

CALCULO DE LA ORIENTACION PREFERENCIAL EN POLICRISTALES DE HIELO
UTILIZANDO UN METODO COMPUTACIONAL

Elena L.M. de Achával y María Victoria Carrhilo

Servicio Meteorológico Nacional
Buenos Aires, República Argentina

RESUMEN

Se utiliza un método computacional para calcular la orientación de cristales con respecto a la dirección de crecimiento, en muestras policristalinas. Se aplica a acreciones obtenidas en túnel de viento y a granizos naturales. Los valores más significativos de orientaciones preferenciales, se relacionan con la temperatura del aire y del sustrato.

Los resultados se discuten en función de la teoría de solidificación para gotas de agua sobreenfriada que impactan sobre un sustrato de hielo y se discute su aplicación al análisis de granizos naturales.

ABSTRACT

The distribution of c-axis crystallographic orientation are calculated as a function of the angle between the c-axis and the radial growth direction, using a computational method. The method is applied to wind tunnel accretions as well to hailstones. The peaks having a significance level higher than 0,95 are analysed as a function of the air and substrate temperatures.

The results are discussed on the basis of the solidification theory for supercooled droplets impinging on an ice substrate and their application to hailstones is considered.

INTRODUCCION

Una frase tradicional de List expresa: "El estudio de la estructura de las piedras de granizo permite una adecuada interpretación de su historia en la nube".

Cronológicamente, uno de los primeros estudios cuantitativos realizados, consistió en la determinación de la orientación preferencial de los cristales que forman las acreciones obtenidas en túnel de viento refrigerado. En forma similar se estudiaron los granizos naturales (Aufdermaur y otros, 1963; Levi y Aufdermaur, 1970; Levi y otros, 1974).

La técnica utilizada implica cortar las muestras por planos que pasen por el centro de crecimiento, evaporar en forma controlada la superficie en estudio con el fin de obtener figuras de corrosión y preparar las réplicas de formvar. A continuación se analiza la réplica para determinar la distribución de frecuencias del ángulo formado por el eje c de cada cristal con la dirección de crecimiento (φ).

En su estudio de acreciones artificiales, Levi y otros (1976), caracterizaron cada muestra mediante el valor medio de φ ($\bar{\varphi}$) y lo graficaron en función de la temperatura del aire (T_a), utilizando la temperatura del sustrato (T_s) como parámetro, según se muestra en la figura 1.

Se observa que a cada par de valores de las temperaturas T_a , T_s le corresponde un valor de $\bar{\varphi}$, pero determinado $\bar{\varphi}$ en cada capa de un granizo natural, debe optarse entre pares de valores de T_a, T_s que corresponderían a las condiciones de crecimiento de esa capa. La elección se realiza considerando la posible evolución del granizo en la nube. Tratando de obviar esta indeterminación, Macklin analizó sus resultados buscando relacionarlos con un solo parámetro. En 1974 publicó distribuciones de frecuencias de φ calculadas al grado, que corresponden a seis acreciones distintas.

Encuentra máximos estadísticamente significativos. de los que afirma que dependen exclusivamente de T_B .

Para decidir cuanto influye T_B en los valores de φ y elegir el valor de φ más representativo para cada muestra, se recalcula los valores de φ correspondientes a las acreciones artificiales del trabajo de Levi y otros (1974) utilizando un método computacional que posibilita su determinación en forma más exacta.

DETERMINACION DE φ

En la Figura 2 se ve el esquema de una figura de corrosión, similar a las observadas en las réplicas, que permite determinar experimentalmente los ángulos que se definen a continuación:

θ : ángulo entre el eje c de cada cristal con su proyección c' en el plano de la réplica.

η : ángulo entre c' y la dirección de crecimiento del cristal.

α, β, δ : proyecciones de los ángulos formados por la intersección de las caras laterales con el plano de la réplica
Estos ángulos satisfacen la relación $\beta \geq \alpha \geq \delta$.

δ : ángulo entre un eje a y la normal al plano de la réplica, tal que contenga al eje c. Se cumple que $0 < \delta < 30^\circ$.

