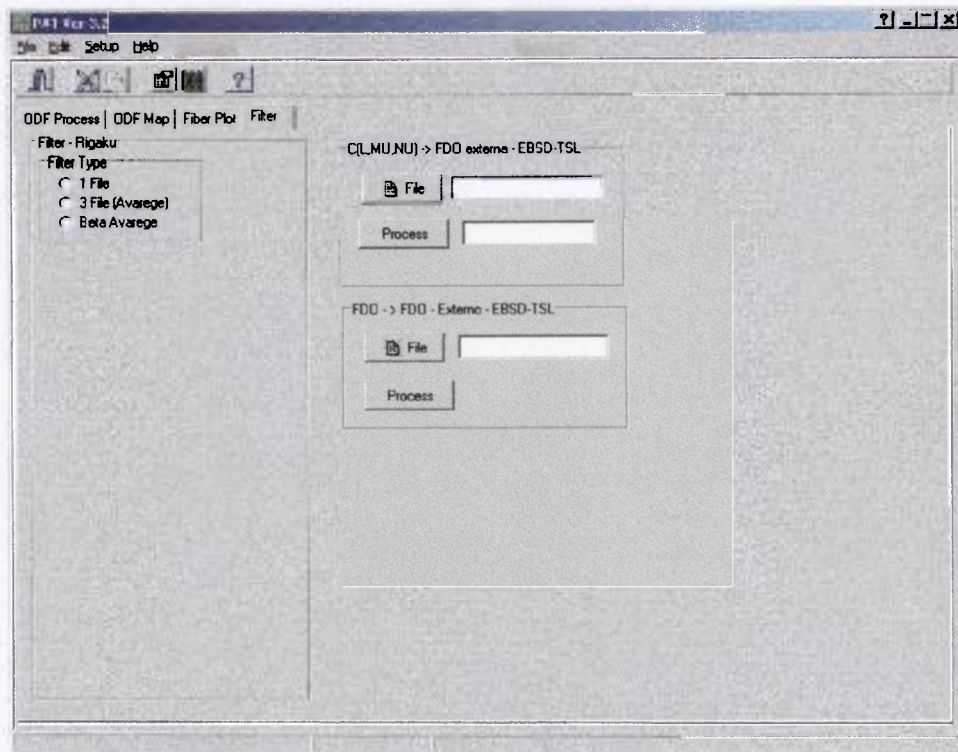


Figura 4.36 – Tela ‘Filter’.

Ao se acionar o mouse sobre ‘*path environment*’ aparecerá uma tela para que o operador possa modificar os sub-diretórios que contém todo o sistema do programa, Figura 4.37.

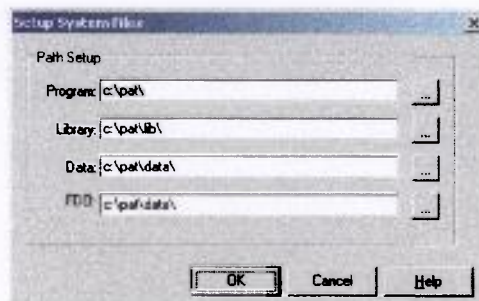


Figura 4.37 – Janela de modificação dos sub-diretórios do sistema do programa PAT.

No programa PAT está incorporado uma ajuda ao analista, que está em português, e pode ser chamado ao se acionar o mouse em ‘*help*’ ou no botão de interrogação ‘?’ da barra de comando, Figura 4.38. Toda a descrição do funcionamento do programa como informações de textura está disponível ao analista de forma concisa.

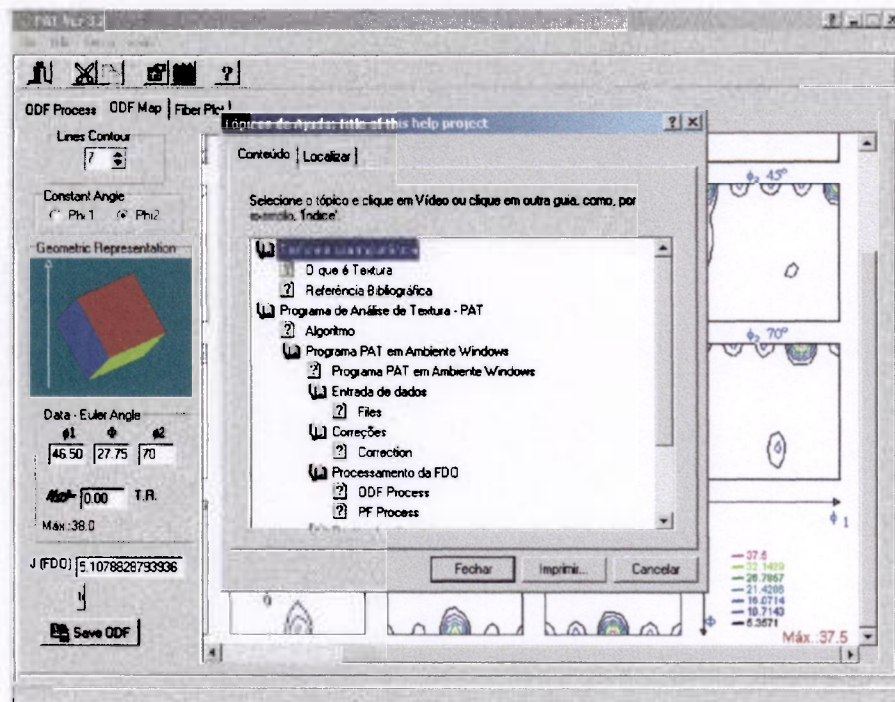


Figura 4.38 – Tela de tópicos de ajuda do programa PAT.

5. Resultados experimentais

Para verificação do funcionamento do programa PAT, alguns resultados aqui são demonstrados. O programa PAT foi desenvolvido para amostras com simetria macroscópica ortorrômbica e simetrias microscópicas do tipo: cúbica de face centrada (CFC), cúbica de corpo centrado (CCC) e hexagonal. Foram feitas análises de materiais de interesse tecnológico e de desenvolvimento, surgidos em trabalhos conjuntos, com a indústria e pesquisadores da área.

Os materiais mais pesquisados de simetria microscópica cúbica são: alumínio e suas ligas, aço e suas ligas. Para materiais de simetria microscópica hexagonal: titânio.

5.1 Alumínio laminado

O alumínio é amplamente pesquisado devido as várias características químico-físicas. O seu emprego é muito requerido na indústria de embalagens, desde folhas (papel alumínio) até latas de acondicionamento de bebidas e de uso estrutural em veículos aeronáuticos e terrestres. Há, também, uma procura deste material em relação as suas ligas para substituição de peças mecânicas devido a sua leveza e baixa oxidação. O alumínio pode ser produzido através de lingote convencional para posterior fabricação de peças ou laminação para produção de chapas. Daí a necessidade de se conhecer a textura para aplicação de conformação mecânica como, por exemplo, embutimento na fabricação de latas e afins e de longarinas. A indústria tem produzido chapas de alumínio através de lingoteamento contínuo (Caster), trazendo com isto, uma economia de energia para a produção de chapas eliminando vários processos de laminação.

No decorrer deste trabalho, foi realizado um estudo em conjunto com a Companhia Brasileira de Alumínio – CBA para análise de textura de chapas de alumínio produzidas através de lingoteamento contínuo. As chapas estudadas, provenientes deste processo, possuíam 7mm de espessura. Foram realizadas medidas na superfície da amostra, à $\frac{1}{4}$ da superfície relativa a espessura e à $\frac{1}{2}$ da espessura da amostra. Os resultados das FDO's são mostrados nas Figuras 5.1, 5.2 e 5.3.

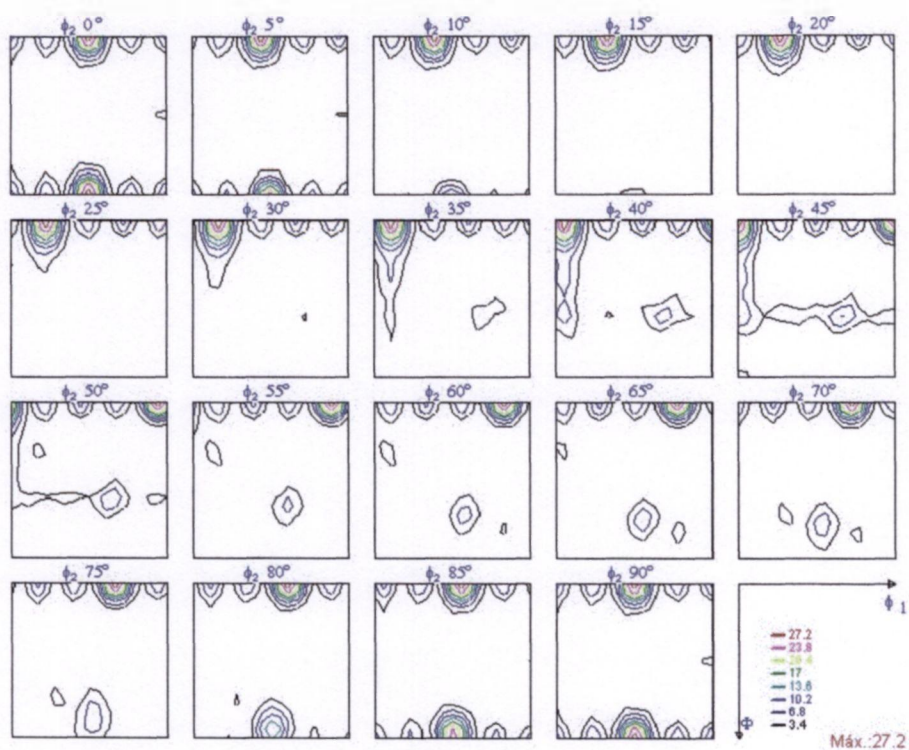


Figura 5.1 – FDO de alumínio 3003 - lingoteamento contínuo - superfície.

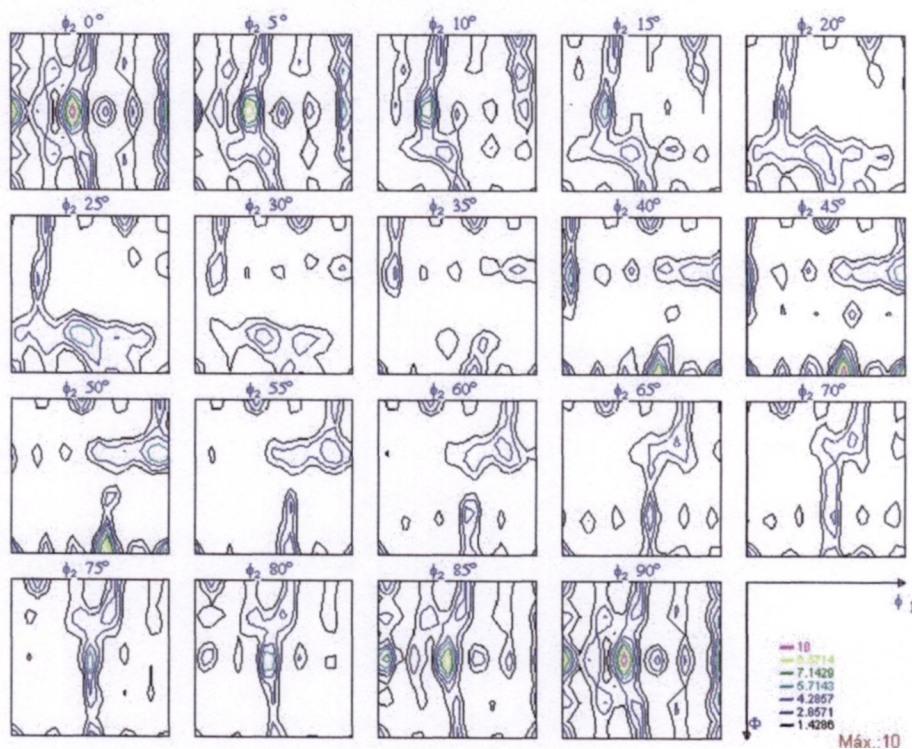


Figura 5.2 – FDO alumínio 3003 - lingoteamento contínuo- ¼ da superfície.

