34
2 ej-

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DISPERSION DE NEUTRONES POR CAVIDADES ESFERICAS GRANDES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C O

P R E S E N T A :

HECTOR REYES SANABRIA

MEXICO, D. F. 1992

FALLA

I N D I C E

RESUMEN.

Una aleación a base de niquel, Nimonic 80A, fue sometida a un proceso de termofluencia y llevado a la fractura con el fin de generar cavidades para su posterior estudio con neutrones. Se uso un difractometro de doble cristal de alta resolución angular, utilizando la técnica de dispersión a ángulos muy pequeños para neutrones (VSANS). Se diseño un programa de computo que, junto con otros ya existentes, permitierón calcular el radio promedio de las cavidades en una zona cercana a la fractura, asi como la distribución de tamaños de las cavidades, que se esperaria observar en dicha muestra (≈ función Log-Normal). Este trabajo es comparado con la técnica de dispesión a ángulos pequeños convencional para neutrones (SANS) obteniendose valores aproximados, para el radio promedio de las cavidades, de una micra.

La técnica VSANS no emplea la aproximación de Born que se emplea en SANS ya que las cavidades del orden de $1\mu m$ son "grandes" de tal forma que el cambio de fase no puede ser despresiada. Sin embargo, con propósitos de comparación la técnica SANS puede ser considerada válida aún en este rango.

El objetivo de este trabajo consiste en introducir una técnica que permita calcular cavidades grandes con una mejor aproximación a la esperada por la técnica convencional SANS. Se elaboro, como parte de los objetivos, un programa de cómputo que permite evaluar la sección eficaz diferencial.

INTRODUCCION.

La técnica de dispersión denominada "Small Angle Neutron Scattering" (SANS) debe su nombre a la dispersión a ángulos pequeños o bien a pequeños valores del vector de dispersión $Q=k-k_0$ (donde k_0 y k son los vectores de onda de la radiación incidente y dispersada respectivamente) del orden Q entre 0.05 y 5 nm^{-1} (cavides del orden aprox. 0.01 μm) [Marton Ladislau, 1959]. SANS es una técnica que se inició en los 70s y ha sido ampliamente empleada para estudiar defectos en sólidos, soluciones coloidales, polímeros y biología molecular.

En el presente trabajo propongo una variante de la técnica SANS, y que llamaremos "Very Small Angle Neutron Scattering", o VSANS, empleada por primera vez por Weiss en 1951 [Weiss, 1951], en un rango Q entre 3×10^{-4}y 22×10^{-4} nm^{-1} [Schwähn y Palacios, s.f], donde no considerara la aproximación de Born para la sección eficaz diferencial; que está implicita en el método SANS. Como objetivo, intento obtener una mejor información que la técnica convencional SANS utilizando nuevos criterios, como es el caso de suponer una distribución de tamaños de cavidades en una muestra, y dados ciertos parámetros, encontrar el radio promedio de las cavidades. Se elaboro, como parte de los objetivos, un programa de cómputo que permite evaluar la sección eficaz diferencial.

Para este propósito he dividido el trabajo en cuatro capitulos. En el capitulo I, dado que se está analizando el caso de dispersión por cavidades, se presenta información referente a los dos principales mecanismos que dan lugar a la nucleación de cavidades; se justifica la distribución de cavidades que se sugiere para VSANS y que se encuentra en una muestra sometida a termofluencia; además se señalan algunas de las características importantes de la aleacion NIMONIC 80A, muestra a base de niquel que ha sido empleada para el presente estudio.

El capitulo II presenta el formalismo matemático que define la sección eficaz diferencial en la teoría cuántica. Además, he incluido dos subtemas que describen la técnica convencional SANS, y otro sobre la técnica que he denominado VSANS.

El capitulo III muestra el dispositivo experimental empleado.

Finalmente, en el capitulo IV se presentan los resultados experimentales, la discusión y los resultados obtenidos.

CAPITULO I

EVOLUCION DE CAVIDADES EN LOS MECANISMOS DE FRACTURA Y LA ALEACION NIMONIC 80A

INTRODUCCION

Es conveniente, ya que el trabajo de investigación analiza la dispersión por cavidades, esbozar los dos principales mecanismos que dan origen a la fractura en sólidos debido a la nucleación, crecimiento y conglutinación de microcavidades o grietas. El presente capitulo no pretende investigar a partir de los resultados obtenidos (capítulo IV), qué tipo de ellos intervienen en las muestras, o confirmar algunos de ellos. Sencillamente, se hace referencia a los resultados que otros autores han observado en sus investigaciones sobre la aleación NIMONIC 80A (que es la que se emplea en esta investigación) en lo referente al tipo de fractura que presenta esta aleación. Además, discutiremos el tipo de distribución y tamaño de cavidades de que hasta el momento se tiene conocimiento y que se encuentran en una muestra que fue llevada a la fractura.

1.1 CAVITACION.

Dentro de los mecanismos de fractura [M. F. Ashby, et. al, 1979] (Fig. 1.1.1), resaltan por dar origen a la evolución de cavidades, las fracturas intergranular y transgranular. La fractura, generalmente dúctil para la nucleación de cavidades, usualmente sigue un camino transgranular, pero si la densidad de inclusiones o de agujeros preexistentes es alta en el límite del grano, entonces la trayectoria puede seguir la frontera dando lugar a una fractura intergranular dúctil como se verá a continuación. Además, las fracturas transgranular e intergranular dúctil a altas temperaturas (termofluencia), son aproximadamente las mismas que las fracturas transgranular e intergranular dúctil a baja temperatura.

DISTINTAS CLASES DE MECANISMOS DE FRACTURA

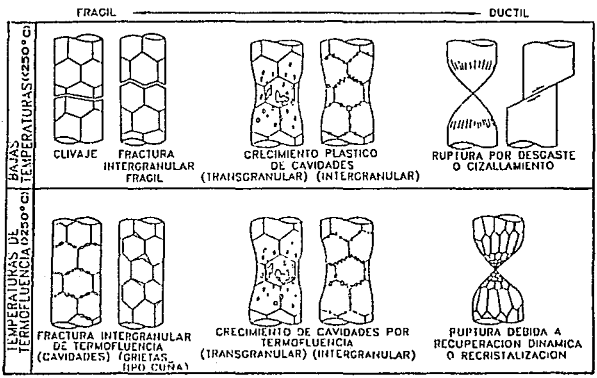


FIG. 1.1.1.- CLASIFICACION DE LOS MECANISMOS DE FRACTURA. LA HILERA SUPERIOR SE REFIERE A BAJAS TEMPERATURAS (<250 °C) DONDE LA FLUENCIA PLASTICA NO DEPENDE MUCHO DE LA TEMPERATURA O DEL TIEMPO: LA HILERA INFERIOR SE REFIERE AL RANGO DE TEMPERATURA (>250 °C) EN QUE LOS MATERIALES ESTAN EN TERMOFLUENCIA. FUENTE: M. F. ASHBY, et. al, 1979.

FRACTURA TRANSGRANULAR:

Cuando no hay clivaje (separacion del cristal sobre un plano cristalográfico), los sólidos policristalinos pueden fallar en forma dúctil por un camino transgranular. Los huecos nuclean en inclusiones: la inclusión perturba el campo de desplazamiento elástico y plástico en un cuerpo deformado; la perturbación concentra la tensión de la inclusión causando un rompimiento en la interface de la matriz, de este modo se nuclean los huecos; además la plasticidad hace que ellos crezcan, y cuando son lo bastante grandes o cuando el especimen mismo llega a ser mecánicamente inestable, se unen y el material, en consecuencia, fractura, (figura 1.1.2).

FRACTURA TRANSGRANULAR DUCTIL

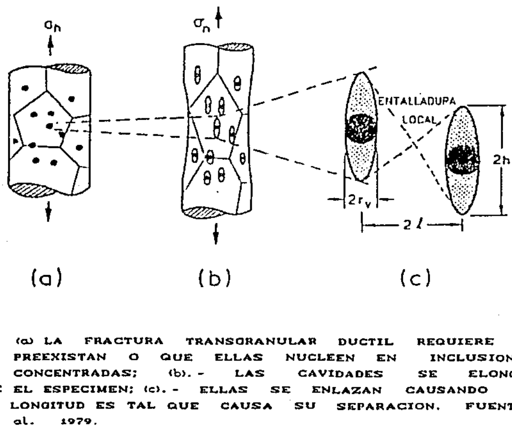


FIG. 1.1.2. (a) LA FRACTURA TRANSGRANULAR DUCTIL REQUIERE QUE LAS CAVIDADES PREEXISTAN O QUE ELLAS NUCLEEN EN INCLUSIONES CON TENSIONES CONCENTRADAS; (b). - LAS CAVIDADES SE ELONGAN AL EXTENDERSE EL ESPECIMEN; (c). - ELLAS SE ENLAZAN CAUSANDO FRACTURA CUANDO SU LONGITUD ES TAL QUE CAUSA SU SEPARACION. FUENTE: M.F. ASHBY et. al. 1979.

FRACTURA INTERGRANULAR:

A bajas tensiones y a grandes tiempos de fractura, se observan transiciones de fractura transgranular a intergranular. Dentro de este nuevo régimen, la frontera del grano se desliza, dando origen a grietas cuñadas o crecimiento de huecos en la frontera, aproximadamente al eje tensil (figura 1.1.3). Una vez que se ha producido una grieta, la concentración de esfuerzos en los extremos de la grieta genera la deformación plástica de estas regiones en bandas de cizallamiento[1]. Debido a que la deformación dentro de las bandas es muy intensa, éstas se llenan de orquedades[2]. Según crecen las orquedades en estas bandas (capas de orquedades), golpean eventualmente unas con otras, de tal forma que se forman nuevas bandas de cizallamiento; la repeticion de este proceso actúa para extender la grieta a través de la sección transversal de la probeta, en donde la banda de cizallamiento regresa a la región de máxima concentración de esfuerzos, en un metal dúctil; la fractura final puede ocurrir por varios caminos, uno produce una copa y cono y otro una doble copa.

1.2 NIMONIC 80A.

Las aleaciones a base de níquel han sido y están siendo ampliamente estudiadas. Son frecuentemente usadas en componentes que operan a altas temperaturas y tensiones muy severas (tales como las aspas de turbinas de gas). En particular, la aleación NIMONIC 80A, cuya composición química aparece en la Tabla 1.2.1, es el objeto de estudio en el presente trabajo.

1.- Cizallamiento: desgaste o formación de zonas concentradas de esfuerzo cortante.

2.- Aglutinamiento de agujeros.

FRACTURA INTERGRANULAR

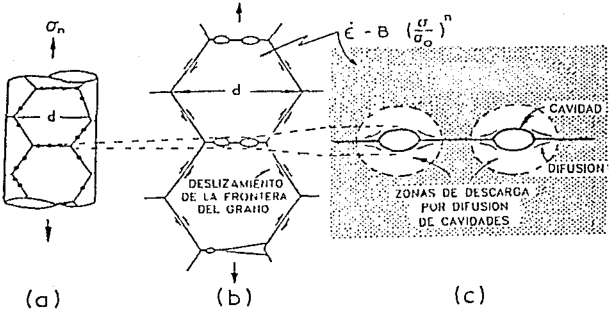


FIG. 1.1.3.- (a).- EL DESLIZAMIENTO DE LA FRONTERA DEL GRANO ESTIMULA LA NUCLEACION; CAVIDADES; (b).- FRONTERA DE LAS CAVIDADES; (c).- LOS HUECOS CRECEN POR DIFUSION. FUENTE: M.F. ASHBY, et. al, 1979.

TABLA 1.2.1.- COMPOSICION QUIMICA DE LA ALEACION NIMONIC 80A[3].

C %	Si %	Mn %	Cr %	Fe %	Ti %	Al %	Ni %
0.045	<0.02	<0.02	20.2	0.45	2.44	1.12	75.59

FUENTE: RÖCHLING-BURBACH, VÖLKLINGEN (DATOS DEL FABRICANTE).

3.- La aleación NIMONIC 80A presenta típicamente estos elementos; sin embargo, pueden tener un ligera variación en lo referente al porcentaje. Véase. p.e. D. McLEAN, Op. Cit, 1956.

Algunas investigaciones de fractura en termofluencia de la aleación NIMONIC 80A [ASHBY et. al, 1979] revelan lo siguiente. En el rango de temperatura de 600 a 900 °C y a altas tensiones, la fractura es transgranular. Cuando la tensión es reducida el material muestra grietas cuñadas y la fracura llega a ser cada vez más intergranular. Debajo de 240 MPa, el modo de fractura cambia de grietas cuñadas a cavidades (que aparecen al nuclear sobre partículas de carburo) y la fractura es completamente intergranular. Predeformado a temperatura ambiente reduce el tiempo de vida de termofluencia y estimula la ruptura por prenucleación de huecos sobre las fronteras del grano. Más explícitamente D. McLean [A note on the metallography of cracking during creep, 1956] obtuvo algunos resultados importantes que revelan el tipo de fractura que predomina dadas ciertas condiciones de presión y temperatura en la aleación NIMONIC 80A, Tabla 1.2.2. Estos fueron utilizados para la elaboración de los mapas de fractura [ASHBY et. al.,1979] que muestran el dominio del campo de un micromecanismo dado de fractura, clivaje, ductilidad y fracturas transgranular e intergranular. Uno conocido con el nombre de mapas de fractura de primer orden, con ejes del mapa tensión y temperatura (Fig. 1.2.1). Un segundo conocido como mapas de fractura de segundo orden con ejes tensión y tiempo (este último no se muestra).

Finalmete mostramos en la figura 1.2.2 otros resultados obtenidos por C.W. Weaver [Influence of Heat-Treatment and Composition..., 1959] sobre la dependencia de la temperatura en termofluencia sobre la formación de cavidades en aleaciones tipo NIMONIC 80 A. En ellas se exhiben claramente los dos tipos de formación de cavidades transgranular e intergranular.

TABLA 1.2.2- ALGUNOS DATOS EXPERIMENTALES RELATIVOS A LA ALEACION NIMONIC 80A REALIZADOS EN ESTUDIOS DE CAVITACION

Marca	Temp. en °C	Tensión MP (N/m²)	Tiempo de Fractura hr.	Elongación sobre 5.08 cm	Tipo predominante de Cavidad*	Tipo de Fractura+
SMW 8C2	700	532	$19\frac{1}{2}$	$3\frac{1}{2}$%	a	Princip. tg
" 5C2	700	425.6	$161\frac{1}{2}$	$4\frac{1}{2}$%	a + b	tg+ig
" 6C3	700	304	1217	$1\frac{1}{2}$%	b + a	ig+tg
" 1C2	700	228	4584	2 %	b + a	ig+tg
" 8C3	750	365	$23\frac{1}{2}$	$6\frac{1}{2}$%	a + b	tg
" 6C2	750	304	$73\frac{1}{2}$	6 %	a + b	tg+ig
" 11C3	750	152	3110	2 %	b	ig+tg
" 12C2	815	228	$26\frac{1}{2}$	$4\frac{1}{2}$% sobre $\sqrt[4]{A}$ $6\frac{1}{2}$% 11% sobre $\sqrt[4]{A}$	a + b	ig+tg
" 9C2	815	61	4275	No medido	b	ig+tg
" 17C1	1000	30.4	$22\frac{1}{2}$	85% sobre 4.2 cm	Incierto	Incierto
" 16C2	1000	15.2	199	51% sobre $\sqrt[4]{A}$	b	"

* EL TIPO a SON CAVIDADES EN FORMA DE CUÑA LOCALIZADO EN UNA ESQUINA DEL GRANO. EL TIPO b SON CAVIDADES AISLADAS QUE OCURREN EN CUALQUIER PARTE A LO LARGO DE LA FRONTERA DEL GRANO.

+ig=FRACTURA INTERGRANULAR; tg=FRACTURA TRANSGRANULAR.

FUENTE: D. MCLEAN, 1956.

MAPA DE FRACTURA DE PRIMER ORDEN

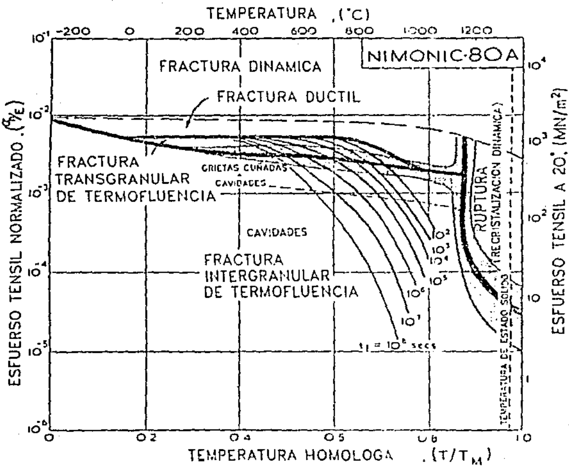


FIG. 1.2.1. - MAPA DE FRACTURA DE PRIMER ORDEN PARA EL NIMONIC 80A. SE MUESTRAN ALGUNAS DE LAS FALLAS DEBIDAS A LOS ALTOS NIVELES DE TENSION EN UN CAMPO GRANDE DE FRACTURA INTERGRANULAR Y RUPTURA. EL CAMPO DE FRACTURA INTERGRANULAR DE TERMOFLUENCIA ESTA DIVIDIDO EN SUBDIVISIONES DEL EJE DE AGRIETAMIENTO Y LA CAVITACION. FUENTE: M.F. ASHBY, et. al, 1979.

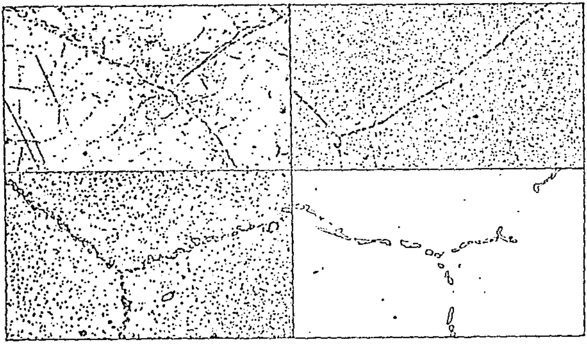


FIG. 1.2.2 INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA SOBRE MICROESTRUCTURAS. MUESTRAS A 1200°C,Y TEMPLADAS EN AGUA: (a) 850, (b) 900, (C)950, (d) 1000 °C. x 750. FUENTE: C. W. WEAVER, 1960.

1.3 DISTRIBUCION LOG-NORMAL.

El tipo de distribución de tamaños de cavidades, que se observan, en los mecanismos de fractura intergranular y transgranular, según algunos autores [I. W. Chen y A. Argon, 1981], se asemeja a una distribución de Poisson (para una muestra de acero forjado 304). Sin embargo, apoyándonos en trabajos realizados por M. S. YANG, et.al., [Small Angle Neutron Scattering Studies..., 1984], referentes a la distribucion a que obedecen las cavidades en una muestra de cobre sometida a un proceso de termofluencia[4] , Fig. 1.3.1 (donde he añadido a esta figura el comportamiento de la distribución Log-Normal para distintos parametros). Sugiero la distribución Log-Normal[5], Ec. 1.3.1.

$$n(R)= \frac{np}{R\sqrt{2\pi}\sigma}\, e^{-\ln^2(\hat{R}/R)/2\sigma^2} \qquad 1.3.1$$

Hasta este momento no es sabido de que se haya estudiado metalograficamente la distribución de tamaños de cavidades en el NIMONIC 80A, así que supondre que dicha distribución simula la distribución de cavidades en la aleación NIMONIC 80A. Nuevamente, no se pretendemos investigar a partir de los resultados (capitulo IV) si efectivamente esta distribución interviene en las muestras. Solamente se hace referencia a los resultados que otros autores han observado en sus investigaciones sobre otras aleaciones y justificar, asi, el uso de esta distribución.