φ se halla a partir de α , β y η mediante las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \alpha &= \cos \theta \operatorname{cotg} (60^\circ - |\delta|) & 0^\circ < \alpha < 60^\circ \\ \operatorname{tg} \beta &= \cos \theta \operatorname{cotg} (60^\circ - |\delta|) & 0^\circ < \beta < 90^\circ \\ \cos \varphi &= \operatorname{sen} \theta \cos \eta & \alpha + \beta < 120^\circ \\ & & 0^\circ < \eta < 90^\circ \end{aligned}$$

Puede calcularse también a partir de α , δ y η utilizando

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \alpha &= \cos \theta \operatorname{cotg} (60^\circ - |\delta|) & 0^\circ < \alpha < 60^\circ \\ \operatorname{tg} \delta &= \cos \theta \operatorname{cotg} (60^\circ - |\delta|) & 0^\circ < \delta < 30^\circ \\ \cos \varphi &= \operatorname{sen} \theta \cos \eta & \alpha + \delta < 60^\circ \\ & & 0^\circ < \eta < 90^\circ \end{aligned}$$

Se desarrolló un programa en lenguaje ALGOL para calcular θ , φ y las siguientes funciones:

- a) La distribución $f(\varphi)$ tal que $f(\varphi) d\varphi$ da la probabilidad de que el ángulo pertenezca al intervalo $(\varphi, \varphi + d\varphi)$.
 b) La probabilidad p' de obtener una determinada orientación debida a un fenómeno físico en la que se ha eliminado el efecto de la distribución al azar, dada por

$$p'(\varphi_i < \varphi < \varphi_j) = \frac{P(\varphi_i < \varphi < \varphi_j)}{\int_{\varphi_i}^{\varphi_j} \text{sen } \varphi d\varphi} \quad \varphi_j = \varphi_i + 1^\circ$$

- c) Se obtienen además las gráficas de $f(\varphi)$ y $p'(\varphi)$ en intervalos de 1° y los gráficos de estas funciones aplicando promedios móviles de orden 5, para suavizar las variaciones debidas a errores experimentales.

ANALISIS DE LOS RESULTADOS

La figura 3 corresponde al gráfico de $f(\varphi)$, aplicando promedios móviles de orden 5, para una muestra obtenida a $T_a = -22^\circ\text{C}$ y $T_g = -15^\circ\text{C}$.

Se observan picos de frecuencia. Se determinan a partir de ellos los intervalos en que se presentan máximos relativos, y se calcula el nivel de significación de estos picos mediante la evaluación de la probabilidad de obtener una frecuencia para φ mayor o igual que la obtenida experimentalmente, considerando el proceso totalmente al azar.

La probabilidad p de que φ pertenezca al intervalo (φ_i, φ_j) , si el proceso es al azar, es

$$p = \int_{\varphi_i}^{\varphi_j} \text{sen } \varphi d\varphi = \cos \varphi_i - \cos \varphi_j$$

Por lo tanto, la probabilidad de obtener un número de ocurrencias de φ mayor o igual que n , en el intervalo (φ_i, φ_j) es:

$$P(x \geq n) = 1 - P(x < n) = 1 - \sum_{k=0}^{n-1} \binom{N}{k} p^k (1-p)^{N-k}$$

donde N es el número total de ocurrencias de φ .

Si $N > 100$ la distribución binomial puede ser aproximada por la de Poisson obteniéndose

$$P(x > n) = 1 - P(x < n) = 1 - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{m^k \exp(-m)}{k!}$$

donde $m = n.p$.

En la Tabla 1 se dan los valores que resultan de la aplicación del método a 10 acreciones artificiales obtenidas en túnel de viento refrigerado. El análisis de los resultados expuestos permite afirmar que la ubicación de los máximos depende tanto de T_a como de T_g . Esta discrepancia con los resultados de Macklin (1974) puede ser atribuida a que este autor sólo trabajó con temperaturas del sustrato relativamente altas ($T_g = -2^\circ\text{C}$; $T_a = -7^\circ\text{C}$). Tanto en la Tabla 1 como en la Figura 1 se aprecia que la influencia de T_g se hace más evidente cuando varía de -10°C a -15°C . Resulta entonces que el método no evita la elección obligatoria entre pares de valores de T_a , T_g cuando se aplica al análisis de granizos naturales.

Por otra parte, desde un punto de vista teórico Macklin, en el trabajo ya citado, relaciona la ubicación de los máximos, es decir de los ángulos que denomina "ángulos de crecimiento", con el ángulo α de separación de las dendritas con respecto al plano basal, ya que afirma que éstos ángulos provienen de la formación de dendritas dentro de la gota y en consecuencia dependerían sólo de su temperatura, que coincide con la temperatura del aire. Macklin fija como límite máximo de α el valor de 32° . Aún aceptando la hipótesis de Levi y otros (1974) que admiten que α puede alcanzar los 45° , la interpretación de Macklin no sería aplicable a los máximos próximos a 50° que se observan en la Tabla 1.

Otra sería objeción que debe hacerse con respecto a la interpretación de los máximos es que los niveles de significación están tomados con respecto a la distribución senoidal lo que sig-

nifica la aceptación implícita de que la rotación del granizo es uniforme, alrededor de ejes que varían aleatoriamente, hecho no admitido por los especialistas en el tema. Esta variación del eje de rotación tampoco se produce en las acreciones artificiales, ya que se obtienen generalmente sobre cilindros que giran uniformemente sobre un eje determinado. Es decir, aunque los máximos son estadísticamente significativos con respecto a p , no es obvio que esta función describa el proceso aleatorio de la orientación de los cristales.