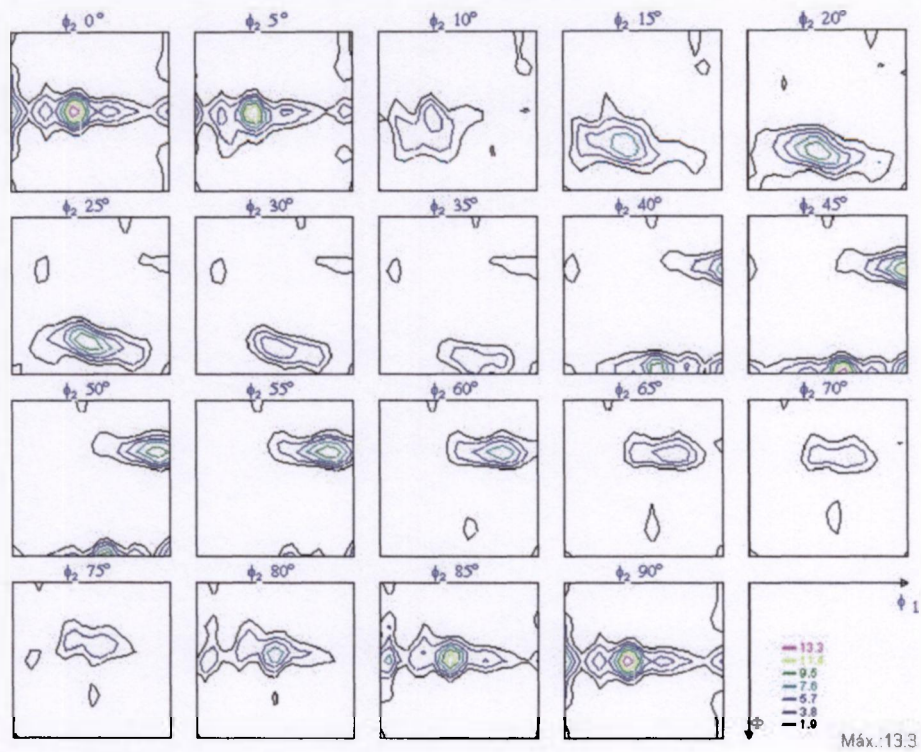


Figura 5.3 – FDO Alumínio 3003- lingoteamento contínuo - centro da amostra.

A FDO medida na superfície da amostra, Figura 5.1, apresenta uma textura conhecida como cubo rodado observável na secção $\varphi_2 = 0^\circ$, plano 110 na direção DL ou $(110)\langle 001 \rangle$, com uma intensidade 27.2 vezes o aleatório (T.R.). A FDO da amostra a $\frac{1}{4}$ da superfície, em relação a espessura, começa a apresentar uma textura típica de alumínio laminado observável na secção $\varphi_2 = 0^\circ$, $\Phi = 45^\circ$ e $0^\circ \leq \varphi_1 \leq 90^\circ$ (Figura 5.2), representada pela fibra $\alpha \langle 110 \rangle // \text{ND}$, que pode ser verificada no gráfico da figura 5.4.

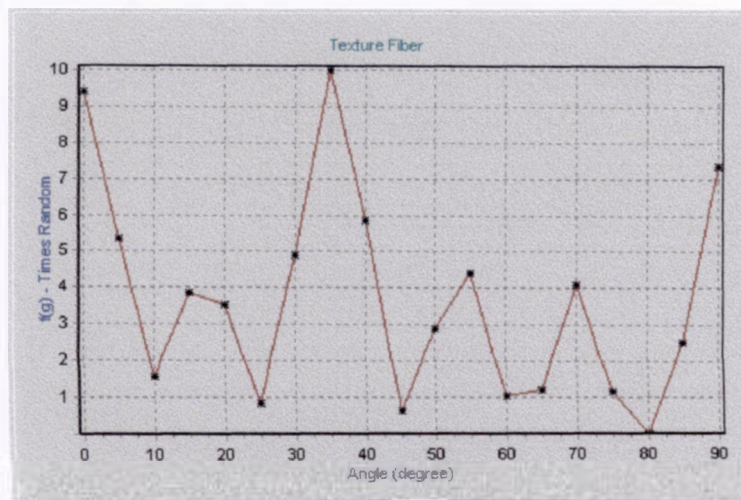


Figura 5.4 - Fibra $\alpha \langle 110 \rangle // \text{ND}$ Al 3003 a $\frac{1}{4}$ da superfície em relação à espessura.

A FDO do centro da amostra apresenta um aumento na intensidade de textura típica de laminação de alumínio em relação a FDO a $\frac{1}{4}$ da amostra, observável na secção $\varphi_2 = 0^\circ$, $\Phi = 45^\circ$ e $0^\circ \leq \varphi_1 \leq 90^\circ$ (Figura 5.3), representado pela fibra $\alpha <110>/\text{ND}$, Figura 5.5.

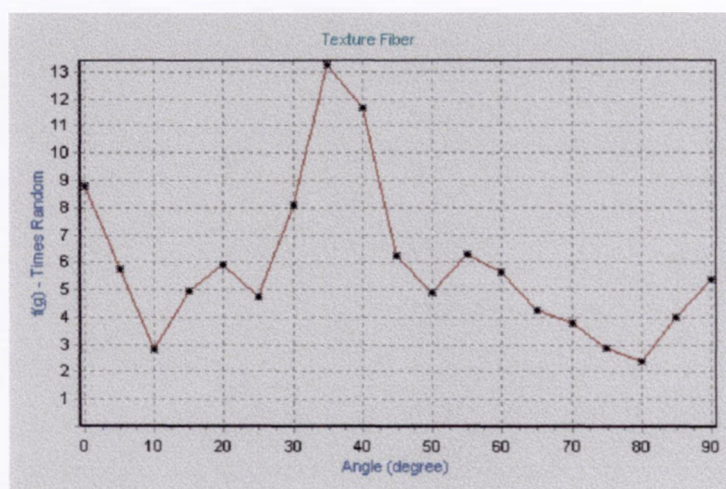


Figura 5.5 – Fibra $\alpha <110>/\text{ND}$ Al 3003 no meio da superfície.

Através da avaliação das FDO's verificaram-se as seguintes características: na região central verificou-se a presença de três componentes: $(011)<211>$, conhecida como tipo latão, de maior intensidade $f(g) = 13,6$, $(123)<634>$ na secção $\varphi_2 = 25^\circ$, conhecida como tipo *S* com $f(g) = 11,7$ e $(112)<111>$, conhecida como tipo cobre, $f(g) = 9,7$ T.R.. Na região $\frac{1}{4}$ de espessura nota-se a presença da componente do tipo latão, com $f(g) = 10,3$ T.R. e da componente $(110)<001>$ na secção $\varphi_2 = 45^\circ$, conhecida como *Goss*, com $f(g) = 8,8$ T.R.. O aumento em intensidade da componente *Goss* da superfície ao centro pode ser atribuído as menores taxas de resfriamento nestes planos durante e depois a laminação a quente.

Outra amostra de alumínio 3003 só que laminada a quente foi analisada quanto a sua textura. As Figuras 5.6, 5.7 e 5.8 mostram as FDO's que foram levantadas medidas nas mesmas regiões relativas ao do lingoteamento contínuo: superfície, a $\frac{1}{4}$ da superfície em relação a espessura e no centro.

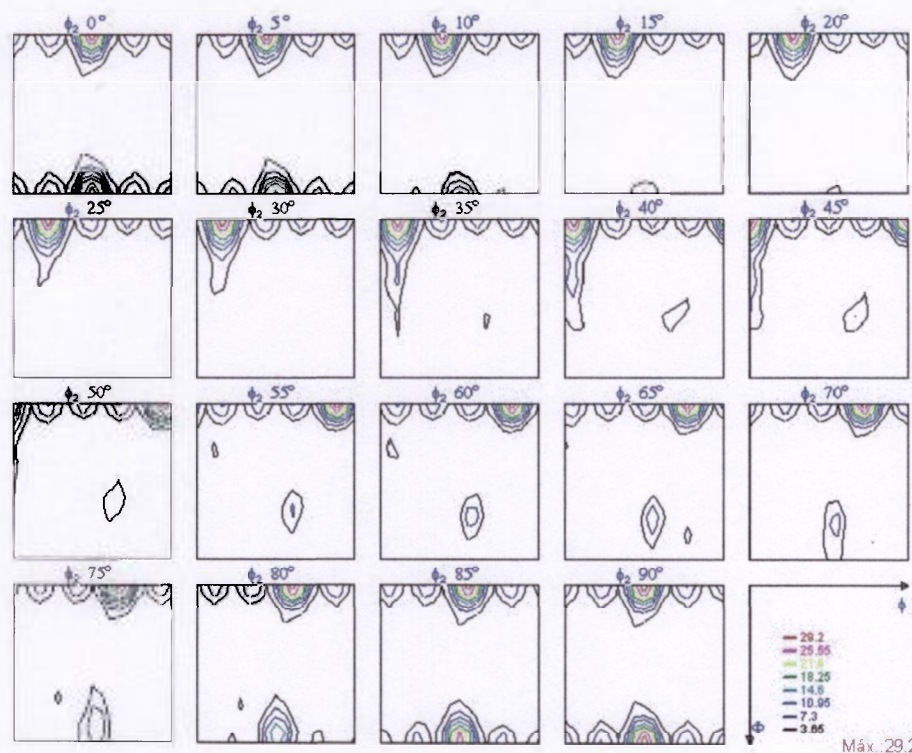


Figura 5.6 – FDO da superfície de chapa alumínio 3003 laminado a quente com redução de 91%

