

# *Текстурный анализ*

## *Раздел 7*

*Описание текстуры с помощью функции распределения ориентировок (ФРО)*

## *Введение*

Рассмотренные выше способы описания текстуры с помощью ППФ и ОПФ были основаны на определении вероятности совпадения ориентации кристаллита с какой-либо заданной ориентацией относительно определенной системы координат.

Выбор системы координат определяет способ описания текстуры.

# *Введение*

ППФ позволяет указать связь между системой координат образца и кристалла только для идеальной ориентировки. В реальных случаях распределение ориентаций имеет непрерывный характер.

ОПФ несколько лучше представляет непрерывное распределение ориентаций по отношению к вершинам стандартного стереографического треугольника, но только для какой-то одной оси системы координат образца.

В общем случае текстура поликристалла описывается четырьмя координатами: три определяют ориентировку, а четвертая – вероятность этой ориентировки.

# *Введение*

Однозначно установить ориентировку каждого зерна в пространстве возможно, если указать вращения, переводящие систему координат образца (например, направление прокатки, поперечное направление и нормаль к плоскости прокатки) в систему координат кристалла (например, ребра элементарной ячейки).

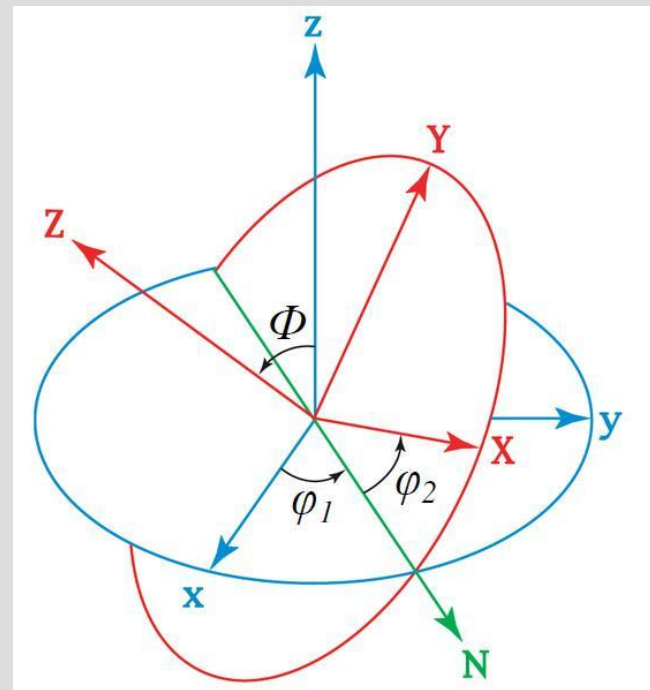
В общем случае текстура поликристалла описывается четырьмя координатами: три (углы Эйлера) определяют ориентировку, а четвертая – вероятность этой ориентировки. Графически так представить текстуру невозможно, так как для этого необходимо 4-х мерное пространство, поэтому используют представление текстуры с помощью ППФ или ОПФ.

# Углы Эйлера

Описание ориентаций более целесообразно проводить с помощью трех углов поворота (эйлеровых углов) относительно осей кристалла, которые приводят систему координат образца параллельно системе координат кристалла. Поворот осуществляют сначала вокруг оси  $z$  на угол  $\varphi_1$ , затем вокруг нового положения оси  $x$  на угол  $\Phi$ , а затем вокруг нового положения оси  $z$  на угол  $\varphi_2$ . Углы  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  могут изменяться от 0 до  $360^\circ$ , а угол  $\Phi$  от 0 до  $180^\circ$ .

Углы  $\varphi_1$ ,  $\Phi$  и  $\varphi_2$  можно использовать как декартовы координаты для описания положения кристалла в пространстве ориентировок.

$\langle \varphi_1; \Phi; \varphi_2 \rangle$  вместо  $\langle u; v; w \rangle$



## *История создания метода ФРО*

Основа количественного метода описания текстуры была заложена отечественным ученым А. С. Виглиным, который в 1960 г. предложил метод вычисления функций распределения ориентаций кристаллитов, которые позволяют однозначно описать текстуру.

Этот принцип получил развитие в работах **Бунге** и **Рое (1965)**.