4.-YANG utilizo el metodo de Schmidt [FERDOVA. I. S., 1978] para obtener la distribución de tamaños de las cavidades, N(R) v.s. R.

5.- Esta ecuación es fácilmente derivable de la distribución normal estándar; véase apéndice D.

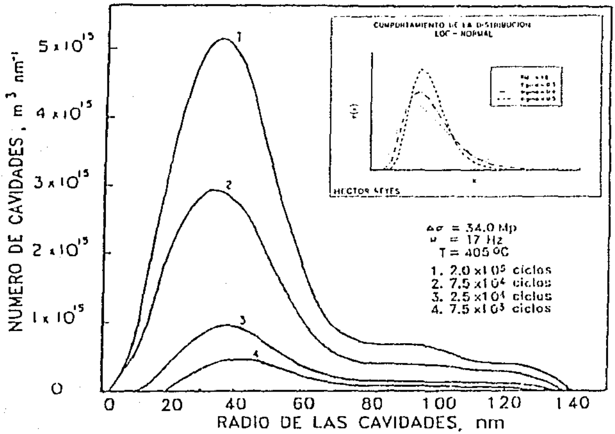


FIG. 1.3.1.- DISTRIBUCION DE CAVIDADES N(R) VS R EN Cu PREFATIGADO SOMETIDO A TENSIONES DE DESLIZAMIENTO DE 34.0 MPa , T= 405 °C Y SOMETIDO A CICLOS DE 17 Hz. OBTENIDOS POR M. S. YANG. LAS CURVAS ENCERRADAS EN EL RECUADRO. AÑADIDO POR MI, MUESTRA LA EVOLUCION DE LA FUNCION DE DISTRIBUCION LOG-NORMAL, QUE SEGUN PUEDE VERSE, SE ASEMEJA EN FORMA CUALITATIVA A LOS OBTENIDOS POR YANG. FUENTE: M. S. YANG, et. al., 1984.

CAPITULO II

DISPERSION POR CAVIDADES.

INTRODUCCION

Para el estudio de cavidades hare uso de la llamada tecnica "Small Angle Neutron Scattering" (SANS) y la técnica que llamaremos "Very Small Angle Neutron Scattering" (VSANS), que propongo, lo que hace necesario mostrar sus principales relaciones matemáticas que permiten obtener información sobre el tamaño de las cavidades, forma y número de dispersores dentro de úna muestra. Para ello, primeramente mostramos el formalismo que permite obtener de la mecánica cuántica la sección eficaz diferencial.

2.1 SECCION EFICAZ DIFERENCIAL.

Un método de exploración de que se dispone para investigar la estructura de la materia consiste en el bombardeo de "particulas proyectil" a "particulas blancos" y el subsecuente análisis de los resultados de la interacción ocurrida bajo circunstancias controladas. El problema que plantea el choque, como cualquier problema de dos cuerpos, en términos cuánticos, puede reducirse al análisis de la dispersión de una particula por un potencial $V(r)$. Si la particula blanco es mucho más masiva que la particula proyectil las coordenadas relativas y la coordenada al centro de masa casi coinciden. Consideremos que el choque entre particulas es elástico.

Calculemos la probabilidad de que, como resultado de la colisión, las partículas se dispersen formando tal o cual ángulo.

Representamos una particula libre (particula proyectil), que se mueve en sentido positivo del eje z por una onda plana, incidiendo hacia la partícula blanco, que escribiremos en la forma

$$\psi_{inc}=e^{ikz} \qquad 2.1.1$$

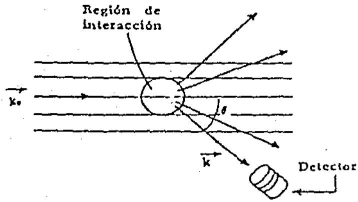
donde $k={}^{p}/_{\hbar}$

La partícula dispersada puede representarse por una onda esférica divergente de la forma

$$\psi_{sc}= f(\theta)\ \frac{e^{ikr}}{r} \qquad 2.1.2$$

donde $f(\theta)$ es una cierta funcion del ángulo de dispersión θ (ángulo formado por el eje z y la dirección de la particula dispersada); esta función es conocida como Amplitud de Dispersión (es la amplitud de probabilidad de que la partícula incidente emerja a lo largo de la dirección $\hat{e}$,como resultado de la colisión). De esta manera, la función de onda (que es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) tiene a grandes distancias, cuando r tiende a infinito, el comportamiento asintótico, Fig. 2.1.1.a.

$$\psi_{TOTAL}\approx e^{ikz}+f(\theta)e^{ikr}/r \qquad 2.1.3$$



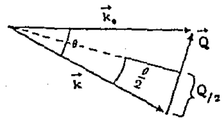


FIG 2.1.1. (a).- ONDAS INCIDENTE Y DISPERSADA. EC. 2.1.3; b).- EL VECTOR Q REPRESENTA EL IMPULSO PROMEDIO INTERCAMBIADO ENTRE EL BLANCO Y EL PROYECTIL CUANDO LAS PARTICULAS SON DISPERSADA EN LA DIRECCION $\hat{e}_r$

En esta expresión, el parámetro k en onda plana es la magnitud del impulso k_o de las particulas incidentes ($k_o = \hat{a}_z k$); la k en la componente dispersada (onda esférica) es la magnitud del impulso k de las particulas dispersadas; el que, para distancias muy grandes del blanco, está orientado esencialmente en la dirección $\hat{e}_r = r/r$. Como se ha supuesto que la dispersión es elástica, ambas magnitudes coinciden, $|k_o| = |k| = k$. Sin embargo, como estos vectores son diferentes, resulta que el blanco intercambia con el proyectil un impulso medio Q tal que

$$k_o = k + Q \tag{2.1.4}$$

La magnitud Q del impulso transferido se determina fácilmente. En la figura 2.1.1.b, en donde θ es el ángulo de dispersión puede verse que

$$Q=2k\,\mathrm{sen}(\theta/2) \qquad 2.1.5$$

Q es conocido como el vector de dispersión.

Para encontrar la probabilidad $d\sigma$ relativa de que la partícula emerja en un ángulo sólido $d\Omega$, consideremos, por definición, el flujo de probabilidad[6] (o densidad de corriente):

$$\mathbb{J}=\frac{\hbar}{2mi}(\psi^{*}\nabla\psi-\psi\nabla\psi^{*}) \qquad 2.1.6$$

así , el flujo de probabilidad de la onda incidente es:

$$\mathbb{J}_{inc}=\frac{\hbar}{2mi}\left[e^{-ikz}(ike^{ikz})-e^{ikz}(-ike^{-ikz})\right]$$

$$= {}^{k\hbar}/_{m} \qquad 2.1.7$$

y dado que $k=p/\hbar \Rightarrow k\hbar=p$

$$\therefore \qquad \mathbb{J}_{inc}=\frac{p}{m} \qquad 2.1.8$$

ya que la onda dispersada es una onda esférica, calculemos su flujo en coordenadas esféricas[7]. De la Ec. 2.1.2 puede demostrarse que el flujo dispersado es:

$$\mathbb{J}_{sc}=\frac{\hbar}{2mi}\left[(\hat{e}_r|f(\theta)|^2(\frac{ikr-1}{r^3})+\hat{e}_\theta\ \frac{1}{r^3}f^{*}(\theta)\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}+0\hat{e}_\phi\right)$$

6.- Véase, B. H. Bransden and W.A. Benjamin, s.f. p.4

7.- $\nabla\psi=\left[\hat{e}_r\ \frac{\partial}{\partial r}+\hat{e}_\theta\ \frac{1}{r}\ \frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r\,\mathrm{sen}(\theta)}\ \hat{e}_\phi\ \frac{\partial}{\partial\phi}\right]\psi$ en coordenadas esféricas. Véase Robert Eisberg y Robert Resnick, 1986, pag., 807.

$$-\left(\hat{e}_r\,|f(\theta)|^2\left(\frac{-ikr-1}{r^3}\right)+\hat{e}_\theta\,\frac{1}{r^3}f(\theta)\frac{\partial f^*(\theta)}{\partial\theta}+0\hat{e}_\phi\right)\Bigg]$$

$$=\frac{h}{2mi}\left[\left(|f(\theta)|^2\,\frac{2ik}{r^2}\right)\hat{e}_r+\frac{1}{r^3}\left(f^*(\theta)\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}-f(\theta)\frac{\partial f^*(\theta)}{\partial\theta}\right)\hat{e}_\theta+0\hat{e}_\phi\right]$$

pero, para r grande podemos despreciar el termino $1/r^3$, por lo que

$$J_{sc}=\frac{h}{2mi}\left[|f(\theta)|^2\,\frac{2ik}{r^2}\right]\hat{e}_r\;=\;\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}\,\frac{hk}{m}\,\hat{e}_r$$

$$\therefore\; J_{sc}=\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}\,\frac{p}{m}\,\hat{e}_r \qquad 2.1.9$$

Pero, la probabilidad por segundo de que la particula atraviese el elemento de superficie ds despues de la colision es $J_{sc}\cdot ds$. Si ds se encuentra a una distancia r del origen, entonces

$$J_{sc}\cdot ds\;=\;\frac{p}{m}\,|f(\theta)|^2\,\frac{\hat{e}_r\cdot ds}{r^2}\;=\;\frac{p}{m}|f(\theta)|^2 d\Omega \qquad 2.1.10$$

ya que $\hat{e}_r\cdot ds=r^2d\Omega$, donde $d\Omega$ es el ángulo sólido subtendido en el origen por ds. Finalmente, la probabilidad $d\sigma$ relativa de que la particula emerja en el ángulo sólido $d\Omega$ será

$$d\sigma=\frac{J_{sc}\cdot ds}{|J_{inc}|}=\frac{\frac{p}{m}|f(\theta)|^2d\Omega}{\frac{p}{m}}=|f(\theta)|^2\,d\Omega \qquad 2.1.11$$

La cantidad $d\sigma$ tiene dimensiones de área y es conocida como Sección Eficaz Diferencial para la dispersión en el elemento de ángulo sólido $d\Omega$ en $\hat{e}_r$. La cantidad $|f(\theta)^2|$, simbólicamente se puede escribir como $d\sigma/d\Omega$:

$$\boxed{d\sigma/d\Omega = |f(\theta)|^2} \qquad 2.1.12$$

$d\sigma$ es el área efectiva transversal en la región de interacción que intercepta el flujo de probabilidad de la onda incidente y la transfiere al ángulo sólido $d\Omega$, figura 2.1.2.

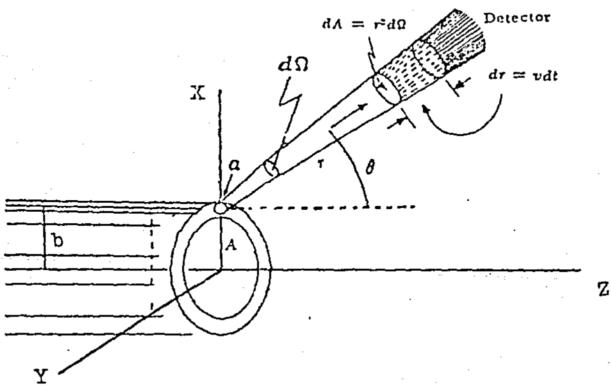


FIG. 2.1.2 LA FRACCION $d\sigma$ DE LAS PARTICULAS QUE INCIDEN SOBRE EL BLANCO DE AREA A SON DISPERSADAS SOBRE EL DETECTOR. ALTERNATIVAMENTE, TODAS LAS PARTICULAS QUE INCIDEN SOBRE EL AREA EFECTIVA a DEL BLANCO SON DISPERSADAS SOBRE EL DETECTOR. EN ESTE CASO $a=d\sigma$ REPRESENTA LA SECCION EFICAZ DE DISPERSION EN LA DIRECCION DEL DETECTOR.

Lo que sigue es, entonces, proporcionar un método para calcular amplitudes de dispersión, pero restringiendo la atención a potenciales esféricamente simétricos y considerando estados de momento angular definidos l.

Como primer paso expresemos la onda plana incidente (partícula libre) en términos de armónicos esféricos[8].

Si uno escoge el eje z a lo largo de k, esta onda (Ec. 2.1.1) puede ser escrita de la forma $e^{(ikr\cos\theta)}$; que es independiente de ϕ. Haciendo los siguientes cambios de variable: ρ=kr, μ=cosθ, la expresión de la onda plana se reduce a una expresión en una serie de polinomios de Legendre[9]

$$e^{i\rho\mu} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho) P_l(\mu) \qquad 2.1.13$$

donde $j_l(\rho)$ es la función de Bessel esférica y es solución de la ecuación radial de la ecuación de Schrödinger para un potencial[10]

8.- Todas las eigenfunciones de energía de la partícula libre están infinitamente degeneradas. Dado que las ondas esféricas $Y_l^m(\theta,\phi) j_{k}(kr)$ forman un conjunto completo, el conjunto enteramente numerable de ondas esféricas correspondientes a un valor dado de la onda número k, atraviesan el espacio de las eigenfunciones de energía $E=k^2\hbar^2/2m$; por lo tanto, la onda plana $e^{ik\cdot r}$ puede ser expandida en series de esas funciones como:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm} Y_l^m(\theta,\phi) \; j_{kl}(r)$$

donde $Y_l^m(\theta,\phi) = \Phi(\phi)\Theta(\theta) = C_{l,m} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$. Véase apéndice C.

9.- Véase apéndice C.

10.- Véase apéndice C.

V(r)=0 y cuya solución asintótica es

$$j_l \approx a_l \frac{\text{sen}(kr-\frac{1}{2}l\pi)}{kr} \qquad 2.1.14$$

y $P_l(\mu)$ son los polinomios de Legendre (solución de la parte angular de la ecuación de Schrödinger).

Para determinar el coeficiente C_l, uno puede proceder como sigue: diferenciando las series 2.1.13, término por término con respecto a ρ, obtendremos que

$$\frac{d}{d\rho}\, e^{i\rho\mu} = \frac{d}{d\rho} \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho) P_l(\mu)$$

$$\Rightarrow \quad i\mu\, e^{i\rho\mu} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l \frac{d}{d\rho}(j_l(\rho))\; P_l(\mu) \qquad 2.1.15.a$$

$$= i \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho) \mu P_l(\mu) \qquad 2.1.15.b$$

tomando en cuenta la relación de recurrencia (apéndice C) de los polinomios de Legendre con m=0

$$(2l+1)\mu P_l = (l+1)P_{l+1} + lP_{l-1} \qquad C.30$$

así que

$$\mu P_l = \frac{(l+1)P_{l+1} + lP_{l-1}}{(2l+1)}$$

$$= \frac{(l+1)}{(2l+1)} P_{l+1} + \frac{l}{(2l+1)} P_{l-1}$$

por lo que 2.1.15b se transforma en

$$i\mu e^{i\rho\mu} = \underbrace{i\sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho)\left(\frac{l+1}{2l+1}\right) P_{l+1}}_{a} + \underbrace{i\sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho)\left(\frac{l}{2l+1}\right) P_{l-1}}_{b}$$

donde

$$a = i\sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho) \left(\frac{l+1}{2l+1}\right) P_{l+1}$$

sea $l=l'-1$

$$\Rightarrow\ a = i\sum_{l'=1}^{\infty} C_{l'-1} j_{l'-1}(\rho) \left(\frac{(l'-1)+1}{2(l'-1)+1}\right) P_{(l'-1)+1}$$

$$= i\sum_{l'=1}^{\infty} C_{l'-1} j_{l'-1}(\rho) \left(\frac{l'}{2l'-1}\right) P_{l'}$$

$$= i\sum_{l=0}^{\infty} C_{l-1} j_{l-1}(\rho) \left(\frac{l}{2l-1}\right) P_{l}$$

$$b = i\sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(\rho) + \left(\frac{l}{2l+1}\right) P_{l-1}$$

sea $l=l'+1$

$$\Rightarrow\ b = i\sum_{l'=-1}^{\infty} C_{l'+1} j_{l'+1}(\rho) \left(\frac{l'+1}{2(l'+1)+1}\right) P_{(l'+1)-1}$$

$$= i\sum_{l'=-1}^{\infty} C_{l'+1} j_{l'+1}(\rho) \left(\frac{l'+1}{2l'+3}\right) P_{l'}$$

$$= i\sum_{l=0}^{\infty} C_{l+1} j_{l+1}(\rho) \left(\frac{l+1}{2l+3}\right) P_{l}$$

donde para a el coeficiente se hace cero en $l=0$ y no contribuye a la suma y en b para $l=-1$ nuevamente se hace cero y no contribuye a la suma. Por lo tanto,

$$i\mu e^{i\rho\mu}=i\sum_{l=0}^{\infty}\left[C_{l-1}J_{l-1}(\rho)\left(\frac{l}{2l-1}\right)P_l+C_{l+1}J_{l+1}(\rho)\left(\frac{l+1}{2l+3}\right)P_l\right] \qquad 2.1.16$$

nuevamente, tomando en cuenta la relación de recurrencia, Ec. C.46 y C.47 , apéndice C, tenemos:

$$(2l+1)J_l=\rho[J_{l+1}+J_{l-1}] \qquad C.46$$

$$J_{l-1}=\left[\frac{d}{d\rho}+\frac{l+1}{\rho}\right]J_l \qquad C.47$$

de C.47

$$\frac{d}{d\rho}J_l=J_{l-1}-\frac{l+1}{\rho}J_l$$

sustituyendo C.46 en la ecuación anterior se tiene

$$\frac{d}{d\rho}J_l=J_{l-1}-\frac{l+1}{\rho}\left(\frac{\rho}{(2l+1)}\left[J_{l+1}+J_{l-1}\right]\right)$$

$$=\frac{l}{2l+1}J_{l-1}-\frac{l+1}{2l+1}J_{l+1}$$

sustituyendo en 2.1.15a, e igualando con 2.1.16 (2.1.15b), tenemos

$$\sum_{l=0}^{\infty} C_l \left[\frac{l}{2l+1} j_{l-1} - \frac{l+1}{2l+1} j_{l+1}\right] P_l = i \sum_{l=0}^{\infty} \left[C_{l-1} j_{l-1} \left[\frac{l}{2l-1}\right] P_l + C_{l+1} j_{l+1} \left[\frac{l+1}{2l+3}\right] P_l\right]$$

$$\Rightarrow \quad \left[\frac{l}{2l+1} C_l - i \frac{l}{2l-1} C_{l-1}\right] j_{l-1} = \left[\frac{l+1}{2l+1} C_l + i \frac{l+1}{2l+3} C_{l+1}\right] j_{l+1}$$

$$\Rightarrow \quad l \left[\frac{1}{2l+1} C_l - i \frac{1}{2l-1} C_{l-1}\right] j_{l-1} = (l+1) \left[\frac{1}{2l+1} C_l + i \frac{1}{2l+3} C_{l+1}\right] j_{l+1}$$