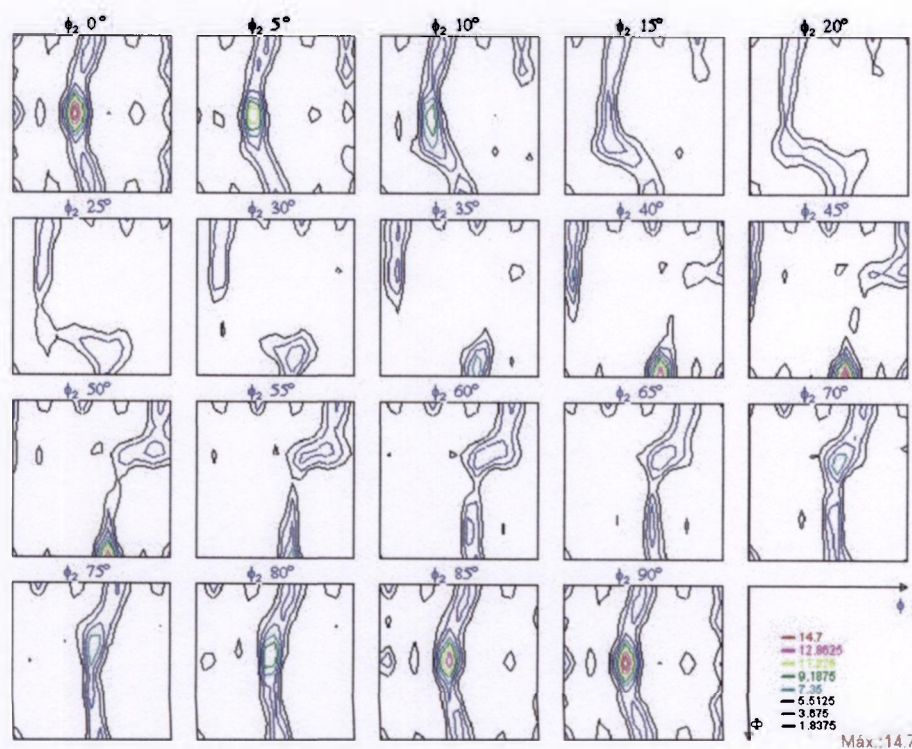


Figura 5.7 - FDO a 1/4 da superfície, em relação à espessura, de chapa alumínio 3003 laminado a quente com redução de 91%

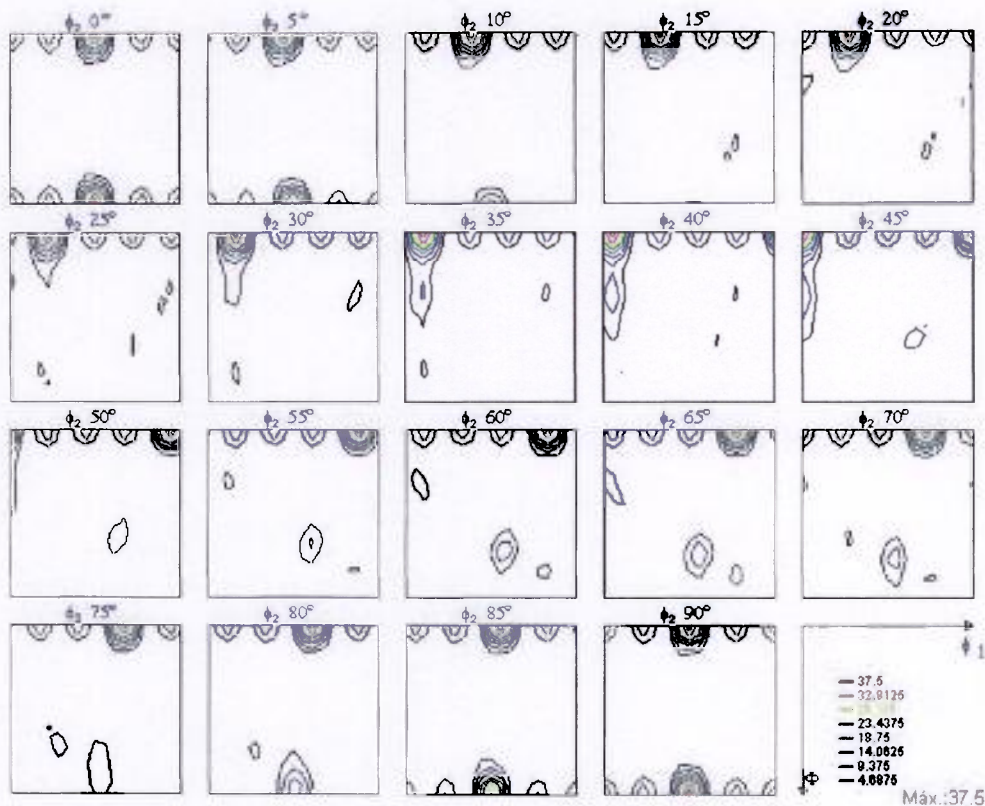


Figura 5.7 - FDO realizado ao centro chapa de alumínio 3003 laminado a quente com redução de 91%

Verifica-se que na superfície e no centro da amostra as FDO's apresentam a mesma textura (cubo rodado) diferenciando-se somente na intensidade $f(g)$ máxima, $f(g)=29.2$ T.R. na superfície e, $f(g) = 37.5$ T.R. no centro. Já a $\frac{1}{4}$ na secção $\phi_2 = 0^\circ$ da FDO apresenta início de textura típica da laminação de alumínio com pólo de textura tipo latão $(011)\langle 211 \rangle$.

5.2 Aço laminado

O aço laminado é o material onde se foca o maior interesse no comportamento da textura devido a sua ampla aplicabilidade em vários campos. Como exemplo: na liga ferro-silício, conhecida como aço elétrico, é desejada uma fibra de textura específica, chamada *dzeta*, com o plano $(011)//DN$, onde este plano-direção é requerido por ocorrer uma saturação da magnetização mais rápida e com isso menos energia para se conseguir o campo magnético desejado e, conseqüentemente, um transformador ou motor elétrico mais eficiente. Outro exemplo: o aço laminado, onde a aplicabilidade dar-se-á na fabricação de peças automotivas quanto a sua carroçaria e longarinas, é desejada uma fibra de textura,

chamada gama, com o plano (111)// DL. Esta textura é importante para o controle de 'orelhamento' quando se requer a estampagem profunda no material.

Na Figura 5.8 mostra a FDO feita na superfície de um aço IF laminado a frio com 87% de redução. A FDO indica a presença das fibras gama (Figura 5.9) e alfa (Figura 5.10), verificadas na secção $\varphi_2=45^\circ$ com visualização em gráfica em terceira dimensão, Figura 5.11.

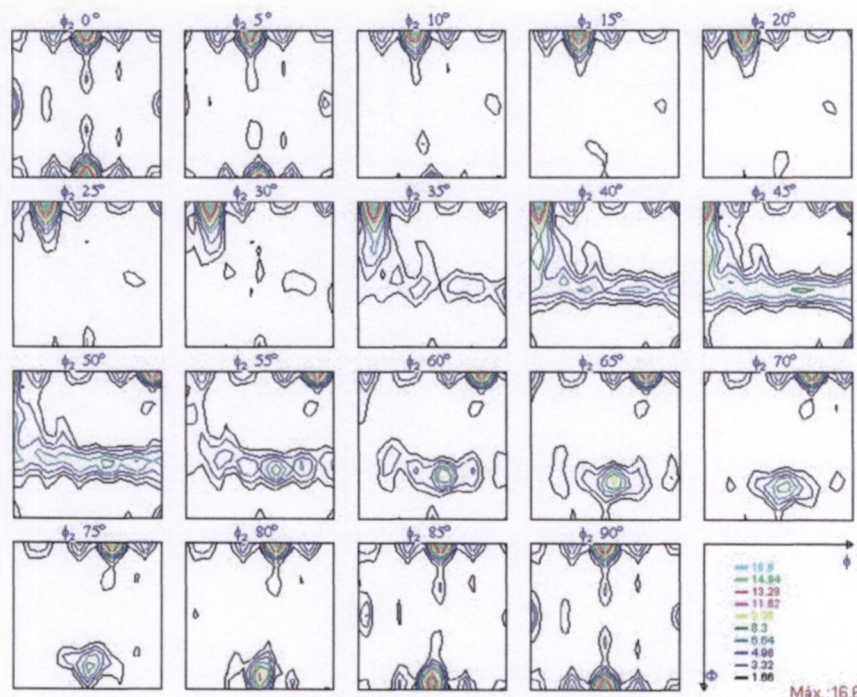


Figura 5.8 – FDO Aço IF (Interstitial Free) laminado a frio com 87% de redução.

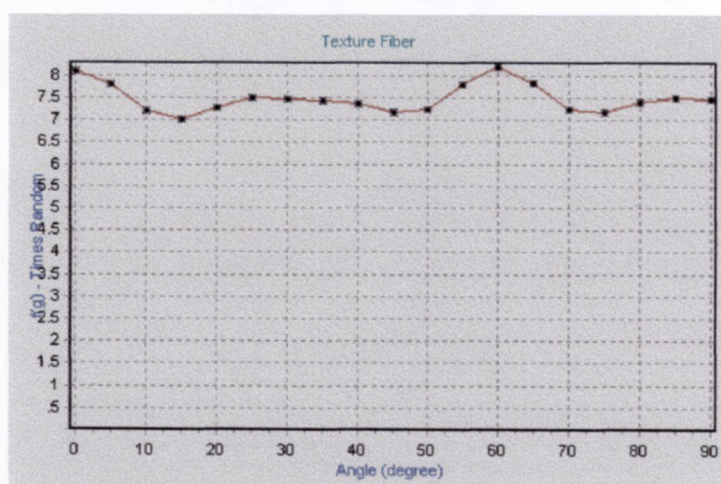


Figura 5.9 – Gráfico da fibra gama ($\varphi_1=0^\circ$, $\Phi=55^\circ$, $0\leq\varphi_2\leq90^\circ$) do aço IF. Pode-se verificar uma simetria de 30° em 30° .

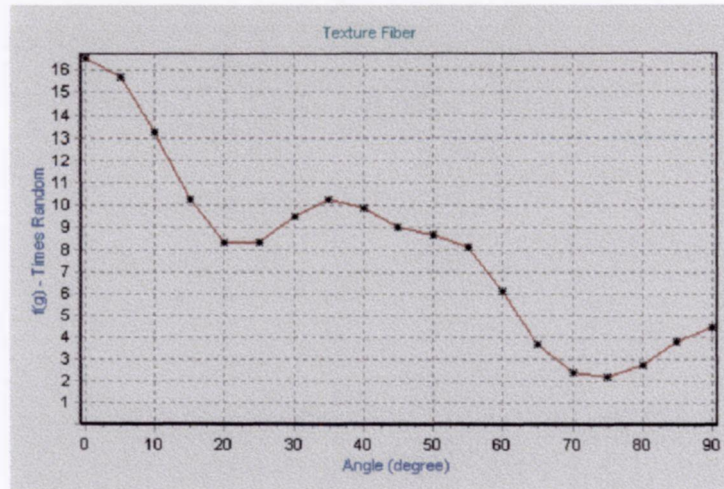


Figura 5.10 – Gráfico da fibra alfa ($\varphi_1=0^\circ$, $0 \leq \Phi \leq 90^\circ$, $\varphi_2=45^\circ$) do aço IF.