Независимо друг от друга они разработали методы аналитического нахождения трехмерной функции распределения ориентировок кристаллитов, исходя из нескольких прямых полюсных фигур, полученных экспериментально.

Первые работы по ФРО.

- Bunge H.J. Zur Darstellung allgemeiner Texturen // Z. Metallkunde. 1965. Bd.56. S.872-874.
- Roe R.J. Description of Crystallite Orientation in Polycrystalline Materials // Journ. Appl. Phys. 1965. V.36, № 6. P.2024-2031.

## *Различия в методах Бунге и Рое*

Различия в вариантах метода, предложенных Бунге и Рое, связаны со способами учета симметрии в получаемом решении, в определении эйлеровых углов и в нормировке.

Соотношение между углами Эйлера, определенными Рое ( $\psi$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$ ) и Бунге ( $\varphi_1$ ,  $\Phi$ ,  $\varphi_2$ ) определяются как:

$$\psi = \varphi_1 - \pi/2$$

$$\theta = \Phi$$

$$\varphi = \varphi_2 + \pi/2$$



# Экспериментальная функция распределения ориентаций кристаллитов по Бунге

Если через  $V$  обозначить объем поликристаллического материала, а через  $dV$  – объем всех кристаллов из  $V$  с ориентацией, находящейся в интервале около ориентации  $g$  с координатами  $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ , то функция распределения ориентаций (ФРО) кристаллов  $F(\varphi_1; \xi; \varphi_2)$ , для объема  $V$ , определяется так:

$$\frac{dV}{V} = \frac{1}{8\pi^2} F(\varphi_1, \xi, \varphi_2) d\varphi_1 d\xi d\varphi_2 \quad (1)$$

где  $\xi = \cos \Phi$ .

Функция  $F(\varphi_1; \xi; \varphi_2)$  неотрицательна и удовлетворяет условию нормировки

$$\frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} F(\varphi_1, \xi, \varphi_2) d\varphi_1 d\xi d\varphi_2 = 1 \quad (2)$$

## Применение ФРО (по Бунге)

Зная функцию  $f(g)$  ( $g$  – переменная обозначающая ориентировку  $(\varphi_1; \xi; \varphi_2)$ ), можно построить непрерывную ОПФ и любую ППФ.

ФРО позволяет определить величину любого анизотропного свойства текстурованного материала в любом направлении, если известна зависимость этого свойства  $F$  от ориентации, т.е.  $F(g)$  для монокристалла. Среднее значение свойства определяют по формуле

$$\bar{F} = \int F(g) \cdot f(g) dg$$

Для образца с произвольной ориентацией  $g_0$  формула имеет вид

$$\overline{F(g_0)} = \int F(g) f(gg_0) dg$$

где  $g_0$  – матрица поворота к новой ориентировке.

## *Применение ФРО*

Таким образом, зная ФРО, можно определить анизотропию упругих, пластических, прочностных, магнитных свойств текстурованных поликристаллов (Бунге).

Важной областью применения ФРО является исследование механизма образования текстур фазовых превращений и рекристаллизации путем построения матриц соответствия и поворота ориентировок двух фаз (Рое).