Para que pueda satisfacerse esta ecuación para cualquier ρ, es necesario y suficiente que las expresiones entre paréntesis desaparezcan o que:

$$\frac{1}{2l+1} C_l = i \frac{1}{2l+1} C_{l-1} \quad \text{con} \quad l=0,1,2,3,\ldots,\infty \qquad 2.1.17$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad C_l &= i \frac{2l+1}{2l-1} C_{l-1} \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2(l-1)+1}{2(l-1)-1} C_{l-2} \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2(l-1)+1}{2(l-1)-1} \cdot i \frac{2(l-2)+1}{2(l-2)-1} C_{l-3} \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2(l-1)+1}{2(l-1)-1} \cdot i \frac{2(l-2)+1}{2(l-2)-1} \cdots i \frac{2(l-(l-1))+1}{2(l-(l-1))-1} C_0 \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2l-1}{2l-3} \cdot i \frac{2l-3}{2l-5} \cdots i \frac{5}{3} \cdot i \frac{3}{1} C_0
\end{aligned}$$

$$\therefore \quad C_l = i^l (2l+1) C_0 \qquad 2.1.18$$

El coeficiente C_0 es igual a 1, Ec. 2.1.13 para $\rho=0$; dado sustituyendo en 2.1.15a, e igualando con 2.1.16 (2.1.15b), tenemos

$$\sum_{l=0}^{\infty} C_l \left(\frac{l}{2l+1} j_{l-1} - \frac{l+1}{2l+1} j_{l+1}\right) P_l = i \sum_{l=0}^{\infty} \left[C_{l-1} j_{l-1} \left(\frac{l}{2l-1}\right) P_l + C_{l+1} j_{l+1} \left(\frac{l+1}{2l+3}\right) P_l\right]$$

$$\Rightarrow \quad \left(\frac{l}{2l+1} C_l - i \frac{l}{2l-1} C_{l-1}\right) j_{l-1} = \left(\frac{l+1}{2l+1} C_l + i \frac{l+1}{2l+3} C_{l+1}\right) j_{l+1}$$

$$\Rightarrow \quad l \left(\frac{1}{2l+1} C_l - i \frac{1}{2l-1} C_{l-1}\right) j_{l-1} = (l+1) \left(\frac{1}{2l+1} C_l + i \frac{1}{2l+3} C_{l+1}\right) j_{l+1}$$

Para que pueda satisfacerse esta ecuación para cualquier ρ, es necesario y suficiente que las expresiones entre paréntesis desaparezcan o que:

$$\frac{1}{2l+1} C_l = i \frac{1}{2l+1} C_{l-1} \quad \text{con} \quad l=0,1,2,3,\dots,\infty \qquad 2.1.17$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad C_l &= i \frac{2l+1}{2l-1} C_{l-1} \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2(l-1)+1}{2(l-1)-1} C_{l-2} \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2(l-1)+1}{2(l-1)-1} \cdot i \frac{2(l-2)+1}{2(l-2)-1} C_{l-3} \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2(l-1)+1}{2(l-1)-1} \cdot i \frac{2(l-2)+1}{2(l-2)-1} \cdot \ldots \cdot i \frac{2(l-(l-1))+1}{2(l-(l-1))-1} C_o \\
&= i \frac{2l+1}{2l-1} \cdot i \frac{2l-1}{2l-3} \cdot i \frac{2l-3}{2l-5} \cdot \ldots \cdot i \frac{5}{3} \cdot i \frac{3}{1} C_o
\end{aligned}$$

$$\therefore \quad C_l = i^l (2l+1) C_o \qquad 2.1.18$$

El coeficiente C_o es igual a 1, Ec. 2.1.13 para $\rho=0$; dado

$j_l(0)=\delta_{l,o} \quad C_o=1.$

Concluyendo, la expansión de la onda plana puede ser escrita como

$$e^{i\rho\mu} = \sum_{l=o}^{\infty} i^l(2l+1)j_{kl}(kr)P_l(\mu) \qquad 2.1.19$$

sustituyendo 2.1.14 se tiene

$$\Rightarrow \boxed{e^{ikr\cos(\theta)}=\sum_{l=o}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{\text{sen}(kr-\frac{1}{2}l\pi)}{kr}} \qquad 2.1.20.a$$

por lo tanto

$$e^{ikz}=\sum_{l=o}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\left[e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}-e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}\right] \qquad 2.1.20.b$$

esta es la expansión de la onda plana en terminos de polimomios de Legendre.

Bajo el resultado anterior calculemos, entoces, la amplitud de dispersión.

Dado que la forma general de una solución de la ecuación de Schrödinger (Ec. 2.1.3)

$$\psi_{TOTAL}\approx e^{ikz}+f(\theta)e^{ikr}/r$$

que presente simetría axial (respecto del eje z), debe ser la solución que describe la dispersión esta puede ser escrita como una suma de productos $R_l(r)P_l(\cos\theta)$ al igual que la Ec. 2.1.13 pero ahora $R_l(r)$ corresponde a la solución radial de la ecuación de Schrödinger bajo un potencial $V(r)$ (véase apéndice C). Cuya solución asintótica es

$$R_l(r) \approx \frac{\operatorname{sen}(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)}{kr} \qquad 2.1.21$$

De acuerdo con esto, al igual que la Ec. 2.1.20, escribiremos la solución general asintótica para ψ_{TOTAL} en la forma:

$$\psi_{TOTAL} \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) A_l P_l(\cos\theta) \frac{\operatorname{sen}(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)}{kr} \qquad 2.1.22.a$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) A_l P_l(\cos\theta) \frac{i}{2kr} \left[e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)} - e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)} \right]$$

2.1.22.b

Los coeficientes A_l deben elegirse de tal manera que esta función tenga la forma de la ecuación 2.1.3.

$$\psi_{TOTAL} \approx e^{ikz} + f(\theta) e^{ikr}/r \qquad 2.1.3$$

para ello utilizaremos los resultados obtenidos en las Ec. 2.1.20.b para el desarrollo de la onda plana en Polinomios de Legendre. Sustituyendo en 2.1.3 tenemos

$$\psi_{TOTAL} \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{i}{2kr} \left[e^{-i(kr-\frac{1}{2}l\pi)} - e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)} \right] + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}$$

pero como ψ_{TOTAL} esta dada por la ecuación 2.1.22.b, entonces

$$\frac{f(\theta)}{r}\, e^{ikr}+\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}e^{-ikr}e^{i\frac{1}{2}l\pi}$$

$$-\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}e^{ikr}e^{-i\frac{1}{2}l\pi}$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)A_{l}P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}e^{-ikr}e^{i(\frac{1}{2}l\pi-\delta_{l})}$$

$$-\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)A_{l}P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}e^{ikr}e^{i(-\frac{1}{2}l\pi+\delta_{l})}$$

separando esta ecuación por sus términos e^{ikr} y e^{-ikr}, tenemos para e^{ikr}

$$\frac{f(\theta)}{r}\, e^{ikr}+\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\, e^{ikr}\, e^{-i\frac{1}{2}l\pi}$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)A_{l}P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\cdot e^{ikr}\, e^{i(-\frac{1}{2}l\pi+\delta_{l})}$$

multiplicando a por $e^{-ikr}\, 2ikr$ se obtiene entonces que

$$\text{a)}\quad 2ikf(\theta)+\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)e^{-i\frac{1}{2}l\pi}=\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)A_{l}P_{l}(\cos\theta)e^{i(-\frac{1}{2}l\pi+\delta_{l})}$$

para e^{-ikr}

$$\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\, e^{-ikr}\, e^{i\frac{1}{2}l\pi}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)A_{l}P_{l}(\cos\theta)\frac{i}{2kr}\ e^{-ikr}\quad e^{i(\frac{1}{2}l\pi-\delta_l)}$$

y multiplicando b por e^{ikr} $2ikr$ se obtiene que

$$b)\ \sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\ e^{i\frac{1}{2}l\pi} = \sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)A_{l}P_{l}(\cos\theta)e^{i(\frac{1}{2}l\pi-\delta_l)}$$

dado que esta expresión debe cumplirse para todo valor de θ y de la ortogonalidad de los polinomios de legendre, de la ecuación (b) se tiene que

$$A_{l} = e^{i\delta_l}$$

$\therefore$ sustituyendo este resultado en la ecuación a, anterior, se tiene que

$$2ikf(\theta)+\sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)e^{-i\frac{1}{2}l\pi} = \sum_{l=0}^{\infty} i^{l}(2l+1)e^{i\delta_l}P_{l}(\cos\theta)e^{i(-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)}$$

$$\rightarrow\ 2ik\quad f(\theta)+\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\left[i^{l}e^{-i\frac{1}{2}l\pi}\right]$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\ e^{2i\delta_l}\left[i^{l}e^{-i\frac{1}{2}l\pi}\right]$$

nótese que la expresión entre corchetes

$$\left[i^{l}e^{-i\frac{1}{2}l\pi}\right] = i^{l}[\cos(\tfrac{1}{2}l\pi)-i\,\mathrm{sen}(\tfrac{1}{2}l\pi)] = 1 \qquad \text{para } l=0,1,2,\ \ldots$$

$$\therefore \quad 2ik\, f(\theta)+\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\; e^{2i\delta_l}$$

$$\rightarrow \quad 2ik\, f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\; e^{2i\delta_l} - (2l+1)P_l(\cos\theta)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\; \left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$$

$$\therefore \quad f(\theta) = (2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\; \left(e^{2i\delta_l} - 1\right) \qquad 2.1.23$$

esta es la expresión para la amplitud de dispersión. Y dado que

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2$$

$$= \left|(2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\; \left[e^{2i\delta_l}-1\right]\right|^2$$

entonces

$$\boxed{\sigma(\theta)= \frac{1}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\;\left\{e^{2i\delta_l} - 1\right\}\right|^2} \qquad 2.1.24$$

Esta es la Seccion Eficaz Diferencial de Dispersión Para un potencial esferico simetrico, donde δ_l es el cambio de fase de la l-esima onda parcial.

$$\therefore \quad 2ik\, f(\theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \quad e^{2i\delta_l}$$

$$\rightarrow \quad 2ik\, f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta)\ e^{2i\delta_l} - (2l+1) P_l(\cos\theta)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \ \left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$$

$$\therefore \quad f(\theta) = (2ik)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \ \left(e^{2i\delta_l} - 1\right) \qquad 2.1.23$$

esta es la expresión para la amplitud de dispersión. Y dado que

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$$

$$= \left| (2ik)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \ \left[e^{2i\delta_l} - 1\right] \right|^2$$

entonces

$$\boxed{\sigma(\theta) = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \ \left[e^{2i\delta_l} - 1 \right] \right|^2} \qquad 2.1.24$$

Esta es la Seccion Eficaz Diferencial de Dispersión Para un potencial esferico simetrico, donde δ_l es el cambio de fase de la l-esima onda parcial.

2.2 TECNICA SANS[11]

El empleo de la técnica de dispersión a angulos pequños (SANS)[12] está creciendo rápidamente. SANS, es aplicable a diferentes campos cientificos [G. Kostorz, 1979; V. Gerold and G. Kostorz, 1978; W.Schmatz, T.Springer, et al., 1974; W. Schmatz, 1976], como en la fisica del estado sólido, química y biología. Nuestro interés está relacionado con los defectos estructurales, debidos a la cavitación que da origen a las fracturas[13].

La técnica SAS está limitada al estudio de <u>particulas</u> de 1000 a 10,000 Å de diámetro [V. Gerol and Kostorz, 1978 P. 376 y W. Schmatz, 1974 P. 100][14].

La técnica SANS, en su desarrollo a partir de la mecánica cuántica, parte de la validez de la aproximación de Born[15], un

---

11.- El presente capítulo esta basado en los artículos de Gerold V y G. Kostorz,1978 y G. Kostorz, 1979 y 1983.

12.- SAS (Small Angle Scattering) para la técnica de dispersión a angulos pequeños convencional (Neutrones, Rayos X, Electrones); SANS (Small Angle Neutron Scattering) para el caso especial de neutrones. El término SANS describe experimentos de dispersión en un rango angular (W. Schmatz, 1976) de 0.5 a 5×10^{-4} radianes usando longuitudes de onda de 5 a 20 Å. Esto da rangos de Q de 0.5 a 1×10^{-4} Å^{-1}aproximadamente.

13.- Dos trabajos interesantes acerca de la nucleación de huecos en fractura han sido realizadas por M.F. Ashby, 1979 y Chen and Argón, 1981. Véase, capítulo I; y en el caso especial de la aleación Nimonic 80 A , véase, Weaver, 1959 y D. McLean, 1959.

14.- Dichos valores dependen fuertemente de la longitud de onda de la partícula incidente.

15.- En la teoría desarrollada en el Cap. 2.1, esta aproximación corresponde al caso en que las faces δ_l son pequeñas. Véase Landau, 1958. Se ha omitido el desarrollo y justificacion de tal aproximación, ello es debido a que la técnica que pretendo mostrar con mayor detalle no es SANS.

método de aproximación semiclasico para la sección eficaz diferencial. La aproximación de Born consiste en suponer la alteración de la onda del neutrón al atravesar la particula dispersora, no es muy grande. Esto naturalmente es valido cuando la particula es pequeña. En caso contrario la aproximación podria ya no valer. Con esto se obtiene [Lehmann, 1977]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left| \int_V V(r)e^{iQr}d^3r \right|^2 \qquad 2.2.1$$

donde Q está definido como en la sección 2.1.1. Además, haciendo uso del Pseudo Potencial de Fermi[16] [Marton Ladislau, 1959]:

$$V_F = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta(r) \qquad 2.2.2$$

donde b depende de los detalles de la interacción neutrón núcleo y se le conoce como longitud de dispersión[17]. Que en una muestra volumétrica de materia, las interacciones neutrón nucleo pueden ser descritas como una colección de Pseudo potenciales centradas en cada uno de los núcleos.

16.- Un potencial repulsivo válido para la mayoría de las especies nucleares. El empleo del Pseudo Potencial de Fermi se debe a que la colisión entre neutrón y núcleo obedecen a una interacción núclear intensa pero de muy corto alcance.

17.- La llamada longitud de dispersión es una constante que depende de aquello que tenga influencia en la interacción: elemento químico, isótopo, spin del núcleo y spin del neutrón. Por esto, no sólo varía de elemento a elemento, sino también dentro de un mismo elemento químico, de isótopo a isótopo, por lo que aún en un material puro solamente se puede hablar de longitudes promedios de dispersión. Para valores de b puede verse G. E. Bacon, 1975, Tabla 2, P. 38.

$$V = \sum_i \frac{2\pi\hbar^2}{m} b_i \delta(r-r_i) \qquad 2.2.3$$

podremos entonces definir la sección eficaz de dispersión por átomo para una muestra con N núcleos dispersores en un volúmen, sustituyendo 2.2.3 en 2.2.1, como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N} \left| \int_V e^{iQr} \rho_b(r) \; d^3r \right|^2 \qquad 2.2.4$$

donde $\rho_b(r)$es la densidad de longitud definida por

$$\rho_b(r) = \sum_{i=1}^{N} b_i \; \delta(r-r_i) \qquad 2.2.5$$

donde b_i es la longitud de dispersión coherente del i-esimo núcleo en la posición r_i. Q es el vector de dispersión. $\rho_b(r)$ algunas veces es útil reescribirla como:

$$\rho_b(r) = \Delta\rho(r) + \bar{\rho}_b \qquad 2.2.6$$

con

$$\Delta\rho(r) = \rho_b(r) - \bar{\rho}_b \qquad 2.2.7$$

donde $\bar{\rho}_b$ es el promedio sobre las distancias mucho más grandes que $1/Q_{min}$ y Q_{min} es el más pequeño valor de Q accesible dada por la resolución del instrumento [G. Kostorz, 1979]. Para un rango Q considerado, solo $\Delta\rho(r)$ podrá contribuir a la dispersión, y es claro:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N}\left|\int_V e^{iQr}\Delta\rho(r)\ d^3r\right|^2 \qquad 2.2.8$$

MODELO DE DOS FASES:

La simpleza y el amplio uso de la aproximación SAS está basado sobre el modelo de dos fases que a continuación presentamos:

Consideremos una muestra que contiene N_P partículas con una densidad de longitud inhomogénea $\rho_{bp} = b_p/v_{ap}$, (donde b_p es la densidad de longitud promedio sobre el volúmen de la partícula, y v_{ap} es el volúmen atómico en la partícula). Y sean que tales partículas estén inmersas en una matriz de densidad de longitud homogénea $\rho_{bm} = b_m/v_{am}$. de la ecuación 2.2.8:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N}\ (\rho_{bp}-\rho_{bm})^2\left|\int_{V_t} e^{iQr}\ d^3r\right|^2 \qquad 2.2.9$$

donde la integral se extiende sobre el volúmen V_t que abarca todas las partículas del sistema. Si todas las N_P partículas son idénticas, la sección diferencial se convierte en

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{V_P^2\ N_P}{N}\ (\rho_{bp}-\rho_{bm})^2\ S(Q) \qquad 2.2.10$$

donde V_P es el volúmen de una partícula, $(\rho_{bp}-\rho_{bm})$ es conocida como el contraste de dispersión[18] y S(Q) es la función de

---

18.- Entre mayor es esta cantidad, mayor es la dispersión. En dispersión de una partícula simple, dada por

$$S(Q) = \left| \frac{1}{V_p} \int_{V_p} e^{iQr}\, dr' \right|^2 \qquad 2.2.11$$

donde

$S(0) = 1$

A partir de estas dos últimas relaciones es posible obtener información de la dispesión:

a) EXTRAPOLACION DE Q=0:

Si la curva de dispersión medida puede ser extrapolada a Q=0, de la Ec. 2.2.10 se tiene

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q \rightarrow 0) = \frac{V_p^2\, N_p}{N} (\rho_{bp} - \rho_{bm})^2 \qquad 2.2.12$$

En el caso general V_p, N_p y $(\rho_{bp} - \rho_{bm})$ son valores desconocidos, pero al combinarlo con información procedentes de otras zonas de la curva de dispersión (Fig.2.2.1), estas pueden ser obtenidas.

b) APROXIMACION DE GUINIER:

Para cualquier forma de partícula la función de dispersión a valores pequeños de Qa (donde a es una dimensión lineal de las

---

particular, cuando uno de los componenetes es un vacio o poros, su correspondiente ρ es cero y el contraste es máximo. Esto significa que en una mezcla de varias componenetes dispersoras, las cavidades son las que dispersan mayoritariamente.

partículas) puede ser aproximada a una función exponencial. De acuerdo con esto:

$$S(Q) = e^{-Q^2R_D^2} \qquad 2.2.13$$

donde Rᴅ es el radio de giro de la partícula definida por

$$R_D^2 = \frac{1}{V_P}\int_{V_P} r_D^2\, q(r_D)dr_D \qquad 2.2.14$$

donde $q(r_D)$ es la sección transversal de la partícula a lo largo de un plano normal una dirección D (en el plano perpendicular al vector de onda incidente k_o) y a una distancia r_D del origen dentro de la partícula definido por $\int_{V_P} r_D^2 q(r_D)dr_D=0$.

Para un sistema de partículas orientadas aleatoriamente

$$\overline{S(Q)}=e^{-Q^2R_G^2/3} \qquad 2.2.15$$

con

$$R_G^2=\frac{1}{V_P}\int_{V_P} r^2d^3r$$

Para esferas de radio R_s

$$R_G=(3/5)^{\frac{1}{2}}R_s \qquad 2.2.16$$

La aproximacion de Guinnier es por lo tanto aceptable sobre un amplio rango de QR_s (≤ 1.2).

c) APROXIMACION DE POROD:

Para sistemas con superficies internas bien definidas, la pendiente final de la curva de dispersión, Fig. 2.2.1, es proporcional a Q^4. Para partículas de cualquier forma (Q debe ser más grande que el inverso de la dimensión más pequeña de la partícula):

$$\overline{S(\overline{Q})} \simeq 2\pi Ap/V_p^2\, Q^4 \qquad 2.2.17$$

donde Ap es el área superficial de la partícula.

d) INTENSIDAD INTEGRADA:

De la Ec. 2.2.8 sobre todos los valores de Q producidos

$$\tilde{Q}(O) = \frac{N}{V} \int \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) d^3Q = (2\pi)^3\, \overline{\Delta\rho(\overline{r})}^2 \qquad 2.2.18$$

donde $\tilde{Q}$ representa las fluctuaciones media cuadrada del sistema. En el modelo de dos fases.

$$\tilde{Q}(O) = (2\pi)^3 (\rho_{bp} - \bar{\rho}_{bm})(\bar{\rho}_{bp} - \rho_{bm}) \qquad 2.2.19$$

ó

$$\tilde{Q}(O) = (2\pi)^3 Cp(1-Cp)(\rho_{bp} - \rho_{bm})^2 \qquad 2.2.20$$

donde Cp = NpVp/V es la fracción de volúmen de partículas.

e) LONGITUD CARACTERISTICA Lp:

En el modelo de doble fase, Lp es la longitud media de todas las lineas que pasan a través de cada punto de una particula en todas direcciones y termina sobre la superficie o la interfaze de la muestra, y está dada por

$$L_P = \frac{V_P}{2\pi} \int_0^{\infty} Q\ \overline{S(\bar{Q})}\ dQ \qquad 2.2.21$$

Para distintas combinaciones de esas relaciones, es posible determinar la forma, tamaño, número y composición de particulas uniformes por medidas precisas sobre un rango amplio de Q. La Fig. 2.2.1 muestra, esquemáticamente, las zonas de la curva de dispersión que corresponden a algunos de los puntos vistos con anterioridad.