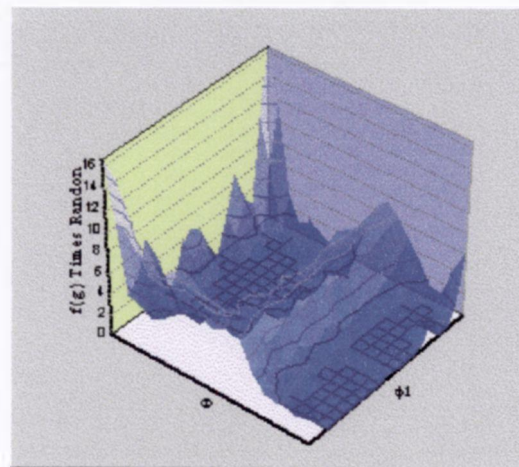


Figura 5.11 – FDO em 3D da secção $\varphi_2 = 45^\circ$.

Para sua aplicação no processo de estampagem profunda o material sofre um processo de tratamento térmico adequado para a recristalização do material, o que produz uma textura de recristalização, onde ocorre o desaparecimento da fibra alfa e o incremento da intensidade da fibra gama.

5.3 Titânio laminado

Alguns materiais de interesse comercial e tecnológico têm como simetria microscópica a hexagonal, como: zircônio e suas ligas, titânio, zinco. Para testar o programa quanto a sua implementação para esta simetria, utilizou-se o titânio laminado a 91%. Como pode ser visto na Figura 5.12, o operador escolhe a simetria hexagonal e

aparecerá caixa de texto para que o analista forneça a relação c/a , que no caso é de 1,85. Após a introdução de dados as figuras de pólos conseguidas para este material, estas podem ser vistas na Figura 5.13.

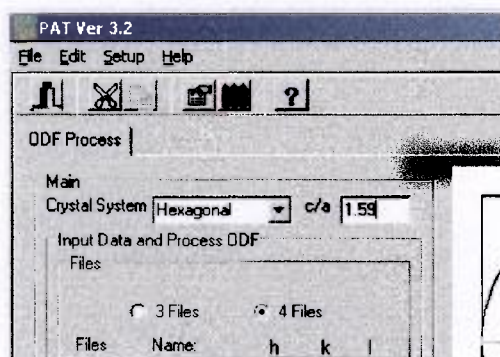


Figura 5.12 – Escolha do sistema do cristal e a relação c/a .

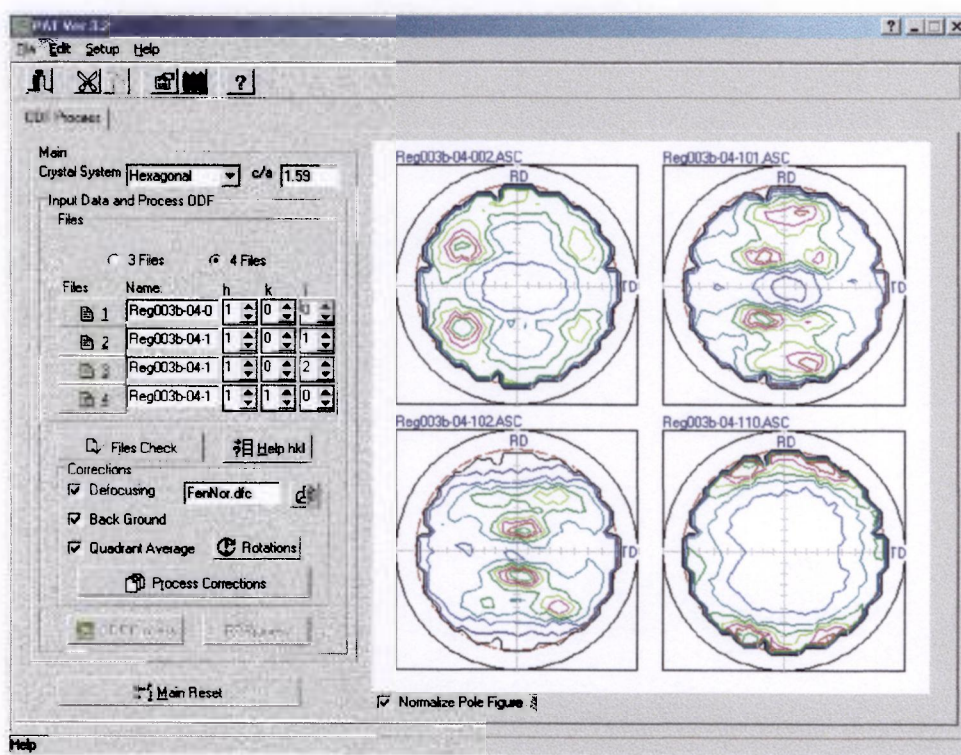


Figura 5.13 – Figuras de pólos do titânio laminado a frio com redução de 91%.

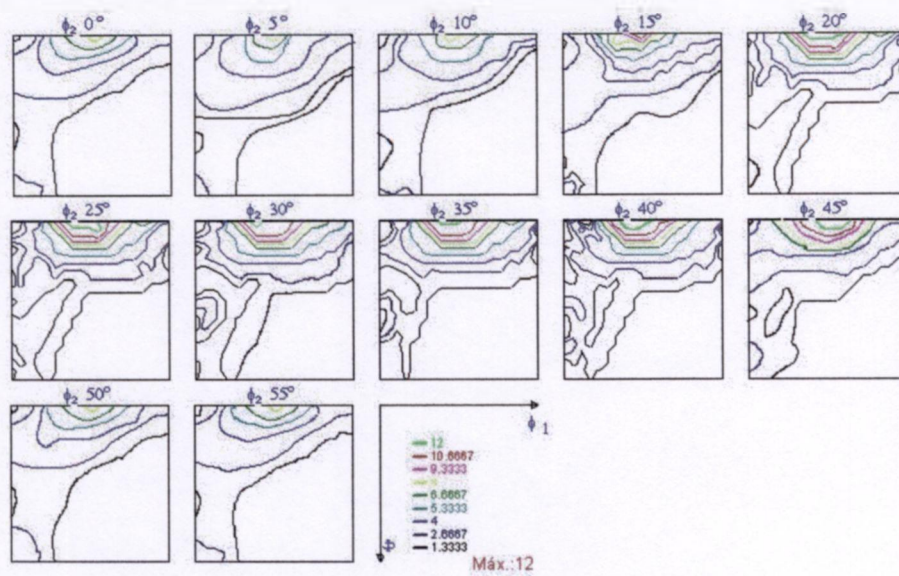


Figura 5.14 – FDO Titânio laminado a frio com redução de 91%.

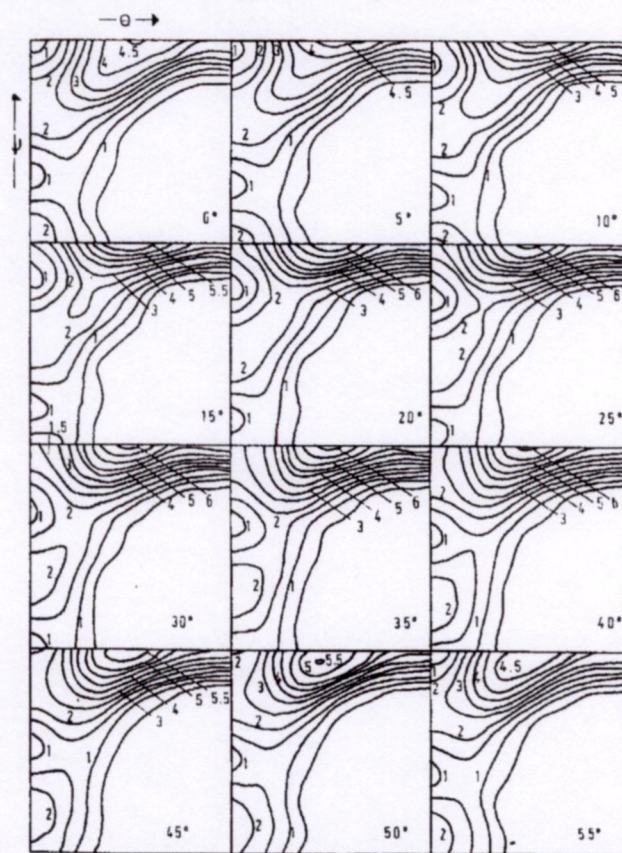


Figura 5.15 – FDO de Titânio a frio laminado com redução de 65% e recristalizado (adaptado, Bunge, 1982)

Como pode ser visto, a FDO é calculada para o ângulo constante até 55° , que no caso é o ângulo φ_2 . Isto é, devido à simetria microscópica hexagonal o espelhamento (*mirror*) é de 55° .

Comparando-se as FDO's, Figura 5.14 e Figura 5.15, verifica-se uma semelhança indicando que o programa está funcionando corretamente para esta simetria.

6. Conclusões

Considerando-se os objetivos propostos pode-se concluir que:

Para o cálculo da função distribuição de orientações (FDO) foram implementadas rotinas de cálculo dos polinômios de Legendre e dos harmônicos esféricos de superfície para a simetria macroscópica ortorrômbica e simetria microscopia cúbica e hexagonal, isto se dá em tempo real, facilitando ao analista escolher parâmetros como: passo de varredura dos ângulos α e β e, possibilidade de levantamento de secções da FDO em valores diferentes ao padrão em implementação futura.

Para a correção da desfocalização utiliza-se um arquivo de dados que pode ser editado pelo analista de maneira fácil, permitindo uma maior diversidade na escolha de geometria de fendas da óptica do goniômetro de raios X. Para a correção da radiação de fundo (B.G.) o programa verifica a validade do dado ponto-a-ponto pelo desvio quadrático para que não ocorra erro na subtração. O programa também verifica se os índices de Miller (hkl) estão válidos quanto ao seu sistema microscópico (CFC ou CCC). Todos estes fatores ajudam o analista a não incorrer em erros comuns no processo.

Para o gráfico da FDO, em sua representação em duas dimensões (2D), foi utilizado um algoritmo de triangulação por meio de cálculo vetorial desenvolvido em linguagem nativa do compilador (Pascal) melhorando a performance do programa. Para a representação gráfica em três dimensões (3D), foi utilizado um componente para *Object Pascal* fornecido pela Steema[®] Software em versão teste. A representação em 3D é de grande ajuda ao analista sendo esta representação tem sido muito utilizada atualmente nos trabalhos de estudo de textura devido a maior facilidade de visualização.

A utilização do programa por diversos pesquisadores e estudantes permitiu o aprimoramento da interface com o usuário ('*user friendly*'). Sugestões, indicações de erros de operação ou de execuções na fase de desenvolvimento do programa, foram de grande valia para a criação de uma interface auto-explicativa e para implementação de rotinas

visando o cálculo de parâmetros que possibilitaram um estudo melhor da textura. Esta fase mostrou-se essencial para se atingir o objetivo de realizar um programa de fácil utilização e livre de erros não teria sido atingido.