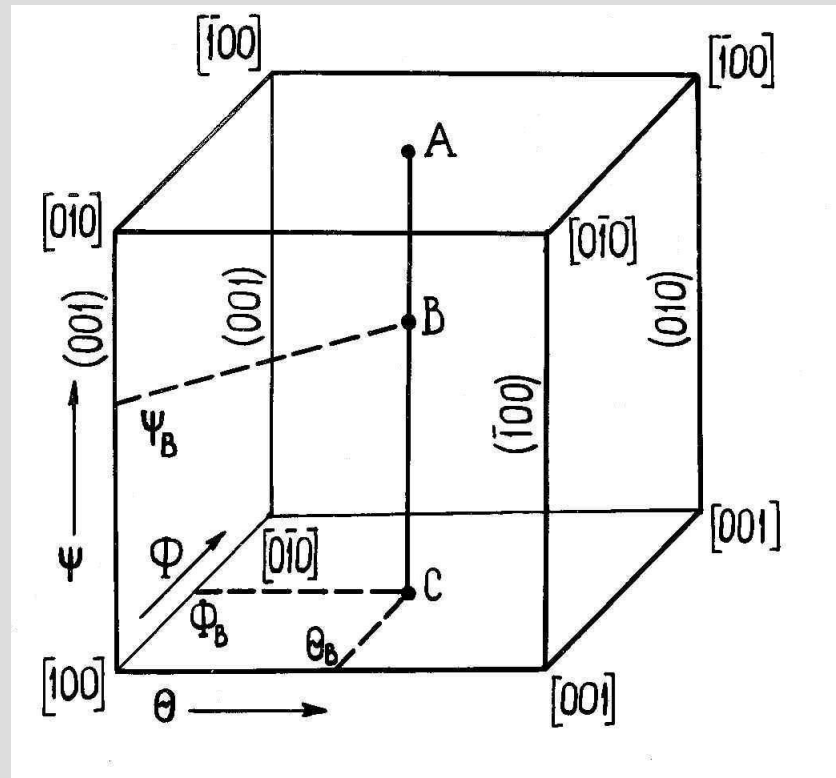
# *Построение ФРО*

ФРО можно построить:

- с помощью текстурной приставки и построения полюсных фигур;
- с помощью методики дифракции обратно-рассеянных электронов (ДОЭ).

# Интерпретация данных ФРО

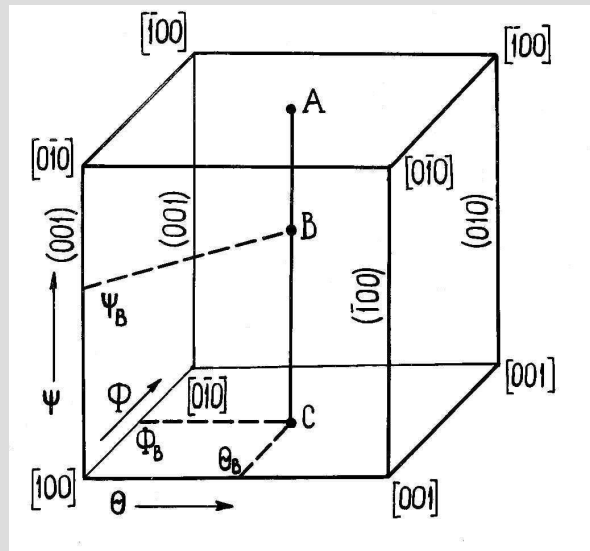
ФРО обычно изображается в виде некоторого распределения вероятностей ориентаций в пространстве углов Эйлера



# Интерпретация данных ФРО

Вся совокупность возможных ориентаций кристалла в образце может быть охвачена при изменении углов Эйлера  $\Phi$  и  $\Psi$  от 0 до  $2\pi$  и  $\theta$  – от 0 до  $\pi$ .

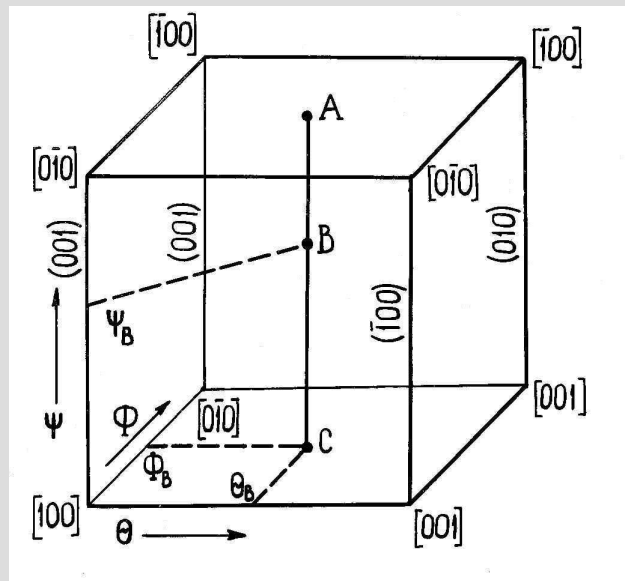
Однако, учитывая кубическую симметрию кристалла и орторомбическую симметрию листового образца, при описании положения кристаллографических направлений относительно системы координат образца, принято использовать интервал углов Эйлера от 0 до  $\pi/2$ .