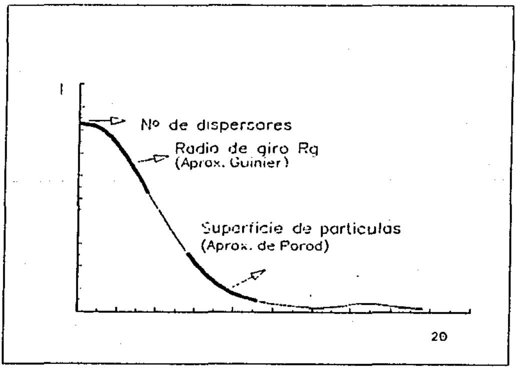


FIG. 2.2.1. INFORMACION QUE SE PUEDE OBTENER DE LAS DISTINTAS PARTES DE UNA CURVA DE DISPERSION SEGUN LA TECNICA CONVENCIONAL SANS.

2.3 TECNICA VSANS.

La tecnica que denominare Very Small Angle Neutron Scattering (VSANS) fue empleada por primera vez por Weiss para el estudio de particulas de bismuto [Weiss, 1951] (aunque con otros fines distintos a los presentados en esta tesis)[19] y esta cimentada principalmente en los resultados teóricos obtenidos de la mecánica cuántica para la seccion eficaz diferencial de dispersión elástica, Ec. 2.1.23.

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[e^{2i\delta_l}-1\right]\right|^2 \qquad 2.3.1$$

donde δ_l es el cambio de fase de la l-esima onda parcial y que contiene la información del potencial central, y que aún no a sido especificado. Nuevamente es conveniente sugerir el Pseudo potencial de Fermi. Asi. para un medio de densidad local atómica $\rho(r)$, un potencial promedio (llamado potencial óptico) podrá ser definido como:

$$V_{op} = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho(r)\bar{b}(r) \qquad 2.3.2$$

caracterizado por la longitud de dispersión promedio $\bar{b}$. Este potencial está fuertemente relacionado con el indice de refracción

---

19.- Weiss parte de resultados obtenidos por Van de Hulst; en él, hace énfasis en que el predominio de la difracción y refracción de la dispersión depende de el cambio de fase δ ($\delta \ll 1$ para difracción y $\delta \gg 1$ para refracción), de un neutrón que atraviesa una partícula de radi[illegible] y el neutrón atravesando la misma distancia en el vacío.

[Marton Ladislau, 1959] para neutrones, definido como:

$$n(r)=[1-V(r)/E]^{\frac{1}{2}} \qquad 2.3.3$$

entoces, sustituyendo 2.3.2 en 2.3.3 se obtiene

$$n^2=1-\frac{\lambda^2}{\pi}\rho\bar{b} \qquad 2.3.4$$

ó para V/E <<1

$$n=1-\frac{\lambda^2}{2\pi}\rho\bar{b} \qquad 2.3.5.a$$

$$n=1-\beta \qquad 2.3.5.b$$

Por otro lado, dado que la parte radial de la ecuación de Schrödinger (Ec. C.23, apéndice C)

$$\frac{1}{R}\left[\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{h^2}\left[E-V\right]R\right]=\ell(\ell+1) \qquad C.23$$

es la que nos proporciona la información referente al cambio de fase, debido a que contiene la informacion sobre el potencial, es conveniente aplicar el metodo WKB[20] para obtener un valor

20.- Cuando se considera una particula moviendose en un potencial V(x), La ecuación de Schrödinger para estados estacionarios tiene la forma aproximado del cambio de fase debida a la dispersión[21]. A saber [L.S. Rodberg, 1967, P.56]:

$$\delta_l \cong \left[\int_{r_1}^{r} dr\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)\right)^{\frac{1}{2}}-\int_{r_0}^{r} dr\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \qquad 2.3.6$$

A altas energías la energía potencial será pequeña comparada con la parte radial de la energía cinética, excepto cerca del punto clásico de retorno. Dado que la región cerca del punto de retorno no contribuye significativamente al cambio de la fase, asumiremos $|U(r)| \ll k^2-l(l+1)/r^2$ en el límite de alta energía, por lo que

$$\delta_l \cong \lim_{r\to\infty} \left[\int_{r_1}^{r} dr\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{1}{2}U(r)\right)-\int_{r_0}^{r} dr\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$

por lo tanto, 2.3.6 se transforma en el límite,

$$\delta_l \approx \lim_{r\to\infty} -\frac{1}{2}\int_{r_0}^{\infty} dr\, U(r)\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad 2.3.7$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

la aproximación WKB consiste en suponer a ψ de la forma: $\psi(x)=A(x)e^{iS(x)/\hbar}$ que es un tipo de onda de De Broglie generalizada, con amplitud A(x) y fase S(x).

21.- Donde se ha considerado el punto clásico de retorno como $r_o=[l(l+1)/k^2]^{1/2}$.

si introducimos el valor del parámetro de impacto $s=k^{-1}[l(l+1)]^{\frac{1}{2}}$ la ecuación anterior se transforma en

$$\delta_l \approx -\frac{1}{2}\int_{r_0}^{\infty} dr\, U(r)\, k^{-1}\left(1-\frac{s^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad 2.3.8$$

sustituyendo la ecuación 2.3.2 en 2.3.8 tenemos

$$\delta_l \approx -\frac{1}{2}\int_{r_0}^{\infty} dr \frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho(r)\bar{b}(r)\, k^{-1}\left(1-\frac{s^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

y dado que $\beta=\frac{\lambda^2}{2\pi}\rho\bar{b}$ (Ec. 2.3.5.b) sustituyendo en la ecuación anterior, tenemos

$$\delta_l \approx -\frac{1}{2}\beta k\int_{r_0}^{\infty} dr\ \frac{\hbar^2}{m}\left(1-\frac{s^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

por lo tanto

$$\delta_l=-\beta k\chi_l \qquad 2.3.9$$

donde χ_l es $\frac{1}{2}\int dr\ \frac{\hbar^2}{m}\left(1-\frac{s^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$ (y es $\frac{1}{2}$ de la longitud que la l-esima onda parcial intercepta al atravesar la esfera con un parámetro de impacto $s=(l+\frac{1}{2})/k$).

usando la relación

$$P_l(\cos\theta)\cong J_o[(l+\tfrac{1}{2})\sin\theta]=J_o[ks\cdot\sin\theta] \qquad 2.3.10$$

válida para para ℓ grande y θ pequeño[22].

sustituyendo estos últimos resultados en 2.3.1 y reemplazando la suma por la integral, tenemos

$$\sigma(\theta)= k^2\left| \int_0^R J_o(ks\cdot\sin\theta)(1-e^{2i\beta k\chi})s\cdot ds \right|^2 \qquad 2.3.11$$

El límite superior está determinado por el hecho de que todas las ondas parciales $(\ell+\frac{1}{2})>kR$ no serán dispersadas por la partícula.

Haciendo el siguiente cambio de variable: $s=R\sin\gamma$, $x=R\cos\gamma$, $z=Q\sin\theta\cong 2k\sin(\frac{1}{2}\theta)$, and $\delta=2\beta kR$, Fig. 2.3.1, tenemos:

$$\boxed{\sigma(\theta)= R^4k^2\left|\int_0^{\pi/2}(1-e^{i\delta\cos\gamma})J_o(Rz\ \sin\gamma)\sin\gamma\cos\gamma\ d\gamma\right|^2} \qquad 2.3.12$$

Esta es la Sección Eficaz Diferencial que utilizaremos para evaluar la dispersión por cavidades.

.- Esta igualdad puede obtenerse de la ecuación C.8 (apéndice C)

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\cot\theta\ \frac{d\Theta}{d\theta}+\beta\Theta-\frac{\alpha^2\Theta}{\mathrm{sen}^2\theta}=0 \quad ; \quad \alpha=m=0, \quad \beta=l(l+1) \qquad \text{c.8}$$

al considerarse $\theta\ll 1$, $\beta\approx(l+\frac{1}{2})^2$ y $s=k^{-1}[l(l+1)]^{\frac{1}{2}}=k^{-1}[(l+\frac{1}{2})^2-\frac{1}{4}]^{\frac{1}{2}}\cong (l+\frac{1}{2})/k$

$\therefore\ P(\cos\theta) = J_o[(l+\frac{1}{2})\sin\theta] = J_0[ks\cdot\sin\theta]$.

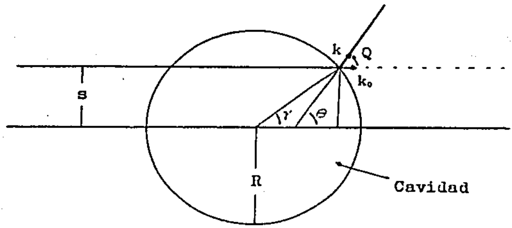


FIG. 2.3.1 LA FIGURA REPRESENTA LA DISPERSION POR UNA CAVIDAD DE RADIO R DADA POR EL PARAMETRO DE IMPACTO S Y EL ANGULO θ. PUEDE VERSE CLARAMENTE QUE: $s=R\sin\gamma$, $x=R\cos\gamma$, $z=Q\sin\theta \cong 2k\sin(\frac{1}{2}\theta)$, Y $\delta=2\beta kR$.

APLICACION A CAVIDADES:

La afirmación anterior es válida tanto para partículas como para cavidades siempre y cuando las partículas (cavidades) sean grandes comparadas con la longitud de onda. De tal forma que la onda difractada es separable del resto de patrón de dispesión, debido a que está confinada a ángulos muy pequeños de θ, donde es válido el principio de Babinet[23]. Así, en los sistemas

---

23.- El Teorema de Babinet dice: objetos complementarios producen los mismos efectos de difracción. Es decir, en una pantalla perforada con agujeros circulares, y un ensables de discos circulares, cada disco corresponde en tamaño y posición a un agujero particular, que producirán los mismos efectos de difracción (Guinier,1955).

experimentales generalmente usados para el estudio de ángulos pequeños, el principio de Babinet puede ser aplicado a un ensamble tanto de partículas como de cavidades (esto es: un ensamble de partículas en un medio homogéneo puede ser considerado igual a un ensamble de cavidades) [Guinier, 1955].

Apoyándonos en el resultado anterior, y considerando que la distribución de cavidades dentro de una muestra sometida a termofluencia obedece a una función Log-Normal (véase Cap. 1):

$$n(R) = \frac{1}{R\sqrt{2\pi}\sigma}\, e^{-\ln^2(\bar{R}/R)/2\sigma^2} dR$$

proponemos la siguiente expresión para el estudio de cavidades:

$$\sigma_{TEO.}(\theta') = \int_{R_{MIN.}}^{R_{MAX.}} n(R)\ \sigma(\theta', R)\ dR \qquad 2.3.13$$

donde

$$\sigma(\theta', R) = R^4 k^2 \left| \int_0^{\pi/2} (1 - e^{i\delta\cos\gamma}) \cdot J_0(Rz \cdot \sin\gamma) \sin\gamma \cos\gamma\ d\gamma \right|^2 \qquad 2.3.14$$

pero, si además consideramos una curva de resolución $R(\theta-\theta')$ dada por el instrumento[24], tenemos

$$\sigma_{TEO-EXP.}(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_{TEO.}(\theta') R(\theta-\theta')\ d\theta' \qquad 2.3.15$$

24.- Nótese que si la curva de resolución fuese una delta de Dirac entonces $\sigma_{TEO-EXP.}(\theta) = \sigma_{TEO.}(\theta')$.

por lo anterior, hemos realizado un programa que evalúa numéricamente la ecuación que engloba todas estas consideraciones:

$$\sigma_{TEO-EXP.}(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{R_{MIN.}}^{R_{MAX.}} n(R)\ \sigma(\theta',R)\ dR \right] R(\theta-\theta')\ d\theta' \qquad 2.3.16$$

dicho programa aparece en el apéndice B.

Finalmente, cabe aclarar que el número de partículas dispersadas que "caen" al detector están dadas por [Melissinos, 1969, P.239]:

$$I_s = I_o\ N\ \frac{d\sigma}{d\Omega}\ d\Omega \qquad 2.3.17$$

donde

I_o es el haz incidente; $\left[\frac{\text{Neutrones}}{\text{seg. cm}^2}\right]$

$$d\Omega = \frac{\text{Area del detector}}{(\text{distancia de la muetra al detector})^2}$$

es el ángulo sólido [Steradian]

$N = \frac{t\rho N_o}{A}$ es la densidad superficial $\left[\frac{\text{Núcleos}}{\text{cm}^2}\right]$

donde

$N_o = 6.62\times10^{23}$ $\left[\frac{\text{moléculas}}{\text{gr. mol}}\right]$ es el número de Avogadro

ρ es la densidad de los dispersores $\left[\frac{\text{gr.}}{\text{cm}^3}\right]$

t es el ancho de la muestra [cm]

A es el peso atómico del material dispersor

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ es la sección eficaz diferencial [cm^2]

Por lo que la intensidad dispersada es proporcional a la sección eficaz diferencial (ya que I_o y N son constantes que dependen de la fuente de neutrones y de la muestra empleada, respectivamente).

$$I_s \propto \frac{d\sigma}{d\Omega} \qquad 2.3.18$$

Para el presente trabajo utilizare únicamente la ecuación 2.3.18 (podríamos obtener información sobre N del ajuste, pero por el momento se despreciará este término). Por lo que, al ajustar la ecuación 2.3.16 a la curva de dispersión, ésta nos proporcinará información sobre la distribución de cavidades (aproximadamente una Log-Normal), así como el radio promedio de las cavidades.

CAPITULO III

DISPOSITIVO EXPERIMENTAL.

INTRODUCCION

Las medidas a las cuales se aplicará la técnica VSANS fueron tomadas por los Drs. J. Palacios y Schwahn D.[25] en el espectrómetro SN 18 del Institut Laue Langevin en Grenoble, Francia. Aquí sólo se expondra el principio del funcionamiento del instrumento utilizado.

3.1 FUENTE DE NEUTRONES: REACTOR EXPERIMENTAL DE ALTO FLUJO, INSTITUT LAUE LANGEVIN (ILL-HFT).

Como fuente de neutrones se empleó aquel generado[26] por el reactor experimental de alto flujo del Institut Von Laue-Langevin[27], de Francia. Este opera a una potencia de 57 MW

25.- Dr. Jesús Palacios G: Inv. Nac. del Instituto Politécnico Nacional de México (IPN); Dr. Schwahn D.:Inv. del Institut Für Festkorperförschung, de Alemania.

26.- Típicamente, la reacción de fisión que da lugar a la obtención de neutrones dentro de un reactor es (Holton Roller, 1963, p. 765):

$$_{92}U^{235} + _0n^1 \longrightarrow _{56}Ba^{141} + _{36}Kr^{92} + 3_0n^1$$

donde $_{56}Ba^{141}$ y $_{36}Kr^{92}$ son los productos de fisión resultantes.

27.- Una información más completa sobre las instalaciones con que cuenta el Instituto se encuentra en el folletín "Institut Max Von (térmico) proporcionando un flujo máximo de neutrones térmicos de 1.2×10^{15} n/cm²/sec. El elemento combustible contiene aproximadamente 9 Kg. de uranio enriquecido al 93% por U^{235}. Como enfriador y moderador se utiliza agua pesada (con la circulación de esta, a treves de un intercambio de calor).

Los haces de neutrones tèrmicos, calientes y frios[28], generados en el reactor, estan disponibles a través de puertos etiquetados, como se muestra en la Fig. 3.1.1. El reactor cuenta con dos salidas de neutrones frios, cinco termicos y cuatro calientes. Las longitudes de esas salidas o guias son de hasta 120m.

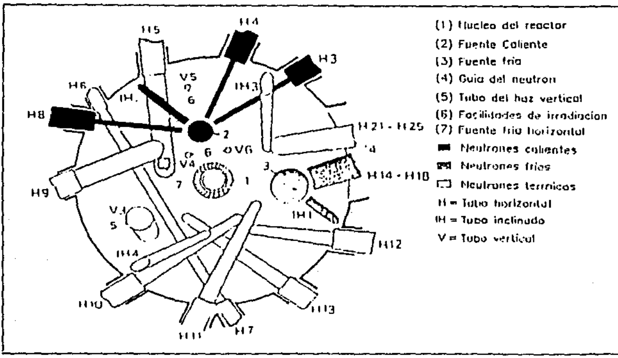


FIG. 3.1.1 ARREGLO DE LOS PUERTOS (GUIAS DE NEUTRONES) DEL REACTOR DE ALTO FLUJO DEL INSTITUT LAUE LANGEVIN. FUENTE:IIL-HFR, 1986.

Laue Paul langevin, Grenoble, France", 1986.

28. - dependiendo de la energía cinética con que son emitidos

3.2 ESPECTROMETRO DE DOBLE CRISTAL DE ALTA RESOLUCION ANGULAR (DCS). DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO.

De un haz de neutrones procedentes del reactor se extrae un haz monocromático a través de un monocristal casi perfecto de Si (b), en la Fig. 3.2.1, usando sus planos (220) en posición de difracción de Laue. El haz monocromático incide en un segundo cristal casi perfecto de silicio (d), de tal forma que se produce nuevamente la difracción por los planos (220) y el haz difractado emerge paralelo al haz antes del primer cristal y es registrado por los detectores. En la Fig. 3.2.1 se muestra, esquemáticamente, el arreglo experimental, en el cual se ilustran los dos cristales y las medidas de dispersión $Q_{\parallel}$ y $Q_{\perp}$ (y corresponden a rotar la muetra 90°).

Si hacemos rotar el segundo cristal sobre de un eje vertical, sin considerar la muestra, se obtiene una curva de distribución que denominaremos "curva de resolución" ("Rocking Curve"). Esta curva contiene información de la resolución del instrumento, con un ancho del orden de segundos de arco, debido a que por tratarse de cristales casi perfectos la difracción es dinamica [W.H. Zachariasen, 1945]. Si se introduce una partícula, o un conjunto de partículas, con diámetros entre 0.1 y 10 Å en la trayectoria del haz entre ambos cristales (punto M en la Fig. 3.2.1), el conjunto de neutrones dispersados por la partícula no cumplen con la ley de Bragg[29] en el segundo cristal; así, los neutrones dispersados encontrarán un ángulo, al rotar nuevamente el cristal, para el cual cumplan la ley de Bragg. Esto significa que en la nueva curva de distribución el pico disminuye y la curva se ensancha, dando un espectro típico de la dispersión a bajo ángulo, pero con una resolución del orden de segundos de arco.

29.- Ley de Bragg: $2d\operatorname{sen}\theta=n\lambda$. Donde d es la distancia entre planos atómicos paralelos.

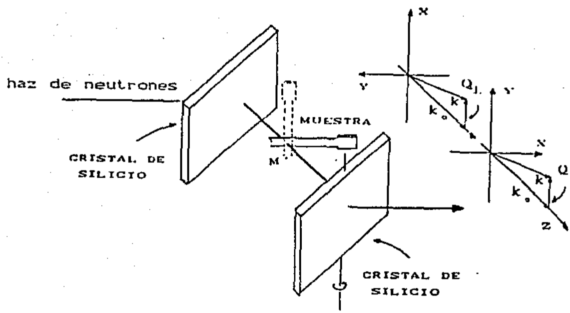


FIG. 3.2.1 REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL ESPECTROMETRO DE DOBLE CRISTAL.