Finalmente, a comparação entre resultados obtidos utilizando este programa com os da literatura mostrarem-se coerentes, o que permitiu concluir que os algoritmos implementados estão de acordo e livres de erros.

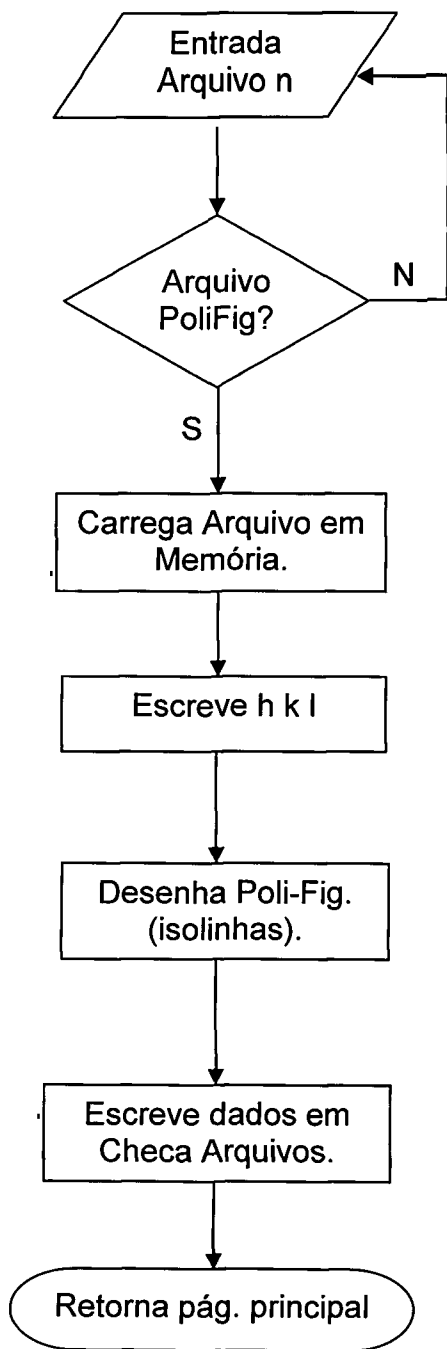
Referências bibliográficas

- BARRETT, C.S.; MASSALSKI, T.B. *Structure of metals*, 3 ed., McGraw-Hill, 1966.
- BUNGE, H.J. *Mathematische methoden der texturanalyse*. Akedemie-Verlag, Berlim, 1969.
- BUNGE, H.J. Calculation of the Fourier coefficients of the generalized spherical functions, *Kristall und Technik*, 9, p. 939-963, 1974.
- BUNGE, H.J.; ESLING, C. Determination of the odd part of the texture function, *Journal Physics Letter*, 40, p. 627-628, 1979.
- BUNGE, H.J.; ESLING, C.; MULLER, J. The role of the inversion centre in texture analysis, *Journal Applied Crystallography*, 13, p. 544-554, 1980.
- BUNGE, H.J. *Texture analysis in materials science mathematical methods*. 1.ed., Butterworths, 1982.
- BUNGE, H.J., Technological Applications of Texture Analysis, *Zeitschrift für Metallkunde*, v. 76, 7, p. 457-470, 1985.
- BUNGE, H.J.; NIELSEN, I.; KLEIN, H. Symmetries of production processes seen by texture symmetries, **THERMEC97**, International Conference on Thermomechanical Processing of Steels & Other Materials, Edited by T.Chandra and T.Sakai, 1997.
- CULLITY, B.D.; STOCK, S.R. *Elements of x-ray diffraction*. 3.ed., New Jersey, Prentice Hall, 2001.
- ESLING, C., *Effets des Symétries des Cristaux, des Échantillons et de la diffraction sur la Définition et la Détermination de la Fonction de Texture*, Thesis (Ph.D.), Universite of Metz, 1981.
- GODEC, M.; JENKO, M. Presentation methods of textures measurements, *Materiali inTechnologije*, v.34, 6, p. 359-364, 2000.
- HARRIS, G.B. Quantitative measurement of preferred orientation in rolled uranium bars, *Philosophical Magazine*, 43, p. 113-123, 1952.
- HELMING, K.; MATTHIES, S. On the interpretation of orientation distributions and qualitative ghost corrections for hexagonal-orthorhombic textures, *Physics Status Solid (b)*, 126, p. 43-52. 1982.
- KALLEND, J.S.; KOCKS, U.F.; ROLLETT, A.D.; WENK, H.R. Operational texture analysis, *Materials Science and Engineering*, A132, p.1-11, 1991.
- KOCKS, U.F.; TOMÉ, C.N.; WENK, H.-R. *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and their Effect on Materials Properties*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- LIMA N.B. *Influência da Textura em Medidas de Tensão Residual*. 1991. Tese (Doutoramento) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo.

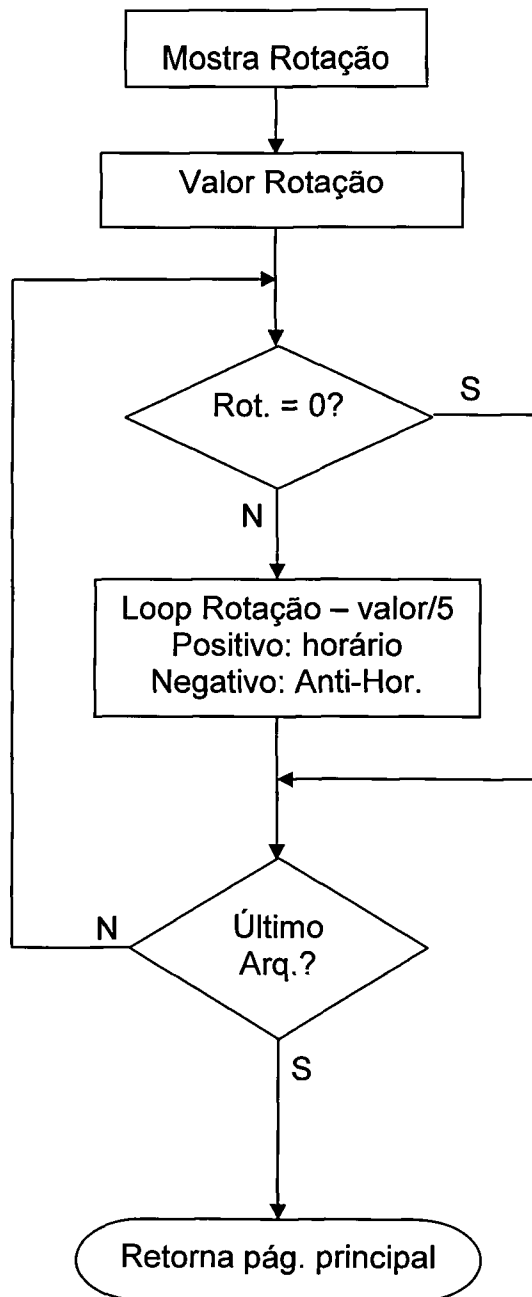
- LIMA, N.B., GALEGO, E., IMAKUMA, K. Análise de textura por meio de figuras de pólos incompleta, INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES - IPEN, publicação técnica interna, 1986.
- MATTHIES, S. On the Reproducibility of the Orientation Distribution Function of Texture Samples from Pole Figures (ghost phenomena), *Physics Status Solid (b)*, 92(2), K135-138, 1979.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (I) Relationship between the ODF and pole figures, *Kristall und Technik*, v.15, 5, p. 431-444, 1980.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (II) Consequences of the limited reproducibility of the ODF – Ghost phenomena, *Kristall und Technik*, v.15, 5, p. 601-614, 1980.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (III) Relationship between the ODF $f(g)$ and the reduced ODF $\tilde{f}(g)$, *Kristall und Technik*, v.15, 7, p. 823-835, 1980.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (IV) Reproduction methods, *Kristall und Technik*, v.15, 10, p. 1189-1195, 1980.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (V) Discussion of the reprojection relationship, *Kristall und Technik*, v.15, 11, p. 1323-1328, 1980.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (VI) Sharp textures. Possibilities of ghost corrections, *Crystal Research and Technology*, v.16, 4, p. 513-520, 1981.
- MATTHIES, S. On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figures (VII) Reliability of reproduced ODF's; standard functions, *Crystal Research and Technology*, v.16, 9, p. 1061-1071, 1981.
- MATTHIES, S.; HELMING, K. General consideration of the loss of information on the orientation distribution function of texturized samples in pole figure measurements, *Physics Status Solid (b)*, 113, p. 569-582, 1982.
- MATTHIES, S.; POSPIECH, J. Demonstration of the ghost effect in the presentation of the orientation distribution of texturized materials, *Physics Status Solid (b)*, 97(2), p.547-556, 1980.
- MATTHIES, S.; VINEL, G.W. An example demonstrating a new reproduction method of the ODF of texturized samples from reduced pole figures, *Physics Status Solid (b)*, 112, p. K115-120, 1982.
- PAWLIK, K. Determination of the orientation distribution function from pole figures in arbitrarily defined cells, *Physics Status Solid (b)*, 143, p.477-483, 1986.

- POSPIECH, J.; GNATEK, A.; FICHTNER, K. Symmetry in the space of Euler angles, *Kristall und Technik*, v.9, 7, p.729-742, 1974.
- RANDLE, V.; ENGLER, O. *Introduction to texture analysis- Macrotecture, microtexture and orientation mapping*. 1.ed., The Netherlands, Gordon and Breach Science, 2000.
- PURSEY, H.; COX, H.L. The correction of elasticity measurements on slightly anisotropic materials, *Phil. Mag.*, 45, p. 295-302.
- ROE, R.J.; KRIGBAUM, W.R. Description of crystallite orientation in polycrystalline Materials Having Fiber Texture, *The Journal of Chemical Physics*, v.40, 6, p. 2608-2615, 1964.
- ROE, R.J.; KRIGBAUM, W.R. Crystallite orientation in materials having fiber texture. II. A study of strained samples of crosslinked polyethylene, *The Journal of Chemical Physics*, v.41, 3, p. 737-748, 1964.
- ROE, R.J. Description of crystallite orientation in polycrystalline materials. III. General solution to pole figure inversion, *Journal of Applied Physics*, v.36, 6. p.2024- 2031, 1965.
- RUER, D.; BARO, R. A new method for the determination of the texture of materials of cubic structure from incomplete pole figures, *Advance X-Ray Analysis*, 20, p.187-200, 1977.
- SNYDER, R.L.; FIALA, J.; BUNGE, H.J. *Defect and microstructure analysis by diffraction*, Oxford University Press, Pedatow, 1999.
- SZPUNAR, J.A.; HINZ, D.C. Determination of the orientation distribution function from arbitrary pole figure regions, *Journal of Materials Science*, 25, p.2846-2850, 1990.
- TRUSZKOWSKI, W.; POSPIECH, J.; JURA, J.; MAJOR, B. A quantitative approach to texture in silver submitted to cold rolling. 3^o Colloque Européen sur les texture de deformation et de recristallisation des métaux application industrielles: Proceedings of the Conference at Pont-à-Mousson, *Société Francaise de Métallurgie*, 1973.
- VIGLIN, A.S., A quantitative measure of the texture of a polycrystalline material-texture function, *Soviet Physics Solid State*, 2, p. 2195-2207, 1960.
- WAGNER, F.; BECHLER-FERRY, E.; ESLING, C.; BARO, R., A generalized library program for texture calculation with even and odd coefficients, *Journal Applied Crystallography*, 15, p. 122-125, 1982.