# Интерпретация данных ФРО

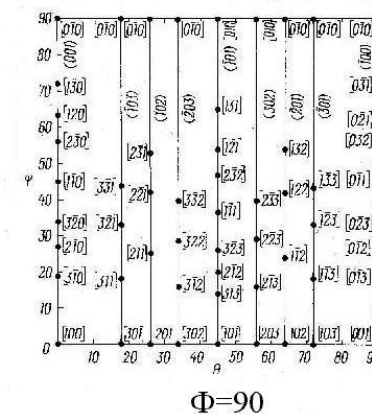
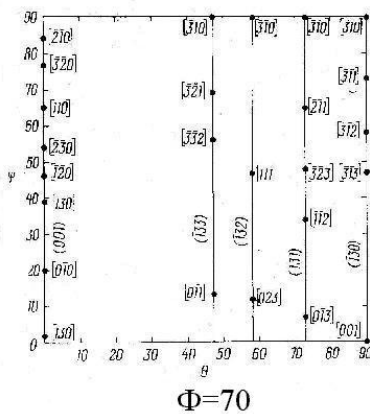
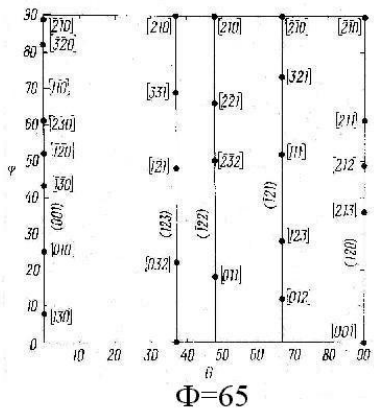
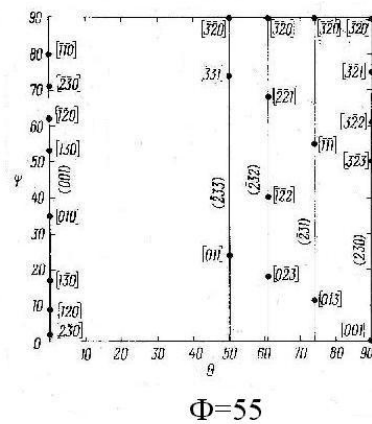
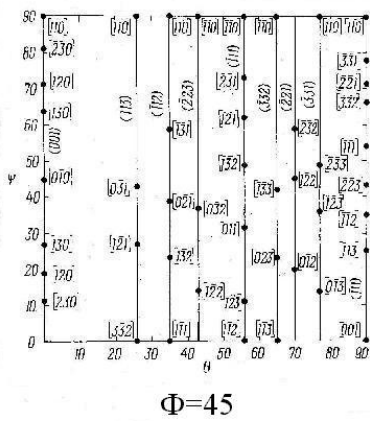
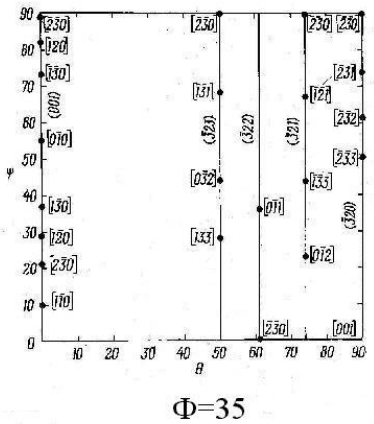
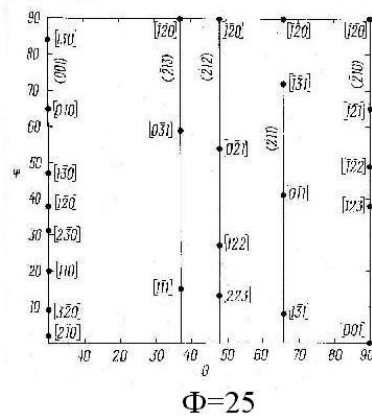
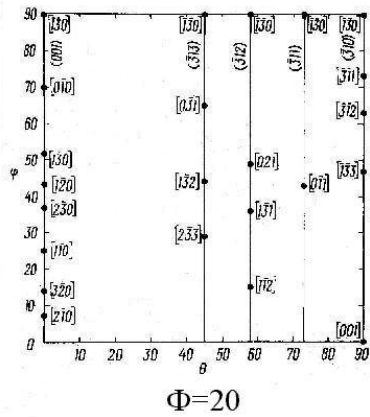
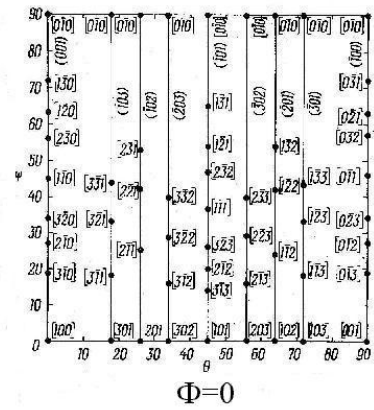
Каждая идеальная ориентировка представляется единственной точкой в пространстве углов Эйлера.