Cuando el número de particulas dispersoras es muy grande, se produce un fénomeno conocido como dispersión múltiple[30] y debe ser corregido antes de compararlos con la teoría. La dispersión múltiple se ve como una contribución adicional del ensanchamiento en los picos de difracción.

30.- El neutrón dispersado por las partículas puede colicionar nuevamente por otra partícula.

3.3 INSTRUMENTO S18 (ILL-HFR). DESCRIPCION DEL INSTRUMENTO.

El instrumento empleado, dentro de las instalaciones del Instituto referido, es el instrumento S18, figura 3.3.1. Es un difractómetro de dos ejes que consta de dos cristales casi perfectos de silicio, empleados generalmente para interferometría de neutrones

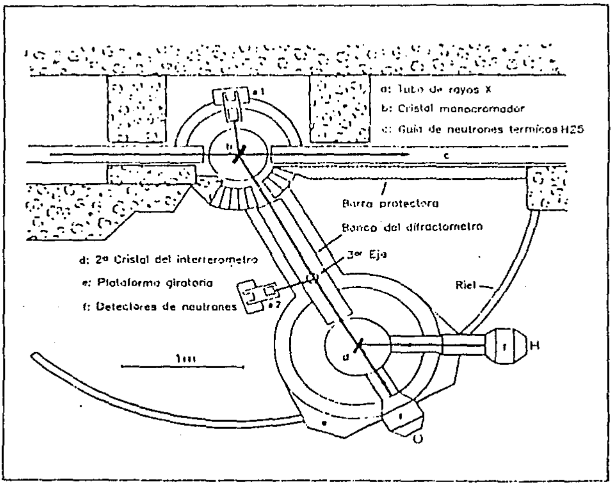


FIG. 3.3.1 VISTA ESQUEMATICA DEL INSTRUMENTO S18 (INTERFEROMETRO DE NEUTRONES) DEL INSTITUT LAUE LANGEVIN. FUENTE:IIL-HFR, 1986.

En el modo usual de operación, un cristal casi perfecto de silicio es usado como monocromador (b), figura 3.3.1 , la fuente de neutrones (térmicos) es obtenida del puerto H25 (Fig. 3.1.1); lo cual hace posible obtener un haz de longuitud de onda ajustable que incide en un segundo cristal casi perfecto de silicio (d). El intrumento permite obtener una curva de resolución estrecha (<3"). Además pueden medirse la difracción hacia adelante (O) y el haz difractado (H).

La alta sensibilidad angular se obtiene de una rotación fina, de 0.01" de resolución, en el segundo cristal (d). Las vibraciones mecánicas se reducen a través de una "suspensión" montada en un "banco óptico", que soporta, además, un tercer eje. Dos tubos de rayos X en α_1 y α_2 están incorporados al sistema para propósitos de calibración y estabilización.

El tercer eje esta disponible cerca de la posición α_2 proporcionando un grado adicional de libertad en el movimiento del interferómetro .

El instrumento S18 es controlado por un microprocesador enlazado directamente a una microcomputadora; la operación del instrumento y el procesamiento de los datos pueden ser realizados por programas vía Fortran.

CAPITULO IV

EXPERIMENTO Y RESULTADOS.

INTRODUCCION

Experimentalmente se observa que de los distintos barridos, sobre una muestra sometida a un proceso de termofluencia y llevada a la fractura, la dispersión por cavidades en una zona cercana a la fractura (≈ 1cm) puede ser estudiada a partir de las técnicas SANS y VSANS, puesto que en tal zona, se observa un "pico" debida a la transmisión sobre la dispersión múltiple. Tal condición es importante para efectuar las correcciones por dispersión múltiple y aplicar las técnicas antes citadas.

Las técnicas revelan[31]: un radio de giro de ≈ 1µm según SANS, y una distribución de cavidades Log-Normal dado por los parametros $\sigma \approx 0.585$ (varianza) y $RM \approx 0.8$ µm en VSANS. Estos resultados sugieren que la técnica VSANS, que puede ser mejorada, puede aplicarse al estudio de cavidades.

A continuación se dan los detalles del experimento, la discusión y finalmente las conclusiones.

31.- Al igual que otras investigaciones referentes al estudio de cavidades, (D. McLean, 1956; C. W. Weaver, 1959); se observaron cavidades del órden de 1 µm de diámetro.

4.1 EXPERIMENTO.

Una aleación a base de níquel, NIMONIC 80A[92], fue llevada, por un proceso de termofluencia, a la fractura con el fin de nuclear cavidades para su posterior estudio. La muestra cuyas dimensiones originales eran de 5.08 cm. de longitud y 0.64 cm. de diámetro, fue sometida a las siguientes condiciones de termofluencia: 1023 °K (750 °C) bajo una tensión de 226 MPa (N/mm2), a un tiempo de fractura de 1644h (5.9×10^{6}s). La muestra fue cortada longitudinalmente a un espesor de 0.4 cm. Se utilizó un flujo de neutrones térmicos de longitud de onda de 1.874 Å y se obtubieron espectros de dispersión para una $Q_{\parallel}$ y $Q_{\perp}$[93]. Para el estudio de la muestra se utilizó el arreglo experimental mostrado en las sección 3.3., Cap. III: un espectómetro de Doble Cristal de Alta Resolución Angular DCS.

Las gráficas de los distintos barridos (Tablas 1 y 2, apéndice A) obtenidos experimentalmente[94] se muestran en las figuras 4.1.1 y 4.1.2.

92.- Véase Tabla 1.2.1, capítulo I, para ver su composición química.

93.- Q es el vector de dispersión y es igual a $Q=k-k'=2k\,sen(\theta/2)$. $Q\approx2\pi/\lambda\theta$ para $\theta\ll1$. $Q\perp$ consiste en una rotación de 90° de la muestra. Véase Fig 3.2.1, cap III.

94.- Los datos fueron proporcionados, en comunicación personal, por el Dr. J. Palacios (Inv. Nac. del Instituto Politécnico Nacional de México (I.P.N.).

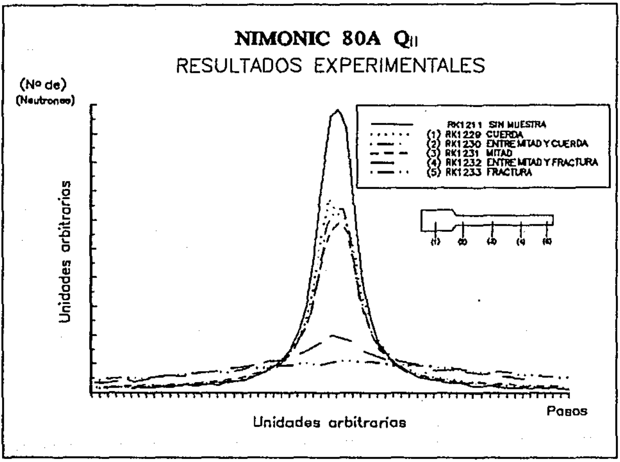


FIG. 4.1.1. RESULTADOS EXPERIMENTALES, PARA $Q_{||}$, DEL NUMERO DE NEUTRONES DETECTADOS V.S. PASOS. CADA PASO CORRESPONDE A 1.25×10^{-4} RAD. (2.182×10^{-4} GRADOS). LAS ETIQUETAS RK1211, RK1229, ...,RK1233 SON LOS NOMBRES DADOS A LAS MEDIDAS.

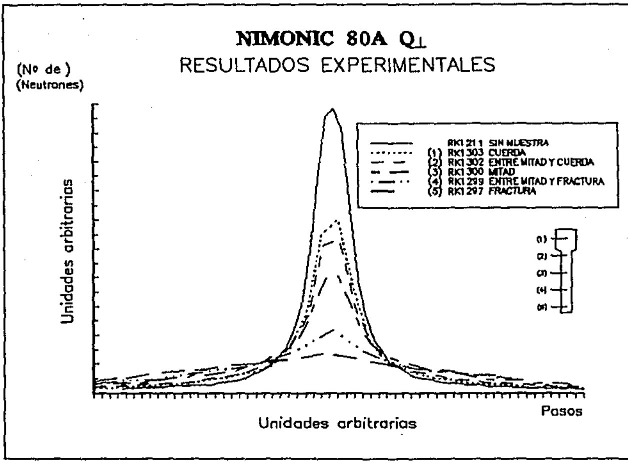


FIG. 4.1.2. RESULTADOS EXPERIMENTALES, PARA $Q_{\perp}$ DEL NUMERO DE NEUTRONES DETECTADOS V.S. PASOS. CADA PASO CORRESPONDE A 1.25×10^{-4} RAD. (2.182×10^{-4} GRADOS). LAS ETIQUETAS RK1211, RK1303, ...,RK1297 SON LOS NOMBRES DADOS A LAS MEDIDAS.

4.2 DISCUSION.

En las figuras 4.1.1 y 4.1.2, donde se muestran los resultados experimentales, puede verse claramente que la dispersión se debe, principalmente, a cavidades; ya que a medida que nos acercamos a la fractura la dispersión es mayor y es donde las cavidades pueblan más densamente al material.

Tomando en cuenta los resultados de las medidas $Q_{\parallel}$, Fig. 4.1.1., se pueden observar las siguientes consideraciones:

a) Las medidas RK1229, RK1230 y RK1231 solo se ensanchan levemente, lo que significa que se pueden ajustar por una curva del tipo resolución[35] la cual correspondería a la transmisión y una pequeña contribución a la dispersión.

b) Las medidas Rk1232, que está muy próxima a la zona de fractura ($\approx$ 1cm), presenta claramente una suma de dos contribuciones, Fig. 4.2.1: una "amplia" correspondiente a la dispersión y una "estrecha" que es la transmisión. Con esto, la transmisión puede ser calculada y con ello la dispersión múltiple puede ser corregida.

c) La medidas Rk1233, que corresponde a la fractura ya no muestra el pico de transmisión y es además ligeramente mas ancha que la medida RK1232. El hecho de que en el espectro medido no se observe el pico de transmisión significa que hay mucha dispersión múltiple. Mas aún, puesto que no se observa el pico de transmisión, la corrección por dispersión múltiple no se puede hacer.

35.- Véase sección 3.2 del capítulo III.

Otro resultado importante, cualitativo, que proporcionan las Figs. 4.1.1 y 4.1.2, si se comparan, es que dan información acerca del grado de deformación que han sufrido las cavidades a través de proceso de termofluencia. Si consideramos que para $Q_\perp$ la dispersión es mucho mayor que para $Q_\parallel$, entonces, las cavidades en primera aproximación presentan una forma elipsoidal, ya que la dispersión depende fuertemente de la orientación. Sin embargo, analizando el caso especial de las medidas RK1232 $Q_\parallel$ y RK1299 $Q_\perp$ (cercanas a la fractura), estas sugieren que las cavidades en esta zona son más o menos esféricas; las amplitudes de dispersión son aproximadamente las mismas.

Asi, de acuerdo lo antes expuesto, analizare el caso especial de las medidas RK1232 (cercana a la fractura con $Q_\parallel$), figura 4.2.1. En la gráfica[36] pueden verse las contribuciones, apreciativas, de lo que se considera la dispersión y la transmisión. Estos datos fueron corregidos por dispersión múltiple[37] y aproximados a una curva gaussiana, cuya ecuación es:

$$A(x)=(137.6 \pm 0.05)e^{-(x/(14.16 \pm 0.005))^2} \qquad 4.2.1$$

donde x es el numero de pasos (cada paso corresponde a 1.25×10^{-4} rad. - 2.182×10^{-4} grados). La curva ajustada por dispersión múltiple, Ec. 4.2.1, es la dispersión de los neutrones por las cavidades.

36.- Se ha sobrepuesto la curva con respecto al centro con fines estadísticos.

37.- Como dicha técnica es una discusión aparte, que no entra en los planes de este trabajo, no se mostrará explícitamente el proceso de corrección. Dicha corrección fue realizada por el Dr. Palacios con base en programas de cómputo ya establecidos para este propósito. Vease Michael Monkénbusch, 1971.

la curva de resolución (Ec. 2.3.15) fue ajustada a una Lorenziana cuya ecuación es:

$$f(x)= \frac{5472 \pm 0.5}{1+x^2(0.6448 \pm 0.00005)^2/3} \qquad 4.2.2$$

x en pasos

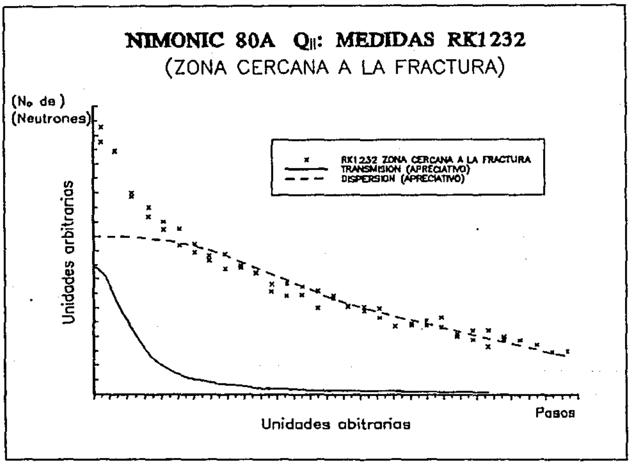


FIG. 4.2.1. RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA MEDIDAS RK1232 (CERCANA A LA FRACTURA) CON $Q_{\parallel}$. DONDE LAS x REPRESENTAN AL HAZ TOTAL DISPERSADO (DATOS EXPERIMENTALES); ----- HAZ DISPERSADO (APRECIATIVO) Y ——— LA TRANSMISION (APRECIATIVO).

TECNICA SANS:

Si aplicamos la aproximación de Guinier, Ec. 2.2.15, cap. II, de la técnica SANS

$$S(Q)= e^{-Q^2R_g^2/3}$$

entonces[38]

$$-(x/14.16)^2 = -(4\pi/\lambda)^2(2.182x10^{-6})^2x^2R_g^2/3$$

para $\lambda= 1.874x10^{-10}$ m

$$\Rightarrow R_g=\sqrt{\frac{3}{(14.16)^2(4\pi/\lambda)^2(2.182x10^{-6})^2}} = 8.360x10^{-7} \text{ m [metros]}$$

$$\therefore R_g= 0.836 \pm 0.0003\ \mu m \qquad 4.2.3$$

y si consideramos el caso de partículas esféricas, dentro de la técnica SANS, Ec. 2.2.16, cap. II.

$$R_g= R\sqrt{3/5}$$

entonces

$$R \approx 1.079 \pm 0.0004\ \mu m. \qquad 4.2.4$$

38.- $Q=4\pi/\lambda\ \text{sen}\theta$, si $\theta\ll1$ entonces $Q=4\pi/\lambda\theta$; pero 1 PASO= $2.182x10^{6}$ rad. y $\lambda=1.874x10^{-10}$m

Así, la dispersión de los neutrones por las cavidades cuyo radio de giro (radio promedio sobre las distintas orientaciones), es del órden de $R_g \approx 0.836 \pm 0.0003\ \mu m$,siguiendo el método SANS (en la aproximación de Guinier). A el valor de la incertidumbre encontrado deben sumársele otros mas, p.e. el correspondiente a la corrección por rendija, por lo que debe tomarse con cierta reserva.

TECNICA VSANS:

Aplicando el programa de cómputo diseñado para evaluar la sección eficaz[39] en la técnica VSANS, Ec. 2.3.16.

$$\sigma_{\text{TEO-EXP.}}(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{R_{MIN.}}^{R_{MAX.}} n(R)\ \sigma(\theta',R)\ dR \right\} R(\theta-\theta')\ d\theta' \qquad 2.3.16$$

(donde $R(\theta-\theta')$ esta dada por la Ec. 4.2.2.). Se ajusto[40] la curva de dispersión debida a las cavidades (corrección por dispersión múltiple), Ec. 4.2.1, a las sección eficaz de VSANS, tomando en cuenta que, Ec. 2.3.18:

$$I_s \propto A \frac{d\sigma}{d\Omega} \qquad 2.3.18$$

se obtuvieron los siguientes resultados, Fig. 4.2.2.:

P[1]=26.988 ± 8.0	(A amplitud),
P[2]=7.847E-07 ± 0.4 E-07	(RM -radio promedio),
P[3]=0.585 ± 0.5E-08	(σ -varianza el la Log-Normal)

39.- Uno de los objetivos de esta tesis consiste en la realización de un programa que evalúe la sección eficaz de dispersión para cavidades grandes, comparados con la longitud de onda, tal programa se encuentra plasmado en el apéndice B. Véase, Cap. III.

40.- Nuevamente se hace referencia a un programa ya establecido para este propósito. Véase J. Lang and R. Müller, 1971.

parámetros que corresponden a una distribución Log-Normal, (Ec. 1.3.1, Cap. I)

$$n(R) = \frac{1}{R\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\ln^2(RM/R)/2\sigma^2} dR \qquad 1.3.1$$

distribución del tamaño de las cavidades que se espera se encuentre en la muestra en la zona cercana a la fractura, Fig. 4.2.3. A estos valores de la incertidumbre deben sumársele otros mas, p.e. el correspondiente a la corrección por rendija, por lo que debe tomarse con cierta reserva.

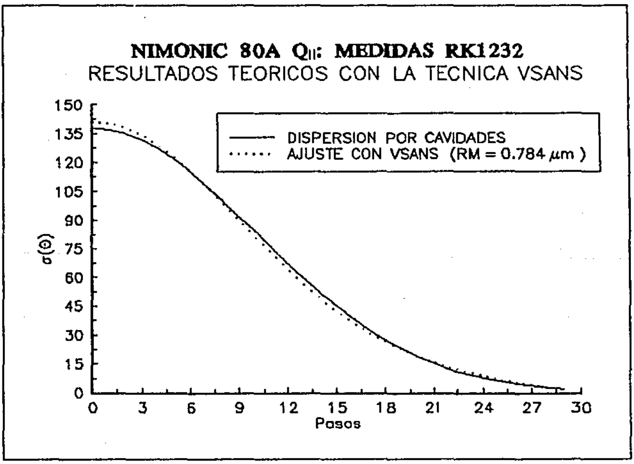


FIG. 4.2.2. —— DISPERSION POR LAS CAVIDADES (CURVA CORREGIDA POR DISPERSION MULTIPLE), Ec. 4.2.1; ---- RESULTADOS EXPERIMENTALES OBTENIDOS DEL AJUSTE SEGUN LA TECNICA VSANS.

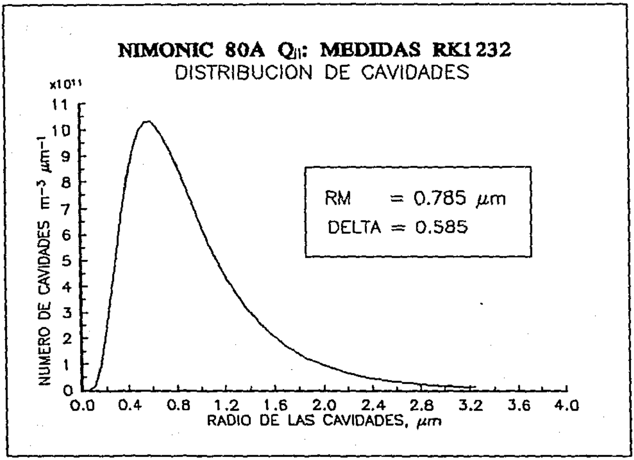


FIG. 4.2.3. DISTRIBUCION DE CAVIDADES, LOG-NORMAL, QUE SE DESPRENDE DEL AJUSTE, SEGUN VSANS, DE LA ALEACION NIMONIC 80A CERCANA A LA FRACTURA (≈ 1 cm.).