ANEXO A

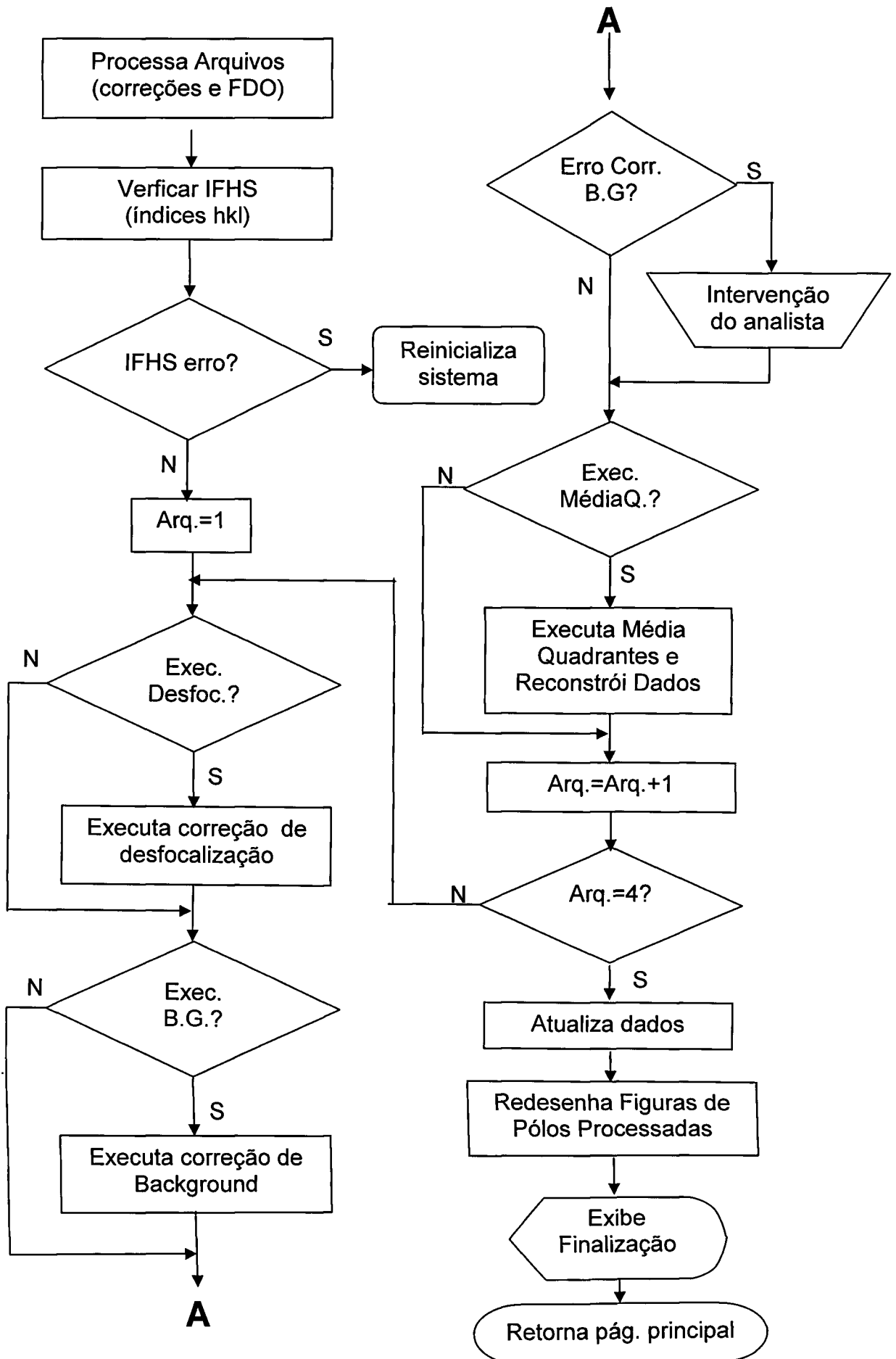


Fluxograma
Entrada de Dados Principal



Fluxograma
Rotação do Ângulo β

ANEXO A - continuação
Fluxograma - Processa Arquivo



ANEXO B**unit BBLPascal;****interface****uses**Windows, Messages, SysUtils, Variants, Classes, Graphics, Controls, Forms,
Dialogs, StdCtrls, Math, ComCtrls, Grids, ExtCtrls;**type**

```

TBBL = class(TForm)
  Legendre: TButton;
  ProgressBar1: TProgressBar;
  CubSym: TButton;
  Edit1: TEdit;
  Edit2: TEdit;
  Edit3: TEdit;
  Edit4: TEdit;
  Edit5: TEdit;
  Edit6: TEdit;
  GroupBox1: TGroupBox;
  Edit7: TEdit;
  Edit8: TEdit;
  Label1: TLabel;
  Label2: TLabel;
  Label3: TLabel;
  Label4: TLabel;
  Label5: TLabel;
  Label6: TLabel;
  Label7: TLabel;
  Label8: TLabel;
  Button3: TButton;
  Edit9: TEdit;
  Edit10: TEdit;
  Label10: TLabel;
  BKcub: TButton;
  BKNoCub: TButton;
  Label11: TLabel;
  StepPhi: TEdit;
  Label9: TLabel;
  StringGrid1: TStringGrid;
  GroupBox2: TGroupBox;
  RadioGroup1: TRadioGroup;
  RBCubic: TRadioButton;
  RBNoCubic: TRadioButton;
  function alpha(L: integer ; N: Integer): Real;
  function sinal(l,m,n:integer):real;
  function fatorial(k:integer):extended;
  Function SinalIm(m:integer):real;
  procedure LegendreClick(Sender: TObject);
  procedure CSym;
  Procedure KCubSym;
  procedure CubSymClick(Sender: TObject);
  procedure Button3Click(Sender: TObject);
  procedure BKcubClick(Sender: TObject); //Calculo dos B(L,M,MU);
  Procedure KNoCubSym;
  procedure BKNoCubClick(Sender: TObject);
  procedure FormCreate(Sender: TObject);
  procedure RBNoCubicClick(Sender: TObject);
  procedure RBCubicClick(Sender: TObject);
private
  { Private declarations }
public
  { Public declarations }
P:array[0..34,0..34,0..34] of Extended;
Q:array[0..34,0..34,0..34] of Extended;

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

a:array[0..34,0..34,0..34,0..34] of extended;
aa:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
aalinha:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
alinha:array[0..34,0..34,0..34,0..34] of extended;
CP:array[0..34,0..34,0..34,0..18] of Extended;
SP:array[0..34,0..34,0..34,0..18] of Extended;
//Pol.Legendre Associado (cos phi)
CPbarra:array[0..34,0..34,0..36] of Extended;
//Pol.Legendre Associado (sin phi)
SPBarra:array[0..34,0..34,0..36] of Extended;
B:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
CK:array[0..34,0..34,1..12] of extended;
NCK:array[0..34,0..34,1..12] of extended;
Lmax:integer;
kAngPHI:array [1..14] of extended;
kAngbeta:array [1..14] of extended;

end;
const
{ Número de Harmonico Esfericos Simetricos (NHES) ordem PAR para amostra
com simetria ortorombica figura 4.4 bunge -obs: valor '-1' não se aplica
serie de L
= ( 0, 2, 4, 6, 8,10,12,14,16,18,20,22,24,26,28,30,32,34) }
NHESP:array[0..4,0..17] of integer
{axial} = ((-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1),
{Cubico} ( 1, 0, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 3, 2, 3, 3, 3, 3),
{hex} (-1,-1,-1,-1, 1, 1, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 5, 5, 6, 6, 6),
{Tetra} ( 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 6, 7, 7, 8, 8, 9, 9),
{Orto} ( 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9,10,11,12,13,14,15,16,17,18));

{Numero harmonico Esferica Simetricos para ordem IMPAR para
varios grupos de simetria para amostra com simetria ortorombica
- figura 14.1 bunge -obs: valor '-1' não se aplica
serie de L
= ( 1, 3, 5, 7, 9,11,13,15,17,19,21,23,25,27,29,31,33,35)}
NHESI :array[0..4,0..17] of integer
{axial} = ((-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1, 1, 1, 1, 1, 1),
{cubico} (-1,-1,-1, 0, 1, 0, 1, 1, 1, 2, 1, 2, 2, 2, 3, 2),
{hex} (-1,-1,-1,-1,-1,-1, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 5, 5, 5),
{tetra} (-1, 0, 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 6, 7, 7, 8, 8),
{orto} ( 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9,10,11,12,13,14,15,16,17));

{numero harmonico Esferica Simetricos para ordem PAR e IMPAR
obs '-1' nao se aplica
indices
( 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,
21,22,23,24,25,26,27,28,29,30,31,32,33,34)}
NHES :array[0..4,0..35] of integer
{axial} = ((-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1, 1,-1, 1,-1,
1,-1, 1,-1, 1,-1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1),
{cubico} ( 1,-1, 0,-1, 1,-1, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 2, 1,
2, 2, 2, 1, 3, 2, 2, 2, 3, 2, 3, 2, 3, 3, 3, 2),
{hex} (-1,-1,-1,-1,-1,-1,-1, 1,-1, 1,-1, 3, 2, 3, 2, 3, 2, 4, 3,
4, 3, 4, 3, 5, 4, 5, 4, 5, 4, 6, 5, 6, 5, 6, 5),
{tetra} ( 1,-1, 1, 0, 2, 1, 2, 1, 3, 2, 3, 2, 4, 3, 4, 3, 5, 4, 5, 4,
6, 5, 6, 5, 7, 6, 7, 6, 8, 7, 8, 7, 9, 8, 9, 8),
{orto} ( 1, 0, 2, 1, 3, 2, 4, 3, 5, 4, 6, 5, 7, 6, 8, 7, 9, 8,10, 9,
11,10,12,11,13,12,14,13,15,14,16,15,17,16,18,17));

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

*{Angulos de Phi e Beta hkl-Eixo cristalograficos entre o plano (100)
e os planos 100, 110,111, 210, 211, 221, 310, 311,320,321,322,331,332,410,411}*
DAng :array [1..2,1..12] of extended
= ((pi/2,pi/2,0.955316618124509,0.4636476090008006,0.615479708670387,
0.841068670567930,0.321750554396642,0.440510663004699,0,0,0,0),
(0 ,pi/4, pi/4, 0, pi/4,
1.10714871779409, 0, pi/4,0,0,0,0));

CubAngPHI:array [1..15] of extended
= (90, 90,54.74,26.56,35.26,48.19,18.43,25.24,0{33.69},0{36.7} ,
0{43.31} , 0{46.51},50.24,14.04,19.47);

CubAngbeta:array [1..15] of extended
= (90, 45, 45, 0{63.43},45{65.90},63.43,0{71.56},45{72.45},
0{56.32},0{57.69},0{60.98},0{76.74},64.76,75.96,76.37);

var

BBL: TBBL;
//Pol. Legendre P[l,m,n] phi=pi/2
{P:array[0..34,0..34,0..34] of Extended;
Q:array[0..34,0..34,0..34] of Extended;
a:array[0..34,0..34,0..34,0..34] of extended;
aa:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
aalinha:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
alinha:array[0..34,0..34,0..34,0..34] of extended;
CP:array[0..34,0..34,0..34,0..18] of Extended;
SP:array[0..34,0..34,0..34,0..18] of Extended;
//Pol. Legendre Associado (cos phi)
CPbarra:array[0..34,0..34,0..36] of Extended;
//Pol. Legendre Associado (sin phi)
SPbarra:array[0..34,0..34,0..36] of Extended;
B:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
CK:array[0..34,0..34,0..12] of extended;
NCK:array[0..34,0..34,0..12] of extended;
Lmax:integer;
kAngPHI:array [1..14] of extended;
kAngbeta:array [1..14] of extended; }

implementation

{R * dfm}

procedure TBBL.LegendreClick(Sender: TObject);

var

l,lmaism,lmenosm,m,n,lmax,ni,s:integer;

numpasso,nang:integer;

j:longint;

A1,A2,A3,phi,passo:extended;

PB:textfile;

begin

lmax:=34;

// Atribui valores para os polinomios constantes

P[0,0,0]:=1;

P[1,0,0]:=0;

for l:=1 **to** lmax **do**

for m:= 1 **to** lmax **do**

begin

if (l mod 2 = 0) and (m mod 2 <> 0) **then** P[l,m,0]:=0;

if (l mod 2 <> 0) and (m mod 2 = 0) **then** P[l,m,0]:=0;

end;

// Calcula os polinomios P(l=m=0,n=0)

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

For l:=2 to lmax do
  begin
    P[l,0,0]:= -((l-1)/l)*P[l-2,0,0];
  end;
// Calcula o polinomio P(l=l, m=l, n=l) eq.(2)
For l:=1 to lmax do
  begin
    P[l,1,1]:=1/power(2,l);
  end;

{P[l,m,1]} //eq.(4)

For l:= 1 to Lmax do
  For m:= 0 to l do
    begin
      n:=l;
      lmenosm:=l-m;
      lmaism:=l+m;
      A1:=fatorial(lmenosm)*fatorial(2*l);
      A2:=fatorial(lmaism);
      A3:=power(2,l)*fatorial(lmenosm);
      P[l,m,n]:=(sinal(l,m,n)/A3) * sqrt(A1 / A2);
