

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).

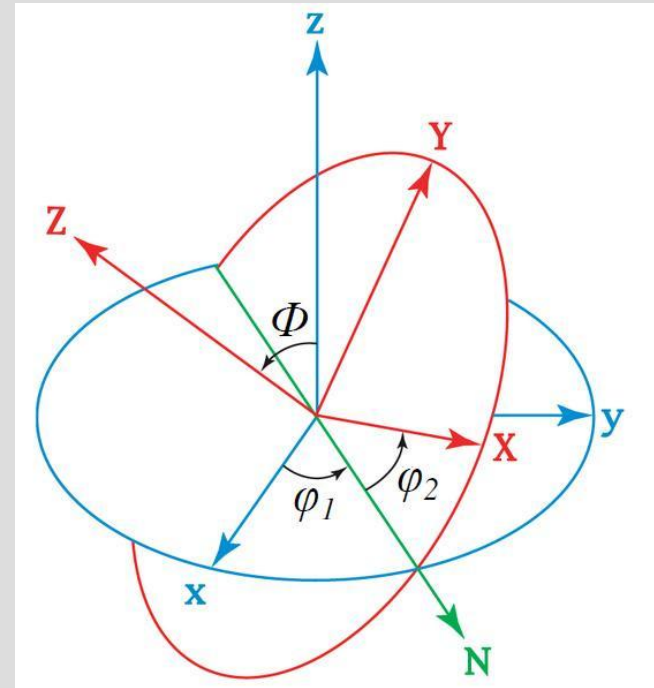
В общем случае текстура поликристалла описывается четырьмя координатами: три (углы Эйлера) определяют ориентировку, а четвертая – вероятность этой ориентировки. Графически так представить текстуру невозможно, так как для этого необходимо 4-х мерное пространство, поэтому используют представление текстуры 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 φ_1 , затем вокруг нового положения оси x на угол Φ , а затем вокруг нового положения оси z на угол φ_2 . Углы φ_1 и φ_2 могут изменяться от 0 до 360° , а угол Φ от 0 до 180° .

Углы φ_1 , Φ и φ_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 (ψ , θ , φ) и Бунге (φ_1 , Φ , φ_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).

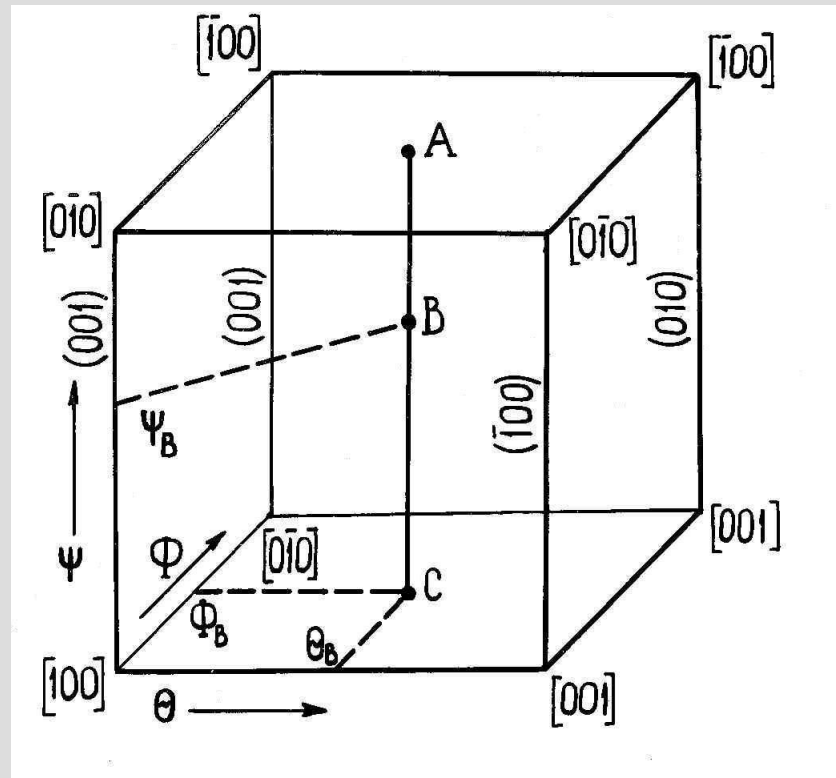
Построение ФРО

ФРО можно построить:

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

Интерпретация данных ФРО

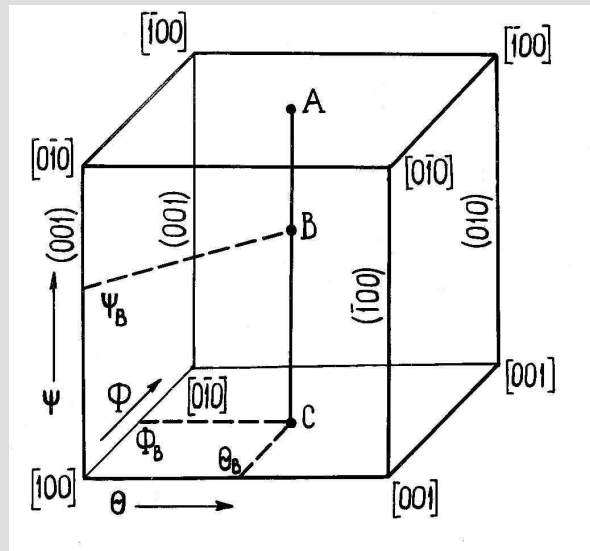
ФРО обычно изображается в виде некоторого распределения вероятностей ориентаций в пространстве углов Эйлера



Интерпретация данных ФРО

Вся совокупность возможных ориентаций кристалла в образце может быть охвачена при изменении углов Эйлера Φ и Ψ от 0 до 2π и θ – от 0 до π .

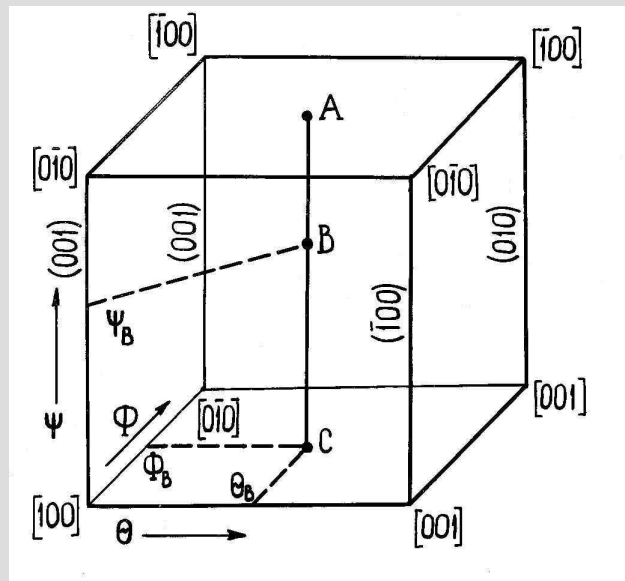
Однако, учитывая кубическую симметрию кристалла и орторомбическую симметрию листового образца, при описании положения кристаллографических направлений относительно системы координат образца, принято использовать интервал углов Эйлера от 0 до $\pi/2$.