CONCLUSIONES

El método de cálculo se utiliza actualmente como tarea de rutina ya que permite evaluar con mayor precisión las distribuciones de frecuencias de θ y φ . En particular permitió detectar comportamientos distintos en las distribuciones de θ , fenómeno atribuible al efecto de los gradientes térmicos. (Levi, L., comunicación privada).

Cabe esperar que la aplicación sistemática del método lleve a una mejor comprensión de los mecanismos que operan durante la solidificación de gotas sobreenfriadas y en consecuencia se logre mejorar la interpretación de los procesos microfísicos que dan lugar a la formación de las piedras de granizo.

BIBLIOGRAFIA

- Aufdermaur, A. N. y otros, 1963; Kristallachsenlagen in Hagelkornern; Z. angew. Math. Phys., 14, 574
- Levi, L. y Aufdermaur, A. N., 1970; Crystallographic orientation and crystal size in cylindrical accretions of ice; J. Atmos. Sci., 27, 443.
- Levi, L. y otros, 1970; Crystal orientation in a wet growth hailstone; J. Atmos. Sci., 27, 512.
- Levi, L. y otros, 1974; Structure of ice grown from droplet ac-

- cretion and solidification process; J. Crystal Growth, 22, 303.
- Levi, L. y otros, 1976; Estructura de granizos y su vinculación con las condiciones ambientales; GEOACTA. 8, 25.
- Nacklin, W.C. y Rye, P.J., 1974; Crystallographic orientation distribution in accreted ice; J. Atmos. Sci., 22, 452.

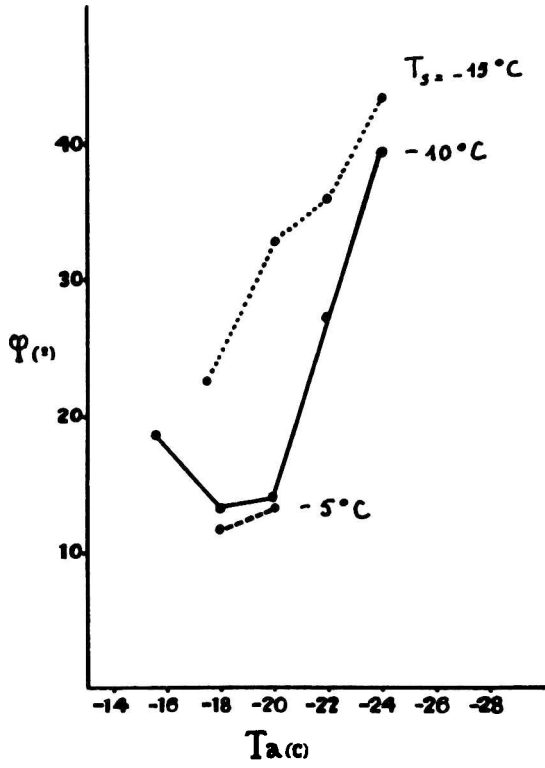


Fig. 1: Angulo $\bar{\Phi}$ en función de T_a con T_g como parámetro. (De Levi y otros, 1976)

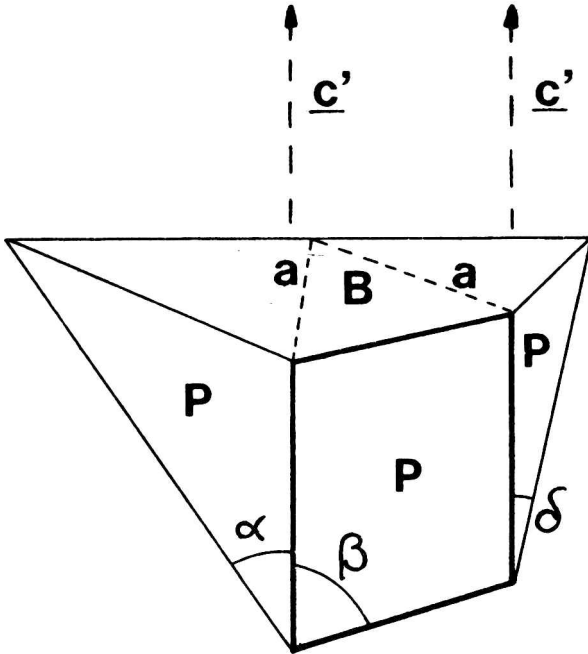


Fig. 2: Esquema de una figura de corrosión. Se indican los ángulos α , β y δ que deben ser medidos para calcular el ángulo θ entre c y c' , es decir la inclinación del eje c con respecto al ángulo de la réplica. Las tres caras prismáticas se indican con P y B corresponde al plano basal. (De Aufdermaur y otros, 1963)

Fig. 3: Distribución de $f(\psi)$ tal que $f(\psi)$ d ψ da la probabilidad de que el ángulo pertenezca al intervalo $(\psi, \psi + d\psi)$.
Corresponde a una muestra obtenida a $T_a = -22^\circ\text{C}$ y $T_g = -15^\circ\text{C}$.