Здесь углы  $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  изменяются по ребрам куба, исходящим из одной точки  $[100]$  от 0 до  $\pi/2$ . Таким образом, каждой точке пространства могут быть приписаны индексы единственной кристаллографической ориентации.



# «Стандартные сечения» ФРО по Рое.

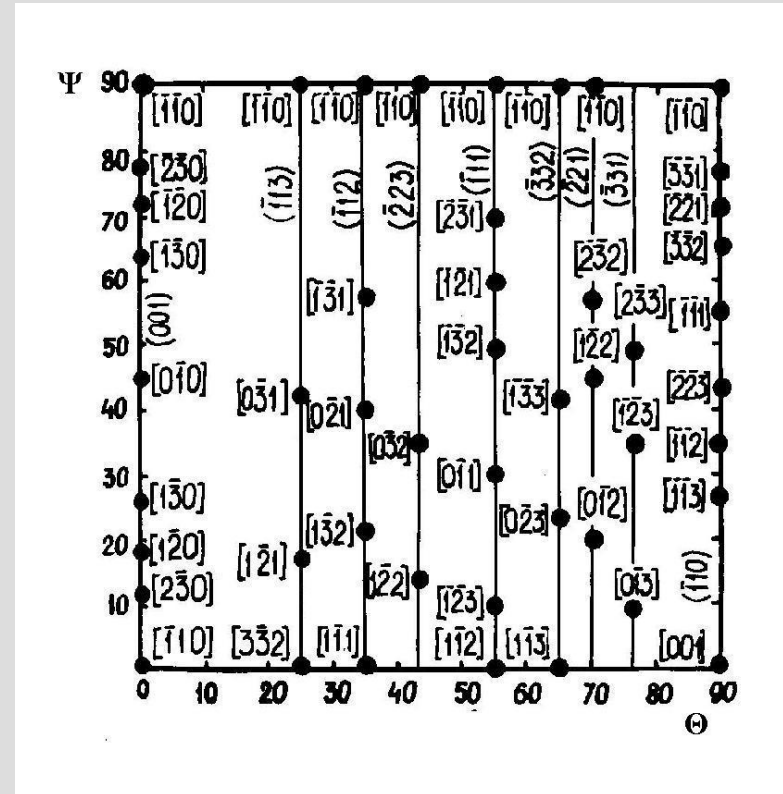
Положение идеальных ориентировок в сечениях пространства углов Эйлера при фиксированных значениях угла  $\Phi$ . Эти сечения можно назвать «стандартными» по аналогии со стандартными сетками на гномо-стереографических проекциях.