4.3 CONCLUSIONES.

Dado el contraste con la amplitud de dispersión en las medidas $Q_{\parallel}$ y $Q_{\perp}$ (con la reserva de que las medidas, en la muestra, hayan sido tomadas en las mismas zonas de comparación), sugieren: que en el proceso de nucleación las cavidades, en primera aproximación, presentan una forma elipsoidal muy alargada. A excepción de la zona cercana a la fratura, las medidas RK1232 para $Q_{\parallel}$ y RK1299 para $Q_{\perp}$, donde las medidas sugieren que la forma de las cavidades son aproximadamente esféricas ya que la dispersión en ambas son casi iguales.

Con respecto a las técnicas SANS y VSANS. De los resultados anteriores se desprende que:

$R_g \approx 0.838 \pm 0.0003\ \mu m$ Técnica SANS

$R \approx 1.079 \pm 0.0004\ \mu m.$ Técnica SANS (para cavidades esfericas)

$RM \approx 0.785 \pm 0.04\ \mu m$ Técnica VSANS

El valor de las incertidumbres presentadas no son del todo comfiables, pues resta considerar el error involucrado por la rendija infita. Únicamente reflejan el grado de confiabilidad de la nueva técnica VSANS. En base a estos resultados creo que VSANS puede ser aplicada al estudio de cavidades con un buen grado de confiabilidad.

En VSANS se sugiere que la distribución del tamaño de las cavidades obedece aproximadamente a una distribución Log-Normal.

Esta debe ser corroborada y no debe tomarse como una afirmación al 100%. Diversas teorías producen diversas distribuciones de tamaños $N_1(R)$, $N_2(R)$, ..., $N_n(R)$. Aquí se propuso una de ellas (la Log-Normal), pero en principio deberían proponerse varias (las que predija la teoría). Estas deberían entonces substituirse en la Ecuacion 2.3.16:

$$\sigma_{TEO-EXP.}(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{R_{MIN.}}^{R_{MAX.}} n(R)\ \sigma(\theta',R)\ dR \right] R(\theta-\theta')\ d\theta' \qquad 2.3.16$$

Sustituir aquella distribución N(R) que mejor reproduzca los resultados experimentalmente.

La corrección por dispersión múltiple podría ser evitada si se tomase una muestra más delgada, sin embargo esto implicaría una disminución en la densidad de cavidades y por lo tanto un incremento en la transmisión por lo que el análisis debera hacerse con mucho mayor detalle. Inicialmente se tenía la idea que dicha dispersión aparecería inevitablemente por lo que el espesor de la muestra era en ese momento adecuada.

Los fracturistas podrían encontrar en esta técnica una herramienta útil, si se trata de investigar el crecimiento y distribución de cavidades en el mecanismo de fractura.

Esta técnica desafortunadamente no puede ser aplicada en México, específicamente en el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ), dado que no se cuenta con un difractómetro de doble cristal de alta resolución como en el caso de Grenoble. Sin embago este puede le ser instalado ya que de los ocho puertos seis están libres y desaprovechados.

APENDICES

APENDICE A

TABLA 1. RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA ALEACION NIMONIC 80A ($Q_{\parallel}$)

	SIN MUESTRA (R1211)		CUERDA (LEJOS DE LA FRAC.) (2 cm.) (R1228)		ENTRE MITAD Y CUERDA (1.5 cm) (R1230)		MITAD (1 cm.) (R1231)		ENTRE MITAD Y FRACTURA (0.5 cm) (R1232)		FRACTURA (0 cm.) (R1233)	
PASOS *	DETEC 1	DETEC 2	DETEC 1	DETEC 2	DETEC 1	DETEC 2	DETEC 1	DETEC 2	DETEC 1	DETEC 2	DETEC 1	DETEC 2
1	81	68	81	57	87	68	103	71	184	132	234	182
2	104	78	107	75	84	51	98	70	188	132	270	187
3	104	81	84	68	85	65	128	81	228	147	282	206
4	123	80	105	73	112	77	120	88	253	158	300	214
5	131	107	95	61	83	59	123	81	251	168	268	198
6	136	86	112	76	98	66	148	118	218	146	282	204
7	162	126	106	78	80	64	134	88	245	168	278	180
8	170	134	112	86	114	80	127	88	269	187	314	210
9	166	127	106	82	115	84	148	115	+ 312	+ 188	305	210
10	175	135	113	88	123	80	137	83	+ 312	+ 188	348	235
11	188	151	131	103	127	87	169	119	306	207	348	253
12	164	137	150	101	128	81	188	128	325	237	355	245
13	242	183	134	101	147	108	186	144	306	220	370	252
14	258	225	164	116	130	100	205	152	307	211	414	276
15	276	235	178	125	159	118	223	161	348	234	404	283
16	318	273	181	136	182	131	244	186	372	266	418	284
17	410	358	168	134	207	148	260	204	381	283	383	273
18	512	413	202	163	187	140	284	233	441	313	417	284
19	607	515	229	184	254	201	335	268	400	258	457	314
20	763	657	278	237	274	208	377	295	482	338	502	356
21	1003	815	328	272	306	237	461	357	486	357	486	327
22	1448	1148	375	324	356	283	500	380	480	350	490	338
23	2168	1583	468	406	448	357	657	522	535	386	522	362
24	3740	2330	544	453	488	387	762	601	557	411	532	373
25	5745	3382	722	587	688	513	888	774	638	430	528	373
26	7446	4367	862	784	866	661	1370	1002	585	427	553	380
27	7604	4532	1345	1023	1155	872	2007	1410	633	454	580	413
28	8865	4373	1863	1460	1616	1095	2807	1852	740	524	564	380
29	4661	3151	2881	2254	2383	1538	2218	2240	760	553	548	388
30	2736	2050	3657	2887	3428	2216	3435	2352	836	588	610	435
31	1773	1476	3711	2364	3776	2353	3147	2260	822	616	618	432
32	1168	888	3586	2305	3738	2480	2304	1708	1087	756	638	431
33	812	773	2840	2011	3072	2118	1826	1187	1148	778	623	441
34	651	553	1958	1413	1936	1378	1114	878	1180	853	603	415
35	582	500	1438	1080	1410	1080	788	650	1108	753	601	428
36	461	383	1063	828	888	785	683	556	884	625	603	418
37	363	304	781	628	764	618	535	442	757	562	576	408
38	317	267	650	527	544	441	460	358	734	528	526	374
39	282	250	563	436	482	386	358	280	681	463	524	364
40	245	200	437	354	383	307	335	261	672	478	545	378
41	220	161	348	282	357	282	308	232	617	444	512	355
42	228	162	380	287	284	217	271	214	558	388	536	381
43	+ 184	+ 145	282	230	245	180	238	174	575	410	508	367
44	+ 184	+ 145	274	217	238	188	216	155	545	383	478	328
45	184	150	247	183	238	188	218	172	468	315	516	355
46	148	110	227	185	178	138	178	135	444	305	473	333
47	135	114	204	162	189	146	181	144	434	323	455	323
48	162	120	154	118	188	153	180	128	461	324	418	304
49	127	100	170	142	210	160	145	114	428	303	406	287
50	108	85	127	88	218	166	162	118	400	260	377	256
51	114	87	130	104	0	0	163	128	385	282	418	314
52	118	84	130	88	5	4	150	103	376	278	406	288
53	103	64	114	88	16	14	132	82	300	218	372	274
54	101	82	130	86	21	15	132	80	317	225	358	250
55	108	68	108	82	28	18	133	80	307	220	348	248
56	107	80	111	82	35	24	118	78	345	243	335	240
57	86	68	113	84	38	27	138	85	261	178	318	220
58	85	56	101	68	44	30	110	78	286	200	324	223
59	81	65	111	74	50	33	116	78	283	204	288	208
60	80	46	78	48	55	38	110	72	260	177	307	216

* CADA PASO CORRESPONDE A 1.25×10^{-4} RAD. (2.182×10^{-6} GRADOS).
\+ TIME OUT (ESTOS DATOS NO TIENEN QUE SER TOMADOS EN CUENTA)

FUENTE: ESTOS DATOS FUERON PROPORCIONADOS POR EL DR. J. PALACIOS (INV. DEL IPN) EN COMUNICACION PERSONAL.

NOTA: EL TIEMPO PARA CADA LECTURA FUE: DE 85 seg PARA LAS MEDIDAS RK1211 Y 75 seg. PARA LAS RESTANTES

TABLA 2. RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA ALEACION NIMONIC 80A ($Q_{\perp}$)

	SIN MUESTRA (R1211)		CUERDA (LEJOS DE LA FRAC.) (2 cm.) (R1303)		ENTRE MITAD Y CUERDA (1.5 cm) (R1302)		MITAD (1 cm.) (R1300)		ENTRE MITAD Y FRACTURA (0.5 cm) (R1289)		FRACTURA (0 cm.) (R1287)	
PASOS ↑	DETEC 1 *	DETEC 2 *	DETEC 1 **	DETEC 2 **	DETEC 1 **	DETEC 2 **	DETEC 1 ***	DETEC 2 ***	DETEC 1 **	DETEC 2 **	DETEC 1 **	DETEC 2 **
1	81	68	55	40	87	58	70	55	63	43	233	172
2	104	78	86	57	82	53	62	36	86	53	222	155
3	104	81	81	56	86	53	56	28	77	40	268	208
4	123	80	55	41	88	60	70	44	86	58	288	208
5	131	107	87	55	110	67	72	48	82	57	340	252
6	136	88	84	58	118	74	78	56	78	48	366	282
7	162	128	87	58	111	81	88	50	88	59	410	304
8	170	134	84	67	118	77	78	52	88	64	442	317
9	166	127	88	66	130	85	85	57	101	73	452	328
10	175	135	128	82	140	87	66	48	112	85	510	406
11	188	151	110	82	165	117	78	51	107	73	534	412
12	164	137	158	115	177	122	83	58	121	88	573	416
13	242	183	175	135	181	141	80	54	100	75	628	475
14	258	225	182	143	218	148	84	60	132	86	647	455
15	276	235	252	164	275	188	83	65	127	81	686	501
16	318	273	276	213	304	236	82	61	141	110	755	544
17	410	356	355	261	364	277	104	71	150	108	727	537
18	512	413	407	316	485	355	111	83	158	114	671	482
19	607	515	518	407	607	466	123	87	187	151	600	438
20	763	657	840	656	880	683	*83	*61	213	142	531	403
21	1003	815	1580	1076	1548	1033	*83	*61	242	175	505	378
22	1448	1148	3245	2138	3058	1832	121	88	250	180	458	328
23	2168	1583	3488	2344	3087	2108	121	87	240	181	456	335
24	3740	2330	1834	1458	1611	1171	105	72	326	236	420	313
25	5745	3382	813	734	818	701	110	76	357	258	338	242
26	7446	4367	568	434	588	477	121	81	382	302	*345	*263
27	7604	4532	464	368	434	345	150	103	457	342	*345	*263
28	6865	4373	337	260	382	288	135	86	467	356	341	262
29	4661	3151	273	212	333	244	135	88	523	388	323	240
30	2736	2050	250	185	250	183	178	125	628	480	287	206
31	1773	1478	182	136	237	182	167	128	728	537		
32	1168	988	158	121	183	137	176	135	683	657		
33	812	773	156	112	185	138	184	137	1068	770		
34	651	553	137	86	168	128	184	146	1226	804		
35	582	500	106	71	148	110	183	143	950	725		
36	461	383	115	78	131	88	238	182	763	578		
37	363	304	88	51	123	88	260	184	645	476		
38	317	267	84	66	102	78	288	221	542	418		
39	282	250	81	54	112	76	288	212	450	333		
40	245	200	107	74	106	62	354	277	412	310		
41	220	181	78	54	106	75	*315	*240	307	281		
42	228	182	82	48	65	40	*315	*240	353	271		
43	*184	*145	72	45	102	73	348	250	335	268		
44	*184	*145	55	41	81	57	400	280	265	227		
45	184	150	58	36	102	64	377	293	274	206		
46	148	110					452	335				
47	135	114					510	404				
48	162	120					580	448				
49	127	100					701	527				
50	108	85					778	588				
51	114	87					*826	*687				
52	118	84					*826	*687				
53	103	64					802	720				
54	101	82					1332	940				
55	108	68					1853	1348				
56	107	80					2256	1644				
57	86	68					2262	1663				
58	85	56					1788	1288				
59	81	65					1240	847				
60	80	46					830	741				
61							763	586				
62							657	514				
63							583	455				
64							527	405				
65							446	352				
66							386	307				
67							410	311				
68							373	278				

CONTINUA PAG. 5XL

CONTINUA DE LA PAG. ANTERIOR.

TABLA 2. RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA ALEACION NIMONIC 80A (Q_L)

	SIN MUESTRA (R1211)		CUERDA (LEJOS DE LA FRAC.) (2 cm.) (R1303)		ENTRE MITAD Y CUERDA (1.5 cm) (R1302)		MITAD (1 cm.) (R1300)		ENTRE MITAD Y FRACTURA (0.5 cm) (R1298)		FRACTURA (0 cm.) (R1297)	
PASOS †	DETEC 1 *	DETEC 2 *	DETEC 1 **	DETEC 2 **	DETEC 1 **	DETEC 2 **	DETEC 1 ***	DETEC 2 ***	DETEC 1 **	DETEC 2 **	DETEC 1 **	DETEC 2 **
68							334	254				
70							272	184				
71							252	180				
72							240	183				
73							240	182				
74							233	186				
75							178	134				
76							203	148				
77							183	142				
78							165	123				
79							141	101				
80							143	103				
81							145	107				
82							133	100				
83							107	75				
84							112	75				
85							115	75				
86							110	71				
87							104	63				
88							107	75				
89							91	65				
90							87	68				
91							87	67				
92							67	48				
93							89	56				
94							84	53				
95							68	43				
96							76	51				
97							81	57				
98							88	73				
99							81	44				
100							71	44				
101							77	51				
102							71	34				
103							76	46				
104							64	42				
105							76	46				
106							52	28				
107							63	38				
108							58	40				
109							57	38				
110							66	38				
111							53	30				
112							61	42				
113							70	40				
114							53	33				
115							62	40				
116							67	41				
117							47	28				
118							57	38				
119							53	28				
120							54	38				
	.	.	.	.	.	.			.	.	.	.

† CADA PASO CORRESPONDE A:

* 1.25x10-4 RAD. (2.182x10-6 GRADOS).

** 2.50x10-4 RAD. (4.363x10-6 GRADOS)

*** 1.67X10-4 RAD. (2.909X10-6 GRADOS)

\+ TIME OUT (ESTOS DATOS NO TIENEN QUE SER TOMADOS EN CUENTA)

FUENTE: ESTOS DATOS FUERON PROPORCIONADOS POR EL DR. J. PALACIOS (INV. DEL IPN) EN COMUNICACION PERSONAL.

NOTA: EL TIEMPO PARA CADA LECTURA FUE DE. 95 seg PARA LAS MEDIDAS RK1211 Y 75 seg. PARA LAS RESTANTES

APENDICE B

SUBRUTINAS EMPLEADAS PARA EL CALCULO DE LA SECCION EFICAZ

DESCRIPCION GENERAL:

La FUNCION Jo calcula la función de Bessel del orden cero por métodos numéricos.

La FUNCION SIMPSON evalúa integrales usando "series de Simpson"[41].

La FUNCION SIGMA-TEORICA evalúa la integral (ecuación 2.3.12 del capítulo II):

$$\sigma(\theta)= R^4k^2\left| \int_0^{\pi/2} (1-e^{i\delta\cos\gamma})\ J_o(Rz\ \sin\gamma)\sin\gamma\cos\gamma\ d\gamma \right|^2$$

Donde en FUNCION F se evalúa su argumento.

LA FUNCION LOGNORMAL es la función de distribución de tamaño de las cavidades que se propone para el presente trabajo (ecuación 1.3.1 del capítulo I):

$$n(R)= \frac{1}{R\sqrt{2\pi\sigma}}\ e^{-\ln^2(\bar{R}/R)/2\sigma^2}dR$$

41.- Véase, por ejemplo Svokovski, p. 259.

FUNCION RESOLUCION es una función de distribución Lorenziana Ec. 4.2.2. que se desprende de la curva de resolución, RK1211.

$$L(x)= \frac{p_1}{1+x^2p_2^2/3}$$

LA FUNCION SIGMA_VSANS calcula la sección eficaz esperada en el experimento, y está dada por:

$$\sigma_{TEO-EXP.}(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{R_{MIN.}}^{R_{MAX.}} n(R)\ \sigma(\theta',R)\ dR \right] R(\theta-\theta')\ d\theta'$$

donde n(R) es la FUNCION LOGNORMAL, $\sigma(\theta',R)$ es la FUNCION SIGMA_TEORICA y $R(\theta-\theta')$ es FUNCION RESOLUCION. Véase, ecuación 2.3.16, capítulo II.

PROCEDURE RANGO_R determina los radios mínimo (Rmin) y máximo (Rmax) de una de las anteriores integrales elegidas por el criterio de máximo y mínimos, y pidiendo que el área bajo la curva sea el 99%.

FUNCION SIGMA_TEORICAT Y FUNCION RESOLUCION son subrutinas auxiliares que permiten optimizar el tiempo de programación.