      P[l,n,m]:=P[l,m,n];

    end;

{P[l,m,l-1]} //eq. (6)

For l:=2 to Lmax do
  for m:= l downto 1 do
    begin
      n:=l-1;
      lmenosm:=l-m;
      lmaism:=l+m;
      A1:=fatorial(lmenosm)*fatorial(2*l-1);
      A2:=fatorial(lmaism);
      A3:=power(2,l)*fatorial(lmenosm);
      P[l,m,n]:=2*m*(sinal(l,m,n)/A3)*sqrt(A1/A2);
      P[l,n,m]:=P[l,m,n];
    end;

{polinomios P[l,0,n] } //equacao 7

For l:=3 to Lmax do
  For n:= l-1 downto 2 do
    Begin
      P[l,0,n-1]:=alpha(l,n+1)*P[l,0,n+1]/alpha(l,n);
      P[l,n-1,0]:=P[l,0,n-1];
    end;

{polinomios por triangulacao} //equacao 17

For l:= 3 to Lmax do
  for m:= l-1 downto 2 do
    for n:= l-2 downto 1 do
      begin
        A1:=(n*alpha(l,n+1)*P[l,m,n+1]);
        A2:=(n*alpha(l,n)*P[l,m,n-1]);
        A3:=(m*alpha(l,m+1)*P[l,m+1,n]);
        P[l,m-1,n]:= (A3+A2-A1)/(m*alpha(l,m));
      end;

{Calculo dos Q[l,m,n]} //equacao 18
For l:= 0 to Lmax do

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

For m:=0 to l do
  For n:= 0 to m do
    Begin
      Q[l,m,n]:=sinal(-1,m,n)*P[l,m,n];
      Q[l,n,m]:=Q[l,m,n];
    end;

{calculo dos a[l,m,n,s] e a'[l,m,n,s]} //eq(21)
For l:=0 to lmax do
  For m:= 0 to l do
    For n:= 0 to m do
      For s:= 0 to l do
        begin
          A1:=Q[l,m,s];
          A2:=Q[l,n,s];
          A3:=A1*A2;
          a[l,m,n,s]:=A3;
          if (m+n) mod 2 = 0
            then begin
              if s=0 then alinha[l,m,n,s]:=A3
                else alinha[l,m,n,s]:=2*A3;
            end
          else begin
              if s=0 then alinha[l,m,n,s]:=0
                else alinha[l,m,n,s]:=2*A3;
            end;
        end;
      end;
    end;
  end;

//polinomios P[l,m,n] com passo 5 graus
passo:=strtofloat(StepPhi.Text); //em graus
numpasso:= 90 div 5; // numero de passos
//For nang:= 0 to numpasso do
//begin
ProgressBar1.Max:=lmax;
ProgressBar1.Min:=1;
progressbar1.Step:=1;
For l:= 1 to lmax do
  begin
    ProgressBar1.StepIt;
    For m:= 0 to l do
      For n:= 0 to l do
        For nang:=0 to numpasso do
          begin
            phi:=degtorad(nang*passo);
            if (m+n) mod 2 =0
              then //se m+n par calcula
                begin
                  CP[l,m,n,nang]:=0;
                  for s:= 0 to l do
                    begin
                      CP[l,m,n,nang]:=CP[l,m,n,nang]
                        +alinha[l,m,n,s]*cos(s*phi);
                    end;
                  end
                else
                  begin
                    SP[l,m,n,nang]:=0;
                    For s:=0 to l do
                      begin
                        SP[l,m,n,nang]:=SP[l,m,n,nang]
                          +alinha[l,m,n,s]*sin(s*phi);
                      end;
                    end;
                  end;
                end;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
end;
end;

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

// calculo do a[l,m,s]
for l:= 0 to lmax do
  for m:= 0 to 1 do
    for s:= 0 to 1 do
      begin
        A1:=l;
        A2:=a[l,m,0,s]*Sqrt((2*A1+1)/(2))*SinalIm(m);
        aa[l,m,s]:=A2;
        if (m) mod 2 = 0
          then begin
            if s=0 then aalinha[l,m,s]:=A2
              else aalinha[l,m,s]:=2*A2;
            end
          else begin
            if s=0 then aalinha[l,m,s]:=0
              else aalinha[l,m,s]:=2*A2;
            end;
          end;
        end;
      end;

//polinomios P[l,m] com passo 5 graus - pode ser mudado
passo:=5; //em graus
numpasso:= 36;//90 div passo; // numero de passos
assignfile(PB,'c:/pat/PBarra.dat');
rewrite(PB);
ProgressBar1.Max:=36;
ProgressBar1.Min:=0;
progressbar1.Step:=0;
//For nang:= 0 to 36 do
//begin
//ProgressBar1.StepIt;
For l:= 0 to lmax do
  begin
    For m:= 0 to 1 do
      For nang:= 0 to 36 do
        begin
          ProgressBar1.StepIt;
          phi:=degtorad(nang*passo);
          if (m) mod 2 =0
            then
              begin
                CPBarra[l,m,nang]:=0;
                for s:= 0 to 1 do
                  begin
                    CPBarra[l,m,nang]:=CPBarra[l,m,nang]
                      +aalinha[l,m,s]*cos(s*phi);
                    // if CPBarra[l,m,nang]<1E-17 then CPBarra[l,m,nang]:=0;
                  end;
                if l mod 2 = 0 then
                  write(PB,{'P[','l','m','nang*5,'],' ',CPBarra[l,m,nang],' '});
                end
              else
                begin
                  SPBarra[l,m,nang]:=0;
                  For s:=0 to 1 do
                    begin
                      SPbarra[l,m,nang]:=SPBarra[l,m,nang]
                        +aalinha[l,m,s]*sin(s*phi);
                    end;
                  end;
                end;
              end;
            end;
          writeln(PB);
          end;
        //end;
      closefile(PB);

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```
Csym; //Cubic simetria
End;
```

```
Function TBBL.SinalIm(m:integer):real;
```

```
begin
  case m of
    0:sinalIm:=1;
    1:sinalIm:=1;
    2:sinalIm:=-1;
    3:sinalIm:=-1;
    else
      if m mod 2 = 0 then if (m div 2) mod 2 = 0
        then sinalIm:=1
        else sinalIm:=-1
      else if ((m-1) div 2) mod 2 =0
        then sinalIm:=1
        else sinalIm:=-1;
    end;
  end;
```

```
function TBBL.alpha(L: integer ; N: Integer): Real;
```

```
begin
  alpha:=sqrt((L+N)*(L+1-N));
end;
```

```
function TBBL.fatorial(k:integer):extended;
```

```
var
  i:integer;
  fat:longint;
begin
  if (k=0) or (k=1) then begin Result:=1; exit; end;
  if k<0 then begin Result:=0; exit; end;
  Result:=k;
  for i:= k downto 2 do
    begin
      Result:=Result*(i-1);
    end;
  // Result:=fat;
end;
```

```
function TBBL.sinal(l,m,n:integer):real;
```

```
var
  nm,lm,sinalnm:integer;
begin
  if l>=0 then {sinal para os P[l,m,n]}
    begin
      nm:=n-m;
      lm:=l-m;
    end
  else {sinal par os Q[l,m,n]}
    begin
      nm:=n+m;
      if (nm mod 2) <> 0 then nm:=nm+1; //se soma impar existe mais 1 i
      lm:=0; {define como par}
    end;
  if nm>=0
  then
    case nm of
      0:sinalnm:=1;
      1:sinalnm:=1;
      2:sinalnm:=-1;
      3:sinalnm:=-1;
    else
```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

if nm mod 2 = 0 then if (nm div 2) mod 2 = 0
    then sinalnm:=1
    else sinalnm:=-1
else if ((nm-1) div 2) mod 2 =0
    then sinalnm:=1
    else sinalnm:=-1;
end
else
begin
nm:=abs(nm);
case nm of
1:sinalnm:=-1;
2:sinalnm:=-1;
3:sinalnm:= 1;
else
if nm mod 2 = 0 then if (nm div 2) mod 2 = 0
    then sinalnm:=1
    else sinalnm:=-1
else if ((nm+1) div 2) mod 2 =0
    then sinalnm:=1
    else sinalnm:=-1;
end;
end;

if lm mod 2 = 0 then sinal:=sinalnm else sinal:=-sinalnm;

end;
Procedure TBBL.CSym;
var
Lmin,Lmax,LP,J,I,Klin,LPS1,IDIMH,L,LL,JJ,J1,J11,IDIMS,
DLFAC,IDDIMS,lms1,Iline,Jcolon,IMINS,II:integer;
m,n,mu,IncM:integer;
DPISQ,DPISQD,D1,DDIMS,DNorm,Ajd1:Extended;
Dproj:array [0..34,0..34] of extended;
DReduc:array [0..34,0..34] of extended;
//DBB:array[0..34,0..34,0..34] of extended;
qdata:textfile;

begin
assignfile(Qdata,'c:\pat\Blmmu.txt');
rewrite(qdata);
Lmin:=4;
Lmax:=34;
LP:=1;
IncM:=4;
DPISQ:=sqrt(pi);
DPISQD:=DPISQ*sqrt(2);
L:=Lmin;
repeat
If (L mod 2) <> 0 then DLFAC:=0 else DLfac:=1;
Idimh:=L div incm;
m:=0;
repeat
n:=0;
repeat
ii:=m div IncM;
jj:=n div IncM;
D1:=Q[L,m,n];
if n<>0 then begin
if m=n then Dproj[ii,jj]:=(1+4*D1)/3
else Dproj[ii,Jj]:=4*D1/3;
end
else begin
if m=0 then Dproj[ii,jj]:=(DLfac+2*D1)/3