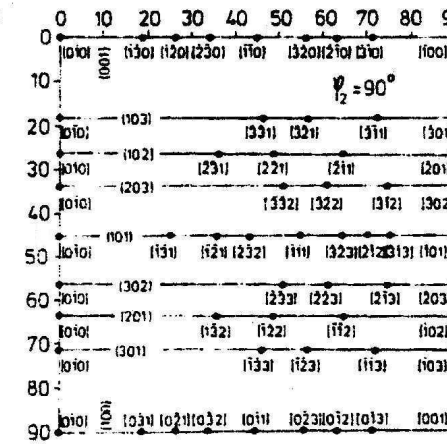
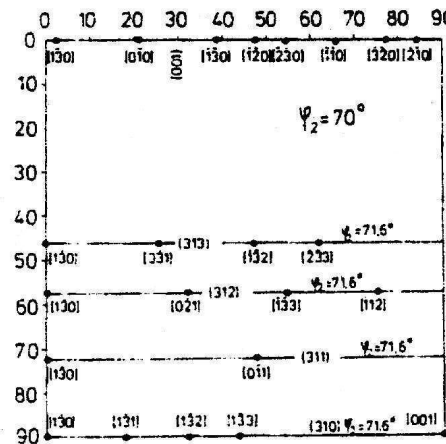
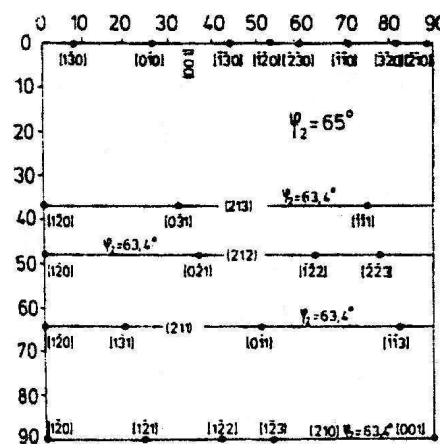
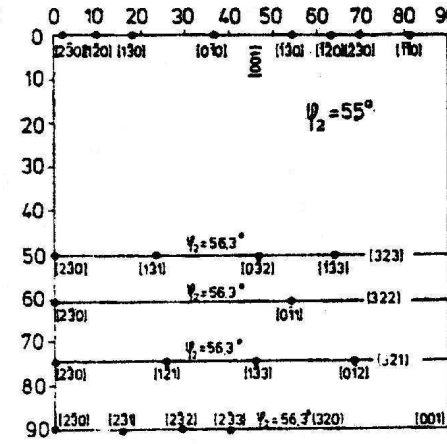
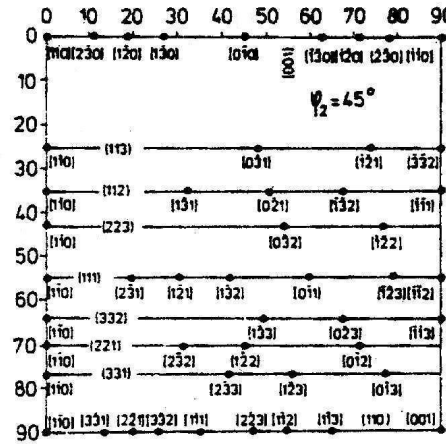
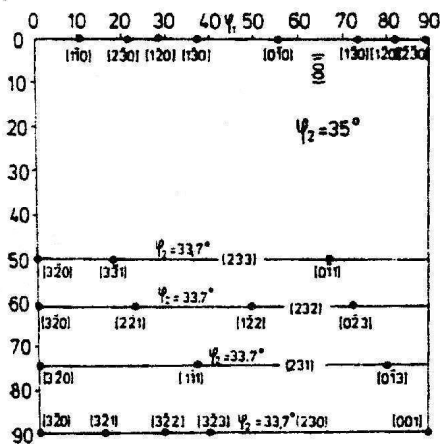
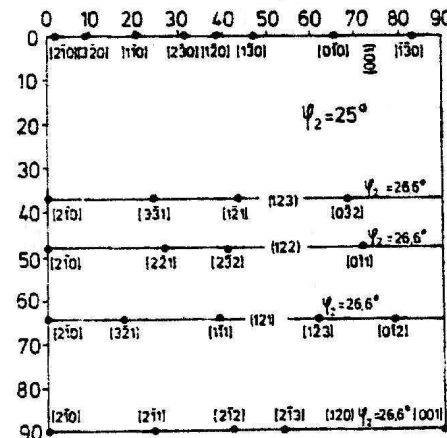
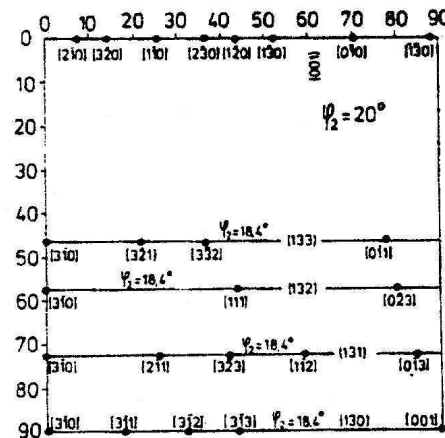
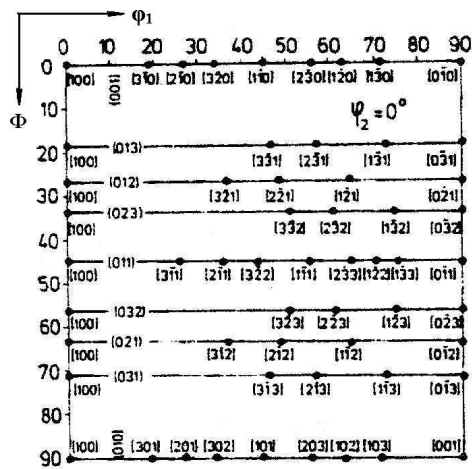