SUBRUTINAS:

```
FUNCTION Jo(X:REAL):REAL;

{ Este subprograma calcula la funcion de Bessel de orden cero por medio de }
{ una aproximacion numerica                                                }

CONST
A:ARRAY[1..73] OF REAL=(-1.7E-19,   1.222E-17,  -7.5885E-16,  4.125321E-14,
      -1.94383469E-12,7.848696314E-11, -2.67925353056E-09,7.608163592419E-08,
      -1.761946907762l5E-06,  3.246032882100508E-05, -4.606281662062750 5E-04,
       4.819180069467 6045E-03,-3.489378941140888 5E-02,1.580871023320972 6E-01,
      -3.700949938726497 8E-01,2.651786132033368 1E-01,-8.723442352852221 9E-03,
       3.154559429497802 4E-01,  -1.0E-20,3.9E-19,  -2.698E-17,   1.64349E-15,
      -8.747341E-14,  4.02833082E-12,  -1.58375525 42E-10,  5.24879478733E-09,
      -1.44072332740 19E-07,   3.2065325376548E-06,     -5.632079141056987E-05,
       7.531135932577742 3E-04,-7.287962479552079 2E-03,4.719668959576338 7E-02,
      -1.773020127811435 8E-01,2.615673462550486 4E-01, 1.790343140771826 8E-01,
      -2.744743055297452 7E-01,   -6.629222640656988 3E-02,   -1.0E-20,2.0E-20,
      -1.1E-19,5.5E-19,   -2.88E-18,  1.831E-17,  -1.0012E-16,     6.7481E-16,
      -5.06903E-15,     4.328596E-14,       -4.3045789E-13,        5.16826239E-12,
      -7.884091377E-11,          1.63064648352E-09,             -5.170594537606E-08,
       3.075184787519 47E-06, -5.365220468132117 4E-04,  1.998920698695037 3E00,
       1.0E-20, -3.0E-20, 1.3E-19, -6.2E-19, 3.11E-18, -1.669E-17, 9.662E-17,
       -6.0999E-16,4.25523E-15,-3.338328E-14, 3.0061451E-13, -3.20874742E-12,
        4.220121905E-11,           -7.2719159369E-10,             1.797245724797E-08,
       -7.414498411060 8E-07,  6.638519942811 65E-05, -3.111170921067401 6E-02);
VAR
     Y,Z,Q1,Q2,Q3,Q4,FX,X1,X2,X3,X4:REAL;
     J,I,N1,N2:BYTE;

BEGIN
  Y:=ABS(X);
  Z:=Y*1.25E-01;
  IF Z<=1 THEN
      IF Z=0 THEN
          BEGIN
            Jo:=1;
            EXIT;
          END
      ELSE
          BEGIN
            X2:=4*SQR(Z)-2;
            N1:=1;
            N2:=18;
          END
  ELSE
      BEGIN
        Z:=1/Z;
        X2:=4*SQR(Z)-2;
        N1:=38;
        N2:=55;
      END;
  FOR J:=1 TO 2 DO
      BEGIN
```

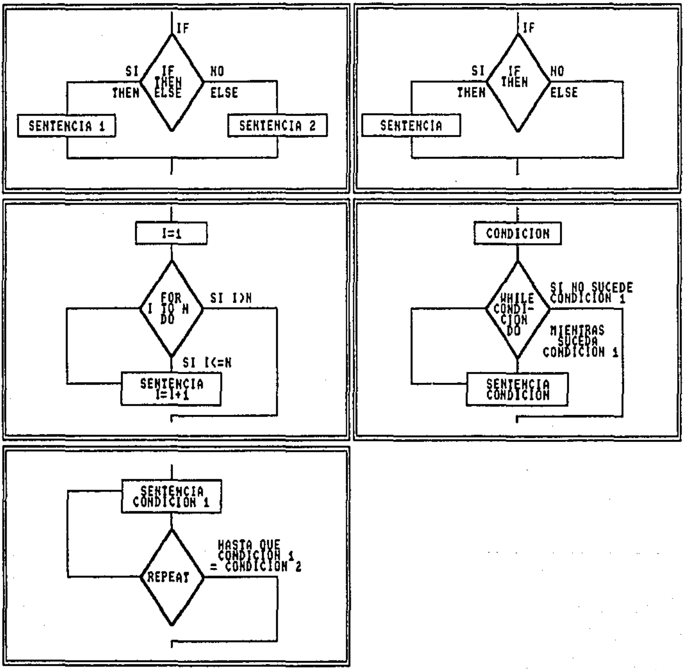
```
        Q3:=0;
        Q2:=0;
        FOR I:=N1 TO N2 DO
            BEGIN
              Q1:=Q2;
              Q2:=Q3;
              Q3:=X2*Q2-Q1+A[I];
            END;
        FX:=(Q3-Q1)*5.0E-01;
        IF (N1-19)<0 THEN
            BEGIN
              Jo:=FX;
              EXIT;
            END
        ELSE
            IF (N1-19)>0 THEN
                BEGIN
                  IF N1=56 THEN
                      BEGIN
                        X2:=COS(Y-7.853981633974483E-01);
                        X3:=SIN(Y-7.853981633974483E-01);
                        X4:=7.978845608028654E-01/SQRT(Y);
                        FX:=FX*Z;
                        Jo:=X4*(X1*X2-FX*X3);
                        EXIT;
                      END
                  ELSE
                      BEGIN
                        X1:=FX;
                        N1:=56;
                        N2:=73;
                      END;
                END
            ELSE
                EXIT;
      END;
END;

FUNCTION SIMPSON(A,B:REAL;N:INTEGER;THETA,RADIO:REAL;NN:BYTE):REAL;
FORWARD;

FUNCTION SIGMA_WEISS(RADI,THTA:REAL):REAL;
CONST  LAMDA=1.874E-10;
VAR    K,R4K2,R1,R2:REAL;
       PART:WORD;
BEGIN
  K:=(2*PI)/LAMDA;
  R4K2:=SQR(SQR(RADI)*K);
  R1:=SIMPSON(0,PI/2,3,THTA,RADI,2);
  R2:=SIMPSON(0,PI/2,3,THTA,RADI,3);
  SIGMA_WEISS:=R4K2*(SQR(R1)+SQR(R2));
END;


FUNCTION SIGMA_TEORICA(TTETHA:REAL):REAL;
VAR RMIN,RMAX:REAL;

PROCEDURE RANGO_R(VAR RMN,RMX:REAL);
```

```
  TM,SM:REAL;

BEGIN
  TM:=SIGMA*SQRT(2*LN(99) );
  SM:=-SQR(SIGMA);
  RMN:=RM*EXP(SM-TM);
  RMX:=RM*EXP(SM+TM);
END;  {Rango_r}

BEGIN
  RANGO_R(RMIN,RMAX);
  SIGMA_TEORICA:=SIMPSON(RMIN,RMAX,3,TTETHA,0.0,1);
END; {Sigma_teorica}


FUNCTION SIGMA_TEORICAT(TTETHA:REAL):REAL;
VAR
   I,J,HI:SHORTINT;
BEGIN
   IF (BANDERA=FALSE) THEN
       BEGIN
         FILLCHAR(YA,SIZEOF(YA),0);
         FOR I:=0 TO 30 DO
             BEGIN
               YA[I]:=SIGMA_TEORICA(I);
               J:=-I;
               YA[J]:=YA[I];
             END;
         BANDERA:=TRUE;
       END;
   HI:=ROUND(TTETHA);
   SIGMA_TEORICAT:=YA[HI];
END;



FUNCTION F(Z,R,THETA:REAL;CASO:CHAR):REAL;
CONST
    DELT=4.13E-06;
    LAMDA=1.87E-10;
    DELTATHETA=2.1816616E-06;
VAR
    W,K,RZ,J:REAL;
BEGIN
  THETA:=THETA*DELTATHETA;
  K:=(2*PI)/LAMDA;
  W:=2*K*DELT*R;
  RZ:=R*K*SIN(THETA);
  J:=Jo(RZ*SIN(Z))*SIN(Z)*COS(Z);
  IF CASO='1' THEN
     F:=SIN(W*COS(Z))*J
  ELSE
     F:=(1-COS(W*COS(Z)))*J;
END;


FUNCTION LOGNORMAL(R:REAL):REAL;
VAR
         D,H,Np,TEM:REAL;
```

```
BEGIN
  Np:=1;
  D:=(Np/(R*SQRT(2*PI)*SIGMA));
  H:=-SQR(LN(R/RM))/(2*SQR(SIGMA));
  TEM:=D*EXP(H);
  IF DERIVADA=TRUE THEN
      TEM:=((-2*H)/(RM*LN(R/RM)))*TEM;  (dRM)
  IF DERIVADA2=TRUE THEN
      TEM:=((-2*H)-1)*TEM;              (dSIGMA)
  LOGNORMAL:=TEM;
END;


FUNCTION RESOLUCION(THEETA:REAL):REAL;
CONST
     P1=5.472E03;
     P2=0.6443;
BEGIN
  RESOLUCION:=(3*P1)/(3+SQR((THEETA)*P2));
END;


FUNCTION RESOLUCIONT(THEETA,THEE:REAL):REAL;
VAR
   I,J,H1,H2:SHORTINT;
BEGIN
   IF (BANDERA2=FALSE) THEN
       BEGIN
         FILLCHAR(YO,SIZEOF(YO),0);
         FOR I:=0 TO 30 DO
             BEGIN
               YO[I]:=RESOLUCION(I);
               J:=-I;
               YO[J]:=YO[I];
             END;
         BANDERA2:=TRUE;
       END;
   H1:=ROUND(THEETA);
   H2:=ROUND(THEE);
   RESOLUCIONT:=YO[H1+H2];
END;


FUNCTION SIMPSON(A,B:REAL;N:INTEGER;THETA,RADIO:REAL;NN:BYTE):REAL;

( Funci"n que emula la Regla de Simpson:                                        )
(                                                                               )
{ ∫f(x)= (b-a)/3n {f(x0)-4f(x1)+2f(x2)+4f(x3)+... +2f(xn-2)+4f(xn-1)+f(xn)} }

VAR
    I:INTEGER;
    H,SIMP,CAMBIO,INCR,INCREMENTO,PASO:REAL;

BEGIN
```

```
 N:=N*2;
 INCR:=(B-A)/N;
 H:=(B-A)/(3*N);
 SIMP:=0;
 FOR I:=0 TO N DO
     BEGIN
       IF (I=0) OR (I=N) THEN CAMBIO:=1;
       INCREMENTO:=I*INCR;
       PASO:=A+INCREMENTO;
       CASE NN OF
           0:SIMP:=SIMP+CAMBIO*(SIGMA_TEORICAT(PASO)*RESOLUCIONT(THETA,PASO));
           1:SIMP:=SIMP+CAMBIO*(LOGNORMAL(PASO)*SIGMA_WEISS(PASO,THETA));
           2:SIMP:=SIMP+CAMBIO*F(PASO,RADIO,THETA,'R');
           3:SIMP:=SIMP+CAMBIO*F(PASO,RADIO,THETA,'I');
       END;
       IF CAMBIO=4 THEN CAMBIO:=2 ELSE CAMBIO:=4;
     END;
  SIMPSON:=SIMP*H;
END;

FUNCTION SIGMA_VSANS(TEET:REAL):REAL;
BEGIN
  SIGMA_VSANS:=SIMPSON(-30,30,30,TEET,0,0);
END;
```

Para aquellos que desconoscan la programación Pascal les será útil la presentación de los diagramas de flujo basicos del Pascal, con lo que se podría reconstruir todo el programa:



APENDICE C

SOLUCION ASINTOTICA DE LA ECUACION DE SCHRODINGER.

Consideremos una partícula moviéndose en un potencial esféricamente simétrico; consideremos, además, que tal potencial $V(r) \longrightarrow 0$ cuando $r \longrightarrow \infty$, con $V(\mathbf{r})=V(r)$. Tal potencial depende únicamente de la magnitud del radio vector a un punto fijo, el cual se tomará como el origen. Dado que el núcleo es mucho más masivo que el neutrón, elegiremos por conveniencia las coordenadas del sistema relativo a la partícula blanco (que coincidirá con el sistema centro de masa). Para describir el movimiento en un potencial de este tipo, es conveniete considerar la ecuación de Schrödinger para la partícula libre (independiente del tiempo)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + (V-E)\Psi = 0 \qquad \text{C.1}$$

donde μ es la masa relativa. Por conveniencia se escribirá C.1 en coordenadas esféricas[42]:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2 \operatorname{sen}\theta}\ \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\ \frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\ \right]+V\Psi = E\Psi \qquad \text{C.2}$$

Esta ecuación es separable[43],como se muestra a continuación:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\ Y(\theta,\phi) \qquad \text{C.3}$$

$$\rightarrow\ \frac{\partial\Psi}{\partial r}=Y\frac{\partial R}{\partial r} \quad , \quad \frac{\partial\Psi}{\partial\theta}=R\frac{\partial Y}{\partial\theta} \quad , \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}=R\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}$$

42.- Véase referencia Eisberg y Resnick, 1986, P. 807.

43.- Por el teorema de unicidad en la solución, ésta solución debe ser única.

sustituyendo en C.2; multiplicando por $-2\mu r^2/\hbar^2$ y $1/RY$ en ambos lados de la igualdad y reagrupando términos, tenemos:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-V] = -\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]$$

ambos lados de esta expresión son claramente independientes una de la otra, por lo que deben ser igual a una constante β.

$\therefore$ las ecuaciones radial y angulares de la ecuación de Schrödinger son[44]:

$$\frac{1}{R}\left[\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-V]\right] = \beta \qquad \text{C.4}$$

$$\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right] = -\beta \qquad \text{C.5}$$

Donde la Ec. C.3 es a su vez separable en

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi) \qquad \text{C.6}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial Y}{\partial\theta}=\Phi\frac{\partial\Theta}{\partial\theta} \quad , \quad \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=\Theta\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}$$

sustituyendo en C.3, multiplicando por $\operatorname{sen}^2\theta$ ambos lados de la igualdad y reagrupando términos, tenemos:

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = \frac{1}{\Theta}\left[\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\Theta\beta\operatorname{sen}^2\theta\right]$$

44.- Como la parte radial depende unicamente de r entonces se transforma en una derivada total.

por lo que, por los mismos argumentos anteriores, debe ser igual a una constante α^2

$$\frac{1}{\Phi}\,\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\alpha^2 \qquad \text{C.7}$$

$$\frac{1}{\Theta}\left[\operatorname{sen}\theta\,\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\,\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\Theta\;\beta\operatorname{sen}^2\theta\right]=\alpha^2 \qquad \text{C.8}$$

Pasemos entonces a encontrar las soluciones de las ecuaciones C.4, C.7 y C.8.

SOLUCION DE $\Phi(\phi)$.

La ecuación C.7, tenemos que puede escribirse como

$$\Phi''+ \Phi\alpha^2 = 0 \qquad \text{C.9}$$

cuya solución es

$$\Phi(\phi) = A\ e^{i\alpha\phi}$$

donde A es una constante arbitraria. Pero Φ no es admisible como función propia, ya que no es, en general, una función de valores simples. Si sumamos 2π a ϕ, nos encontraremos en el mismo punto del espacio y por lo tanto, cuando esto suceda Φ no debe cambiar. Para que Φ tome valores simples impondremos la restricción:

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \qquad \text{C.10}$$

$\Rightarrow\ A\, e^{i\alpha\phi}\, e^{i\alpha 2\pi} = A\, e^{i\alpha\phi} \qquad \Rightarrow \quad e^{i\alpha 2\pi} = 1$

$\therefore$ para que $e^{i\gamma} = \cos\gamma + i\,\mathrm{sen}\gamma = 1$ se satisfaga, $\gamma = 2\pi m$. Donde $m=0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$, por lo tanto

$$\alpha 2\pi = 2\pi m$$

$$\Rightarrow \alpha = m \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \qquad \text{C.11}$$

El valor de A se obtiene normalizando Φ

$$\int_0^{2\pi} |\Phi^2|\, d\phi = 1,$$

por lo tanto

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\therefore \boxed{\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots} \qquad \text{C.12}$$

SOLUCION DE $\Theta(\theta)$.

Multiplicando por $\frac{\Theta}{\mathrm{sen}^2\theta}$ la ecuación C.8, y considerando que $\alpha=m$ (Ec. C.11), tenemos

$$\frac{1}{\mathrm{sen}(\theta)} \frac{d}{d\theta}\left(\mathrm{sen}\theta\, \frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \beta\Theta = \frac{m^2\Theta}{\mathrm{sen}^2\theta}$$

$$\rightarrow \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} + \frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \beta\Theta = \frac{m^2\Theta}{\operatorname{sen}^2\theta}$$

$$\rightarrow \frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \cot\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + \beta\Theta - \frac{m^2\Theta}{\operatorname{sen}^2\theta} = 0 \qquad \text{C.13}$$

para resolver la ecuación C.13 es conveniente introducir un cambio de variable. Sea

$$w = \cos\theta \qquad \text{C.14}$$

que varía entre los límites -1 y +1, esto transforma la función Θ en

$$\Theta(\theta) = G(w). \qquad \text{C.15}$$

aplicando la regla de la cadena tenemos que

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dG}{dw}\frac{dw}{d\theta} = -\operatorname{sen}\theta\frac{dG}{dw} = -(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{dG}{dw} = -(1-w^2)^{\frac{1}{2}}\frac{dG}{dw} \qquad \text{C.16}$$

para calcular $\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}$ hacemos uso del álgebra de operadores

$$\frac{d^2}{d\theta^2} = -(1-w^2)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dw}\left[-(1-w^2)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dw}\right]$$

$$= (1-w^2)\frac{d^2}{dw^2}+(1-w^2)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{1}{2}(1-w^2)^{-\frac{1}{2}}(-2w)\frac{d}{dw}\right]$$

$$= (1-w^2)\frac{d^2}{dw^2}-w\frac{d}{dw} \qquad \text{C.17}$$

nótese además que :

$$\cot\theta = \frac{\cos\theta}{\operatorname{sen}\theta} = \frac{\cos\theta}{(1-\cos^2\theta)^{1/2}} = \frac{w}{(1-w^2)^{1/2}}$$

sustituyendo los resultados anteriores en la ecuación C.13 tenemos que

$$(1-w^2)\frac{d^2G}{dw^2}-w\frac{dG}{dw}\left(\frac{w}{(1-w^2)^{1/2}}\right)\left[-(1-w^2)^{\frac{1}{2}}\frac{dG}{dw}\right]+\beta G-\frac{m^2}{(1-w^2)}G = 0$$

$$\Rightarrow\quad (1-w^2)\frac{d^2G}{dw^2}-2w\frac{dG}{dw}+\left[\beta-\frac{m^2}{(1-w^2)}\right]G = 0 \qquad \text{C.18}$$

La ecuación C.18 es muy conocida en matemáticas, ya que son las Funciones Asociadas de Legendre (como se vera más adelante), multiplicadas por una constante de normalización. Se tiene entonces que

$$G(w)=K\ P_l^{|m|}(z) \qquad \text{C.19}$$

cuya ecuación diferencial es

$$\Rightarrow\ \left[(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}-2u\frac{d}{du}+\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{(1-u^2)}\right]P_l^{|m|} = 0 \qquad [\text{C.35}]$$

por los que los valores propios permitidos para el momento angular son[45]

$$\beta = \ell(\ell+1) \qquad \ell = 0,\ 1\ ,2\ ,\ \ldots \qquad \text{C.20}$$

Finalmente, debemos obtener el valor de la constante K en la ecuación C.19 por condición de normalización, entonces:

$$\int_0^{2\pi}[\Theta(\theta)]^2d\theta=\int_{-1}^{1}[G(w)]^2dw=\int_0^{2\pi}K^2\{P_l^{|m|}(\cos\theta)\}^2d\theta$$

$$=K^2\int_0^{2\pi}\{P_l^{|m|}(\cos\theta)\}^2d\theta$$

45.- Una solución menos artificiosa consite en proponer una solución en serie de potencia y por consiguiente deducir estos últimos resultados. Véase Pauling L and Wilson, 1935 pag 113.

$$(1-w^2)\frac{d^2G}{dw^2}-w\frac{dG}{dw}\left(\frac{w}{(1-w^2)^{1/2}}\right)\left[-(1-w^2)^{\frac{1}{2}}\frac{dG}{dw}\right]+\beta G-\frac{m^2}{(1-w^2)}G=0$$

$$\Rightarrow \quad (1-w^2)\frac{d^2G}{dw^2}-2w\frac{dG}{dw}+\left[\beta-\frac{m^2}{(1-w^2)}\right]G=0 \qquad \text{C.18}$$

La ecuación C.18 es muy conocida en matemáticas, ya que son las Funciones Asociadas de Legendre (como se vera más adelante), multiplicadas por una constante de normalización. Se tiene entonces que

$$G(w)=K\ P_l^{|m|}(z) \qquad \text{C.19}$$

cuya ecuación diferencial es

$$\Rightarrow \left[(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}-2u\frac{d}{du}+\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{(1-u^2)}\right]P_l^{|m|}=0 \qquad \text{[C.35]}$$

por los que los valores propios permitidos para el momento angular son[45]

$$\beta=\ell(\ell+1) \qquad \ell=0,\ 1\ ,2\ ,\ \ldots \qquad \text{C.20}$$

Finalmente, debemos obtener el valor de la constante K en la ecuación C.19 por condición de normalización, entonces:

$$\int_0^{2\pi}[\Theta(\theta)]^2d\theta=\int_{-1}^{1}[G(w)]^2dw=\int_0^{2\pi}K^2\{P_l^{|m|}(\cos\theta)\}^2d\theta$$

$$=K^2\int_0^{2\pi}\{P_l^{|m|}(\cos\theta)\}^2d\theta$$

45.- Una solución menos artificiosa consite en proponer una solución en serie de potencia y por consiguiente deducir estos últimos resultados. Véase Pauling L and Wilson, 1935 pag 113.

usando la ecuación C.37 (véase más adelante la normalizacion de los polinomios de Legendre) y exigiendo que $\Theta(\theta)$ esté normalizada tenemos

$$\int_0^{2\pi}[\Theta(\theta)]^2 d\theta = K^2\left(\frac{2}{2l+1}\ \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\right) = 1$$

$$\therefore \qquad K = \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\ \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right)}$$

$$\therefore \qquad \Theta(\theta) = \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\ \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right)}\ P_l^{|m|}(\cos\theta) \qquad \text{C.21}$$

$$\therefore \qquad \boxed{\Theta_{l,|m|}(\theta)=\sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\ \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\ P_l^{|m|}(\cos\theta) \qquad \begin{matrix} l = 0\ ,1\ ,2\ ,\ \ldots \\ m = 0\ ,\pm1\ ,\pm2\ ,\ \ldots \end{matrix}} \qquad \text{C.22}$$

SOLUCION DE R(r).