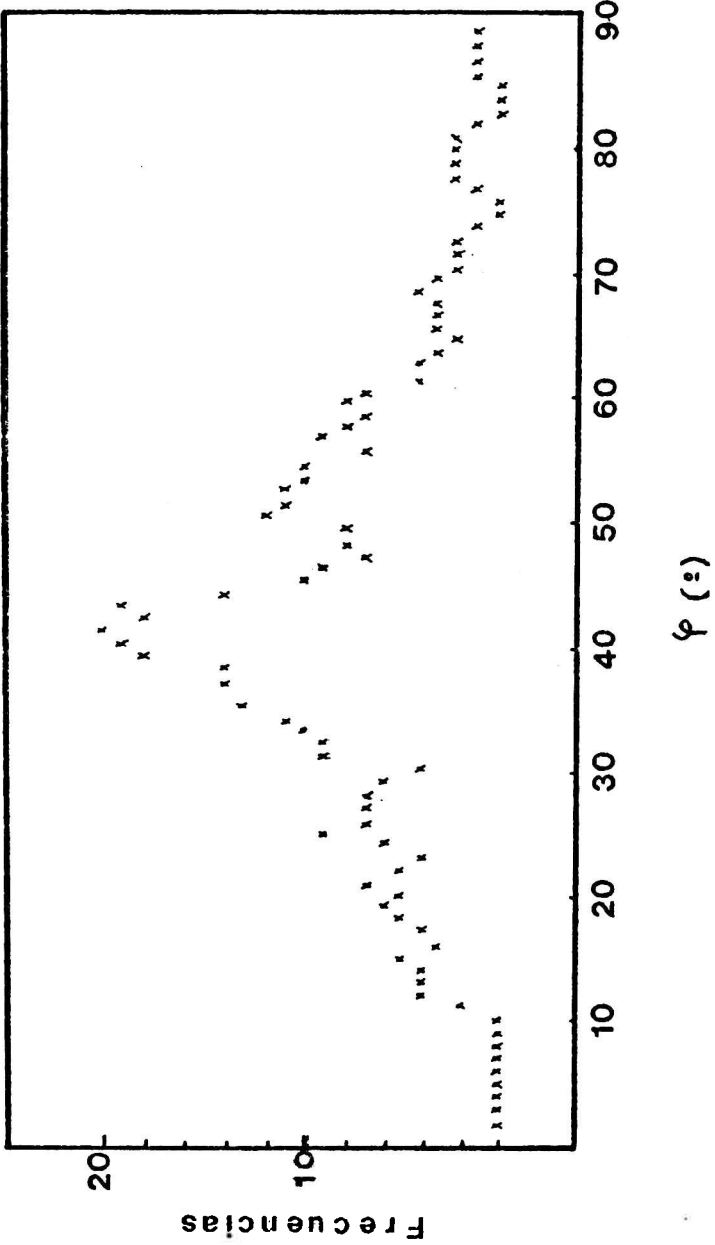


TABLA 1

Muestra N°	T _a (°C)	T _s (°C)	(°)	max	P(x > n)
1	-12,5	- 9	10-25	19	$< 10^{-10}$
			25-33	26	$4 \cdot 10^{-2}$
2	-18	- 4,5	2-24		$2 \cdot 10^{-10}$
			28-36		$4 \cdot 10^{-2}$
3	-18	-11	6-21	11	$< 10^{-10}$
			21-29	24	$2 \cdot 10^{-5}$
4	-18	-14	2-14	10	$< 10^{-10}$
			15-27	22	$< 10^{-10}$
5	-20	- 8	4-29	13	10^{-10}
6	-20	-13	18-26	25	$6 \cdot 10^{-5}$
			26-41	33	10^{-10}
7	-22	- 7,5	13-33	26	$< 10^{-10}$
			33-40	39	$4 \cdot 10^{-6}$
8	-22	-15	23-30	25	$4 \cdot 10^{-2}$
			30-47	40	$7 \cdot 10^{-10}$
			47-58	50	$4 \cdot 10^{-2}$
9	-24	- 9	30-45	37	$2 \cdot 10^{-9}$
			51-57	54	$4 \cdot 10^{-3}$
10	-24	-15,5	22-32	28	$2 \cdot 10^{-3}$
			44-56	51	$4 \cdot 10^{-2}$