# Стандартное сечение пространства углов Эйлера при $\varphi = 45^\circ$ (по Рое)

Это сечение замечательно тем, что в нем находится большая часть ориентировок, присущая текстурам деформации и рекристаллизации ОЦК и ГЦК металлов. В соответствии со сказанным выше, углы Эйлера  $\theta$  и  $\Phi$  задают положение кристаллографической плоскости, поэтому на сечении плоскость изображается отрезком прямой, параллельной вертикальной оси. Угол  $\Psi$  определяет положение направления в плоскости.



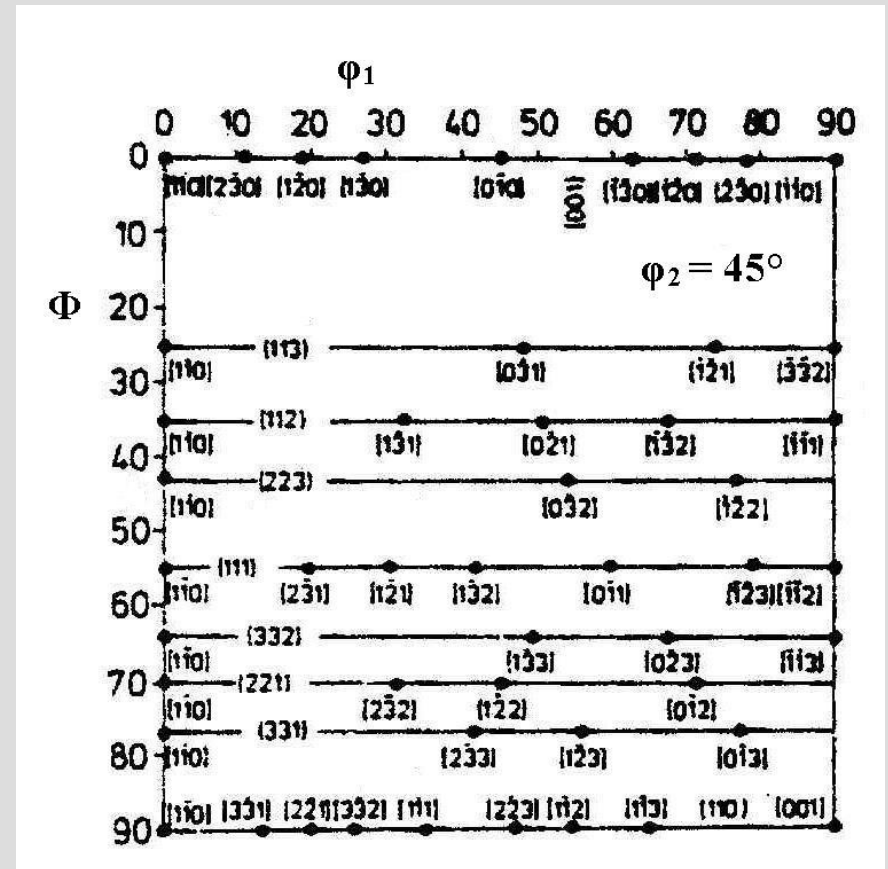


## «Стандартные сечения» ФРО по Бунге.

Положение идеальных ориентировок в пространстве углов Эйлера при фиксированных значениях угла  $\varphi_2$ .