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

        else Dproj[ii,jj]:=2*sqrt(2)*D1/3;
    end;
    Dproj[jj,ii]:=Dproj[ii,jj];
    n:=n+4;
    until n > m;
    m:=m+4;
    until m > L;
    DDIMS:=0;
    For I:=0 to (Idimh) do
        DDIMS:=DDIMS+Dproj[I,I];
    IDIMS:=Round(DDIMS);
    I:=L div Incm;
    IMINS:=(Idimh)-IDIMS;

    if I-Imins > 0 then
    begin
    While i>0 do
    if Dproj[i,i] > 0.0001
    then
    begin
        Dnorm:=sqrt(dproj[i,i]);
        for j:=0 to Idimh do
        begin
            Dreduc[i,j]:=dproj[i,j]/dnorm;
            Dproj[i,j]:=Dproj[i,j]/Dproj[i,i];
        end;
        // lms1:=I;
        for Iline:=0 to I-1 do
            for Jcolon:=0 to (L div Incm) do
            begin
                Dproj[Iline,Jcolon]:=Dproj[Iline,Jcolon]-Dproj[I,Jcolon]*Dproj[Iline,I];
            end;
            i:=i-1;
        end
    else
        i:=i-1;
    end;
    writeln(qdata,'L:',I);
    For I:=Imins+1 to (Idimh)do
    begin
        mu:=Idimh-i+1;
        Dreduc[i,0]:=Dreduc[i,0]/DPISQD;
        B[l,mu,0]:=Dreduc[i,0];
        writeln(qdata,'B('',I','',mu','',',',0,')':,B[l,mu,0] );

        For j:= 1 to Idimh do
        begin
            Dreduc[i,j]:=Dreduc[i,j]/DPISQ;
            m:=j*Incm;
            B[l,mu,m]:=Dreduc[i,j];
            writeln(qdata,'B('',I','',mu','',',',m,')':,B[l,mu,m] );
        end;
    end;

    L:=L+LP;
    until L>Lmax;
    for i:=0 to Lmax do B[0,0,i]:=1;
    closefile(qdata);

end;

Procedure TBBL.KCubSym;
var
    IncL,NumPlanos,plano,IndexNHES,L,mu,nn,m1,m2,m3,n:integer;
    CT,CF,C:extended;

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

KCS:textfile;
begin
  assignfile(KCS,'c:\pat\FHK.txt');
  rewrite(KCS);
  Incl:=1;
  NumPlanos:=8;
  Lmax:=34;
  for plano:=1 to NumPlanos do
  begin
    L:=0;
    repeat
      IndexNHES:=NHES[1,L];
      while IndexNHES < 0 do
      begin
        L:=L+Incl;
        IndexNHES:=NHES[1,L];
      end;
      CT:=sqrt(L*4+2);
      for mu:=0 to NHES[1,L] do
      begin
        c:=0;
        for nn:=0 to (L div 4) do
        begin
          n:=nn*4;
          CF:=Q[L,0,0]*Q[L,0,n]*CT/2;
          m1:=2;
          if n=0 then m2:=2 else m2:=n;
          m3:=0;
          repeat
            if n=0 then m3:=0
              else if m2>m1 then m3:=m3+2
                else m3:=n;
            CF:=CF+Q[L,m2,m3]*Q[L,m1,0]*CT*cos(m1*degtorad(CubAngPHI[plano]));
            m1:=m1+2;
            if m1>m2 then begin
              if m2=m1 then m2:=m1 else m2:=m2+2;
            end;
            else if m1=L then m2:=m1;
          until m1 > L;
          C:=C+cos(n*DegtoRad(CubAngbeta[plano]))*CF*B[L,mu,n];
        end;
        CK[L,mu,plano]:=C;
        writeln(KCS,'L:',L,' mu:',mu,' P:',plano,C);
      end;
      L:=L+Incl;
    until L>Lmax;
  end;
closefile(KCS);

end;

procedure TBBL.CubSymClick(Sender: TObject);
begin
  csym;
end;

procedure TBBL.Button3Click(Sender: TObject);
var
  h1,k1,l1,h2,k2,l2:integer;
  a,c,p1,p2,phi:extended;
begin
  h1:=strtoint(edit1.text);
  k1:=strtoint(edit2.text);
  l1:=strtoint(edit3.text);
  h2:=strtoint(edit4.text);

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

k2:=strtoint(edit5.text);
l2:=strtoint(edit6.text);
a:=strtofloat(edit7.Text);
c:=strtofloat(edit8.Text);
P1:=(h1*h2+k1*k2)+((h1*k2+h2*k1) div 2) + ((3*a*a)/(4*c*c))*l1*l2;
P2:=sqrt((h1*h1+k1*k1+h1*k1+((3*a*a)/(4*c*c))*l1*l1)*
(h2*h2+k2*k2+h2*k2+((3*a*a)/(4*c*c))*l2*l2));
phi:=arccos(p1/p2);
edit10.text:=floattostr(phi);
phi:=rattodeg(phi);
edit9.Text:=floattostr(phi);
end;

```

Procedure TBBL.KNoCubSym;

```

var
KA:textfile;
Nplane,ist,ISMIN,i,JI,n1:integer;
ka1,ka2:string[9];
pl:array [1..12] of string[5];
//kangPhi,Kangbeta:extended;
Incl,NumPlanos,plano,IndexNHES,L,Lmin,Lmax,IM,M,mu,nn,m1,m2,m3,n:integer;
CT,CF,C,CM,CX,SI,CP,aj1,aj2:extended;
begin
assignfile(KA,'c:\pat\lib\KAngZn.dat');
reset(KA);
readln(ka,Nplane);
//Nplane:=12;
for i:=1 to Nplane do
begin
readln(KA,ka1,ka2,pl[i]);
kangphi[i]:=strtofloat(stringGrid1.Cells[1,i]);
kangbeta[i]:=strtofloat(StringGrid1.Cells[2,i]);
end;
closefile(KA);
i:=2; (*fator de multiplicidade*)
Incl:=2;
//NPlane:=8;
Lmin:=2;
Lmax:=34;
C:=1/sqrt(pi);
for plano:=1 to NPlane do
begin
L:=Lmin;
repeat
{ IndexNHES:=NHES[1,L];
while IndexNHES < 0 do
begin
L:=L+Incl;
IndexNHES:=NHES[1,L];
end; }
CT:=sqrt(L*4+2);
CM:=0;
if L mod 2 <> 0 then CM:=pi/2;
JI:=(L div I); //2, 3, 4, 5, etc...
for mu:=0 to JI {NHES[x,L]} do
begin
cx:=c;
M:=(MU)*i;
if M <= 0 then begin
CX:=C/sqrt(2);
CP:=0;
end
else CP:=0;
SI:=1;

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```

aj1:= ((M div 2)* 2) -M;
  If aj1 < 0 then begin
    CX:=-C;
    CP:=pi/2;
    aj1:= (((M-1) div 4) * 4)-M+1;
    aj2:= ((M div 4) * 4) - M;
    if (aj1 < 0) or (aj2 < 0) then SI:=-1;
  end;
aj1:=(L div 2) * 2;
if aj1 < L then begin
  ISMIN:=1;
  CF:=0;
end
else begin
  ISMIN:=2;
  n1:=m;
  CF:= Q[L,0,0]*Q[L,0,n1]*CT*SI/2;
end;
ist:=ismin;
if m=0 then begin
  m1:=2;
  m2:=0;
end
else begin
  m1:=m;
  m2:=2;
end;

repeat
  m3:=ist;
  CF:=CF+Q[L,m1,m2]*Q[L,m3,0]*CT*SI*cos(IST*KAngPhi[plano]-CP);
  if m<0 then begin
    if m2<m then m2:=m2+2 else m1:=m1+2;
  end
  else m1:=m1+2;
  ist:=ist+2;
until ist > L;

Nck[L,mu,plano]:=CF*CX+cos(M*DegtoRad(KAngbeta[plano])-CM);
end;

L:=L+Incl;
until L>Lmax;
end;
end;

procedure TBBL.BKcubClick(Sender: TObject);
begin
  KCubSym;
end;

procedure TBBL.BKNoCubClick(Sender: TObject);
begin
  KNoCubSym;
end;

procedure TBBL.FormCreate(Sender: TObject);
var
  KA:textfile;
  i,Nplane:integer;
  ka1,ka2:string[9];
  pl:array [1..12] of string[5];

begin

```

ANEXO B - CONTINUAÇÃO

```
assignfile(KA,'c:\pat\lib\KAngZn.dat');
reset(KA);
readln(ka,Nplane);
// Nplane:=12;
StringGrid1.Cells[1,0]:='Phi';
StringGrid1.Cells[2,0]:='Beta';
StringGrid1.Cells[3,0]:='Plane';
for i:=1 to Nplane do
begin
  readln(KA,ka1,ka2,pl[i]);
  //kangphi[i]:=strtofloat(stringGrid1.Cells[1,i]);
  // kangbeta[i]:=strtofloat(stringGrid1.Cells[2,i]);
  StringGrid1.Cells[0,i]:=inttostr(i);
  StringGrid1.Cells[1,i]:=ka1;
  StringGrid1.Cells[2,i]:=ka2;
  StringGrid1.Cells[3,i]:=pl[i];
end;
closefile(KA);
end;

procedure TBBL.RBNoCubicClick(Sender: TObject);
begin
  RBCubic.Checked:=False;
  RBNoCubic.Checked:=True;
  BKcub.Enabled:=false;
  BKnoCub.Enabled:=True;
end;

procedure TBBL.RBCubicClick(Sender: TObject);
begin
  RBCubic.Checked:=true;
  RBNoCubic.Checked:=false;
  BKcub.Enabled:=true;
  BKnoCub.Enabled:=false;
end;

END.
```