Ya hemos demostrado que $\beta=l(l+1)$ (l = 0, 1 ,2 , ...); así que la ecuación C.4 toma la forma:

$$\frac{1}{R}\left[\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E-V\right]R\right]= l(l+1) \qquad \text{C.23}$$

multiplicada por $\frac{R}{r^2}$ esta ecuación se transforma en

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}R\left[E-V\right]-\frac{1}{r^2}\ell(\ell+1)R = 0 \qquad \text{C.23.a}$$

nos interesa obtener la expresión asintótica del valor de la componente radial (ya hemos supuesto que el potencial $V(r)\longrightarrow 0$ cuado $r \longrightarrow \infty$); así que, como primera aproximación, supongamos que $V(r)\cong 0$; por lo tanto, esta ecuación se transforma en

$$\frac{1}{r^2}r^2\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2r}{r^2}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}ER-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R=0$$

como $E=\frac{p^2}{2m}$ y $p=\hbar k \rightarrow k^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}E$

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R=0$$

reagrupando términos tenemos

$$\frac{1}{k^2}\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{kr}\frac{1}{k}\frac{dR}{dr}+\left[1-\frac{\ell(\ell+1)}{(kr)^2}\right]R=0 \qquad \text{C.24}$$

haciendo un cambio de variable. Sea $\rho=kr$, entonces

$$\frac{d}{d\rho}=\frac{dr}{d\rho}\frac{d}{dr}=\frac{1}{k}\frac{d}{dr} \; ; \qquad \frac{d^2}{d\rho^2}=\frac{1}{k^2}\frac{d^2}{dr^2}$$

por lo que la ecuación C.24 se transforma en

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R=0 \qquad \text{C.25}$$

La ecuación C.25 es muy conocida en matemáticas, ya que son las Funciones Esféricas de Bessel (véase más adelante), multiplicadas por una constante de normalización C_l.

$$R_{kl}(R) = C_l j_l(R) \qquad \text{C.26}$$

donde $j(\rho)=\sqrt{\frac{2}{\pi\rho}}J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$ y $J(\rho)$ es la función de Bessel ordinaria (cilíndrica), y C_l es una constante de normalización para la l-esima onda. Véase ecuación C.43.

cuya solución asintótica es

$$j_l \underset{\rho\longrightarrow\infty}{\approx} \frac{1}{\rho}\,\mathrm{sen}(\rho-\tfrac{1}{2}l\pi)$$

ya que V(r) resulta despreciable para r grande, la presencia del potencial no puede alterar la forma funcional, pero sí podría alterar la fase de la función senoidal. Entonces, se tiene que

$$R_{kl} \underset{\rho\longrightarrow\infty}{\approx} \frac{\mathrm{sen}(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)}{kr} \qquad \text{C.27}$$

$$\boxed{R_{kl}\approx C_l\,\frac{\mathrm{sen}(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)}{kr}} \qquad \text{C.28}$$

donde δ_l es una constante (el corrimiento de fase), y el factor común se ha elegido de acuerdo con la normalización de la función de onda «en la escala k». La constante de fase δ_l se determina mediante la condición de contorno (finitud de R_{kl} para $r \to 0$), para lo que que hay que resolver la ecuación de Schrödinger exacta, y no se puede calcular de forma general. Los corrimientos de fase δ_l son funciones tanto de l como de k, y constituyen una importante característica de las funciones de onda del espectro continuo.

POLINOMIOS Y FUNCIONES ASOCIADAS DE LEGENDRE; ARMONICOS ESFERICOS.

POLINOMIOS DE LEGENDRE

Las Funciones de Legendre o Polinomios de Legendre $P_l(z)$ pueden ser definidas por medio de una función generadora $T(t,z)$ tal que:

$$T(t,z) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)t^l \equiv \frac{1}{\sqrt{1-2tz+t^2}} \qquad l = 0,1,2,\ldots,\infty \qquad \text{C.29}$$

Derivando la función generatriz respecto a t y a z podemos encontrar algunas de sus relaciones de recurrencia.

$$(l+1)P_{l+1}(z)-(2l+1)zP_l(z)+lP_{l-1}(z)= 0 \qquad \text{C.30}$$

$$P'_{l+1}(z)-2zP'_l(z)+P'_{l-1}(z)-P_l(z)=0 \qquad \text{C.31}$$

Una relación más simple puede ser obtenida por la combinación de C.30 y C.31

$$P'_{l+1}(z)-zP'_l(z))-(l+1)P_l(z)=0 \qquad \text{C.32}$$

Combinando estos resultados se puede encontrar la ecuación diferencial que satisface $P_l(z)$.

$$\therefore \quad \frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{dP_l(z)}{dz}\right]+\ell(\ell+1)P_l(z) = 0 \qquad \text{C.33}$$

esta es la ecuación diferencial que satisfacen los Polinomios de Legendre.

FUNCIONES ASOCIADAS DE LEGENDRE:

Las Funciones Asociadas de Legendre de grado ℓ y orden $|m|$ (con valores ℓ=0,1,2.. y $|m|$=0,1,2...ℓ), en término de los Polinomios de Legendre, se definen por medio de la ecuación

$$P_l^{|m|}(z) = (1-z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}} P_l(z) \qquad \text{C.34}$$

y cuya ecuación generadora es

$$T(t,z)=\sum_{l=0}^{\infty} P_l^{|m|}(z)t^l \equiv \frac{t^{|m|}}{[1-2tz+t^2]^{m+1/2}}(2m-1)!!(1-u^2)^{\frac{1}{2}m}$$

La ecuación diferencial que satisface esas funciones puede ser encontrada al tomar la ecuación C.33 y derivarla m veces y, reagrupando términos, obtenemos

$$(1-z^2)\frac{d^2P_l^{|m|}(z)}{dz^2} -2z\frac{dP_l^{|m|}(z)}{dz} +(\ell(\ell+1) -\frac{|m|^2}{(1-z^2)})P_l^{|m|}(z) = 0 \qquad \text{C.35}$$

con sus respectivas funciones de recurrencia

$$(\ell+1-m)P_{l+1}^{|m|}(z)-(2\ell+1)zP_l^{|m|}(z)+(\ell+m)P_{l-1}^{|m|}(z)=0 \qquad \text{C.36}$$

$$(1-z^2)\frac{d}{dz}\left[P_l^{|m|}(z)\right]=-lzP_l^m(z)+(l+m)P_{l-1}^m(z)$$

$$=(l+1-m)P_{l+1}^m(z)-(\ell+1)zP_l^m(z)=$$

cuya función normalizada[46]

$$\int_{-1}^{1}P_{l'}^{|m|}P_l^{|m|}(z)dz = \begin{cases} 0 & \text{si } \ell'\neq \ell \\ \frac{2}{2\ell+1}\,\frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!} & \text{si } \ell'=\ell \end{cases} \qquad \text{C.37}$$

FUNCIONES DE BESSEL Y FUNCIONES ESFERICAS DE BESSEL.

FUNCIONES DE BESSEL (CILINDRICAS).

Por definición[47], en coordenadas cilíndricas, la función Generadora de las funciones de Bessel de orden n se definen como

$$e^{z(t-1/t)/2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}J_n(z)t^n \qquad \text{C.38}$$

donde

$J_n(z)$ satisface la ecuación diferencial[48]

46.- Para mayor detalle de como se obtiene esta normalizacion consultese a Pauli L y Wilson E., 1935, P. 448.

47.- Véase Marsden, 1979, P. 382. De esta función generadora se desprenden algunas importantes relaciones de Bessel.

48.- El procedimiento que deduce esta ecuación diferencial así como algunas propiedades importantes es análoga al que se aplicó para los Polinomios de Legendre (Ec. B.19) por lo que es innecesario deducirlas.

$$\frac{d^2}{dz^2}J_n(z)+\frac{1}{z}\frac{d}{dz}J_n(z)+\left(1-\frac{n^2}{z^2}\right)J_n(z)=0 \qquad \text{C.39}$$

J_n y J_{-n} satisfacen la ecuación anterior

Las funciones de Bessel tienen muchas propiedades interesantes que pueden demostrarse a través de la función generadora. Tal como las siguientes relaciones de recurrencia:

$$zJ_{n-1}(z)-2nJ_n(z)+zJ_{n+1}(z) = 0 \qquad \text{C.40}$$

$$\frac{d}{dz}J_n(z)=\frac{1}{2}J_{n-1}(z)+\frac{1}{2}J_{n+1}(z) \qquad \text{C.41}$$

$$\frac{d}{dz}\left\{z^nJ_n(z)\right\}=z^nJ_{n-1}(z)$$

FUNCIONES ESFERICAS DE BESSEL.

Un caso especial de las Ecuaciones de Bessel (C.39) son las Funciones Esféricas de Bessel $j_n(\rho)$, cuya ecuación diferencial que la satisface es:

$$\frac{d^2}{d\rho^2}j_n(\rho)+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}j_n(\rho)+\left(1-\frac{n(n+1)}{\rho^2}\right)j_n(\rho)=0 \qquad \text{C.42}$$

y que están relacionadas mediante la ecuación

$$j_n(\rho)=\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}\,J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) \qquad \text{C.43}$$

donde $J_{n+\frac{1}{2}}(\rho)$ es la Función de Bessel ordinaria (cilíndrica) de orden $n+\frac{1}{2}$.

cuya solución asintótica tiene la forma

$$j_n(\rho)_{\rho\longrightarrow\infty} \approx \frac{1}{\rho}\sin(\rho-\tfrac{1}{2}l\pi) \qquad \rho>>l(l+1)$$

cuyas relaciones de recurrencia son[49]

$$\Rightarrow \qquad (2l+1)j_l(\rho) = \rho j_{l-1}(\rho) + \rho j_{l+1}(\rho) \qquad \text{C.44}$$

$$\therefore \quad \frac{d}{d\rho}(j_l) = \left(\frac{l}{2l+1}\right)j_{l-1}(\rho) + \left(\frac{l+1}{2l+1}\right)j_{l+1}(\rho) \qquad \text{C.45}$$

que pueden reescribirse como

$$(2l+1)J_l=\rho[J_{l+1}+J_{l-1}] \qquad \text{C.46}$$

$$J_{l-1}=\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{l+1}{\rho}\right)J_l \qquad \text{C.47}$$

49.- Estas relaciones se puede probar a través de la relación:

$$j_n(\rho)= \sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{\frac{1}{\rho}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(\rho)$$

de la funcion de Bessel.

APENDICE D

Sea x una variable aleatoria que obedece una ley de Probabilidad Normal [Parzen, 1929, pag. 180]:

$$f_x(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\,e^{-\frac{1}{2}((x-m)/\sigma)^2} \qquad \text{D.1}$$

donde m es la media y σ^2 es la desviación estandar de la distribución normal. Estos parámetros son independientes.

Se dice que la variable aleatoria Y obedece la ley de probabilidad Log-Normal, si

$$Y=e^x \qquad \text{D.2}$$

Y la densidad de probabilidad esta dada por [Parzen, 1929, P. 312]:

$$f_y(y)=f_x[\,g^{-1}(y)]\left|\frac{d}{dy}\,g^{-1}(y)\right| \qquad \text{si} \quad \alpha<y<\beta \qquad \text{D.3}$$

donde

$y=g(x)$, $\alpha=\text{mín}(\alpha',\beta')$ y $\beta=\text{máx}(\alpha',\beta')$

con

$$\alpha'=\lim_{x\to-\infty} g(x) \qquad y \qquad \beta\alpha'=\lim_{x\to\infty} g(x)$$

En nuestro caso $g(x)=e^x$ y $\alpha'=0$, $\beta'=\infty$ $\rightarrow$ $\alpha=0$ y $\beta=\infty$

de D.3 y D.1

$$f_y(y)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\,e^{-\frac{1}{2}((\ln\, y-m)/\sigma)^2}\left|\frac{d}{dy}\ln\, y\right|$$

$$\rightarrow \quad f_y(y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \frac{1}{y} e^{-\frac{1}{2}((\ln y - m)/\sigma)^2} \qquad D.4$$

la media μ y varianza δ^2 de esta distribución es según Parzen (Pag. 348):

$$\left.\begin{aligned} \mu &= e^{m+\frac{1}{2}\sigma^2} \\ \delta^2 &= e^{2m+2\sigma^2} - e^{2m+\sigma^2} \end{aligned}\right\} \qquad D.5$$

La Ec.D.4 puede quedar (omitiendo el subíndice y) como

$$f(y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \frac{1}{y} e^{-\frac{1}{2}(\ln^2 y/y^*)/\sigma^2} \qquad D.6$$

con

$$\ln y^* = m \qquad D.7$$

Esta es la ecuación sugerida para la distribución del tamaño de las cavidades dentro de una muestra sometida a termofluencia. No obstante, no debe interpretarse y^* como el radio promedio, ni a σ^2 como la dispersión de los radios. Estos son los que dan las Ecs. D.5.

BIBLIOGRAFIA

1 Ashby M. F., Gandhi C. and Taplin D. M. R., FRACTURE-MECHANISM MAPS AND THEIR CONSTRUCTION FOR F.C.C. METALS AND ALLOYS, Vol. 27, pp. 699-729, Acta. Met., 1979.

2 Bacon G. E., NEUTRON DIFRAFRACTION, third edition, Clarendon Press, Oxford, 1975.

3 Bransden B. H. ATOMIC COLLICION ON THEORY, W. A. Benjamin Inc., N. Y., 1970.

4 Chen I. W. and Argon A. S., CREEP CAVITACION IN 304 STAINLESS STEEL, vol. 29, PP. 1321-1333,Act. Metall., 1981.

5 Eisberg R. y Resnick R., FISICA CUANTICA, Limusa, México, 1986.

6 Ferdova I. S. and Schmidt. P. W., A GENERAL ANALYTICAL METHOD FOR CALCULATING PARTICLE-DIMENSION DISTRIBUTIONS FROM SCATTERING DATA, J. Appl. Cryst., Vol 11, 405-411, 1978.

7 Gerold V. and Kostorz G. SMALL-ANGLE SCATTERING APLICATIONS TO MATERIALS SCIENCE", J. Appl. Cryst., Vol. 11, 367-404, 1978.

8 Guinier A. and Fournet G., SMALL ANGLE SCATTERING OF X-RAYS, John Wiley, New York, 1955.

9 Holton G. y Roller D., FUNDAMENTOS DE FISICA MODERNA, Reverte Barcelona, 1963.

10 Institut Max Von Lau, Paul Langevin, Grenoble, France, NEUTRON RESEARCH FACILITIES AT THE ILL FLUX REACTOR, Edition of june, 1986.

11 Kostorz G., SMALL-ANGLE SCATTERING AND ITS APPLICATIONS TO MATERIALS SCIENCE, T tise on Material Science and Tecnology, Vol 15, pp. 227-289, 1979.

12 Kostorz G., "Small-Angle Scattering", Secc. 5.1 PP. 829-833, en Cahn R. W. and Haase P, Editores, PHYSICAL METALLURGY, Part I, Third Edition, North-Holland Physics Publishing, Amsterdam, 1983.

13 Ladislau Marton, METHODS OF EXPERIMENTAL PHYSICS, Vol. 23, parte A: NEUTRON SATTERING, Academic Press, N. Y., 1959.

14 Landau L. D. y Lisfshitz E. M., QUANTUM MECHANICS, NON-RELATIVISTIC THEORY, Addison-Wesley, 1958.

15 Lang J. and Müller, A PROCEDURE FOR NONLINEAR LEAST SQUARES REFINEMENT IN ADVERSE PRACTICAL CONDITIONS, Computer Physics Comunications 2, North-Hollan Publishing Company, 1971.

16 Lehmann, INTERACTION OF RADIATION WITH SOLIDS AND ELEMENTARY DEFECT PRODUCTION, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1977.

17 Marsden Jerrold E. BASIC COMPLEX ANALYSIS, W. H. Freeman and Company, N. Y., 1973.

18 McLean D., A NOTE ON THE METALLOGRAPHY OFCRACKING DURING CREEP, Journal of the Institute of Metals, Vol. 85, pp. 468-472, 1957.

19 Melissinos Adrian C. EXPERIMENTS IN MODERN PHYSICS, Academic Press, N. Y. 1969.

20 Monkkenbuch Michael, DEMUXIMUX: REMOVAL OF MULTIPLE SCATTERING FROM SMALL-ANGLE DATA, Computer Programs, J. Appl. Cryst, Vol. 24, 1991.

21 Palacios J., Schwahn D. and Rauch H., HIGH ANGULAR RESOLUTION NEUTRON TRANSMISSION MEASUREMENT- A PROPOSED NON-DESTRUCTIVE MATERIALS TESTING METHODS, NDT-International, Agosto de 1980.

22 Parzen Emanuel, MODERN PROBABILITY THEORY AND ITS APPLICATIONS, J. Willey, N. Y., 1929.

23 Paulin L. and Wilson E. S., INTRODUCCION TO QUANTUM MECHANICS WITH APPLICATION TO CHEMISTRY, Mc Graw-Hill, N. Y., 1935.

24 Rodberg Leonars and Thaler R.M; INTRODUCTION TO THE QUANTUM THEORY OF SCATTERING, Academic Press, N.Y. 1967.

25 Saxon David S., ELEMENTOS DE MECANICA CUANTICA, EASO, México, 1968.

26 Schiff L. I., QUANTUM MECHANICS, McGraw-Hill, N. Y., 1950.

27 Schmatz W., Springer T. and Schelten J., NEUTRON SMALL-ANGLE SCATTERING: EXPERIMENTAL TECHNIQUES AND APPLICATIONS, J. Appl. Cryst, Vol. 7, pp 96-116, 1974.

28 Schmatz W.. NEUTRON SMALL-ANGLE SCATTERING: EXPERIMENTAL TECHNIQUES AND APLICATIONS, Proceeding of the conference on Neutron Scattering Vol II Catlingburg Tenesse USA, June 6-10, 1976.

29 Schwahn D. and Palacios J., EVALUATION OF CREEP INDUCED CAVITIES IN ALLOY 713 LC AND NIMONIC 80 A USING NEUTRON SCATTERING, Mimeo, s.f.

30 Swokowski, Earl W., CALCULO CON GEOMETRIA ANALITICA, Wadsworth Internacional Iberoaméricana, 1982.

31 Weaver C. W., INTERGRANULAR, STRUCTURE, AND CREEP OF A NIMONIC 80A-TYPE ALLOY, Journal of the Institute of Metal, Vol. 88, pp. 296-300, 1959.

32 Weaver C. W. INFLUENCE OF HEAT-TREATMENT AND COMPOSITION ON THE MICROSTRUCTURE AND CREEP BEHAVIOUR OF A NIMONIC 80A-TYPE ALLOY, Journal of the Institute of Metal, Vol. 88, pp. 462-467, 1959.

33 Weiss R. J., SMALL ANGLE SCATTERING OF NEUTRONS, Phys. Rev. Vol. 83, pp. 379-389, 1951.

34 Yang M. S., Weertman J. R. and Roth M., "small angle neutron scattering studies of microstructural changes in copper deformed at elevated temperatures", en MICROSTRUCTURAL CHARACTERIZACION OF MATERIALS BY NON-MICROSCOPICAL TECHNIQUES, Proceeding of the 5tH RisO International Symposium on Metallurgy and

Materials Science, 3-7 September, 1984, P. 589.

35 Zachariasen W. H., THEORY OF X-RAY DIFFRACTION IN CRYSTALS, Dover Publications Inc., New York, 1967.