# Стандартное сечение пространства углов Эйлера при $\varphi_2 = 45^\circ$ (по Бунге)

Приведено сечение ФРО (по Бунге) при  $\varphi_2 = 45^\circ$ , на котором также как на сечении  $\Phi = 45^\circ$  по Рое выходит большинство основных ориентировок деформации и рекристаллизации ОЦК и ГЦК металлов.



# Пример представления карт ФРО

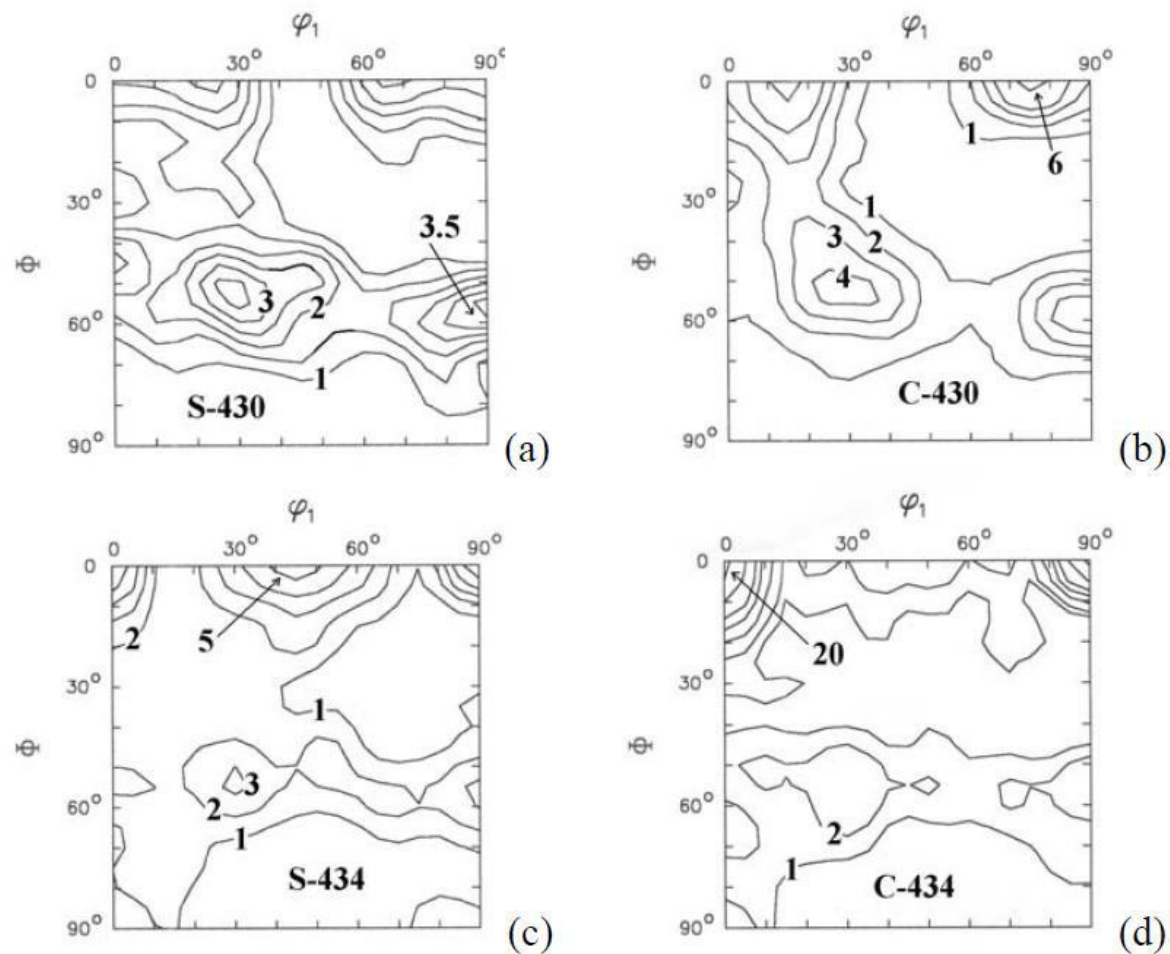


Fig.5. ODF for: Steel 430: (a) surface; (b) mid-plane; Steel 434: (c) surface; (d) mid-plane.