Интерпретация данных ФРО

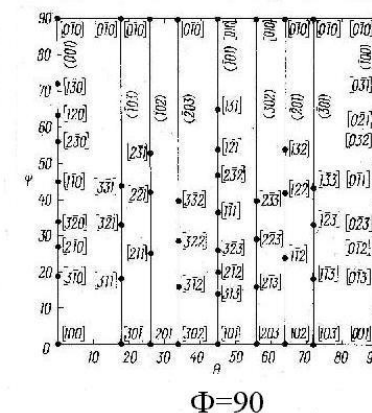
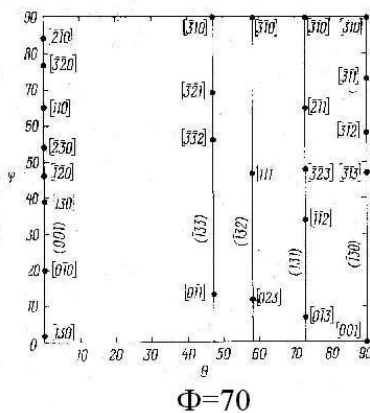
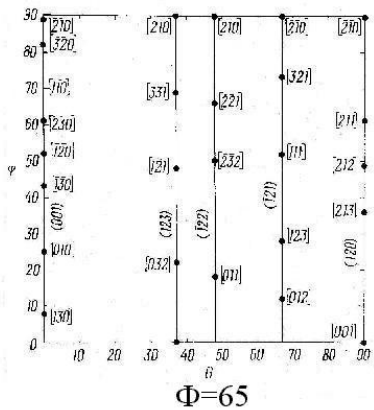
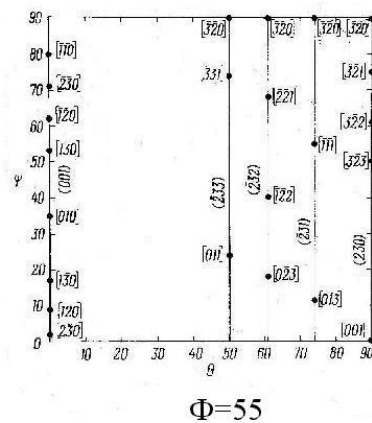
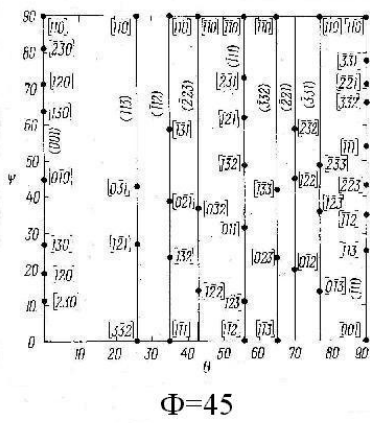
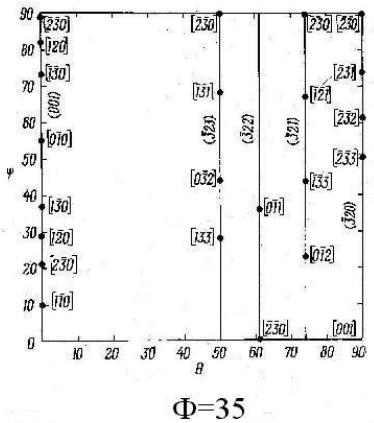
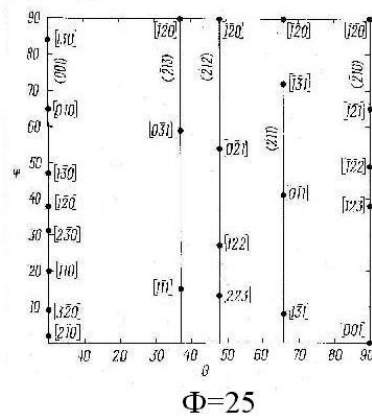
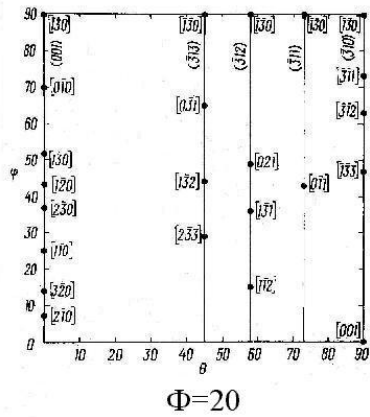
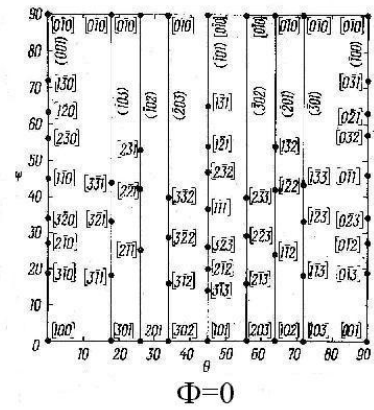
Каждая идеальная ориентировка представляется единственной точкой в пространстве углов Эйлера.

Здесь углы Ψ , θ , Φ 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.



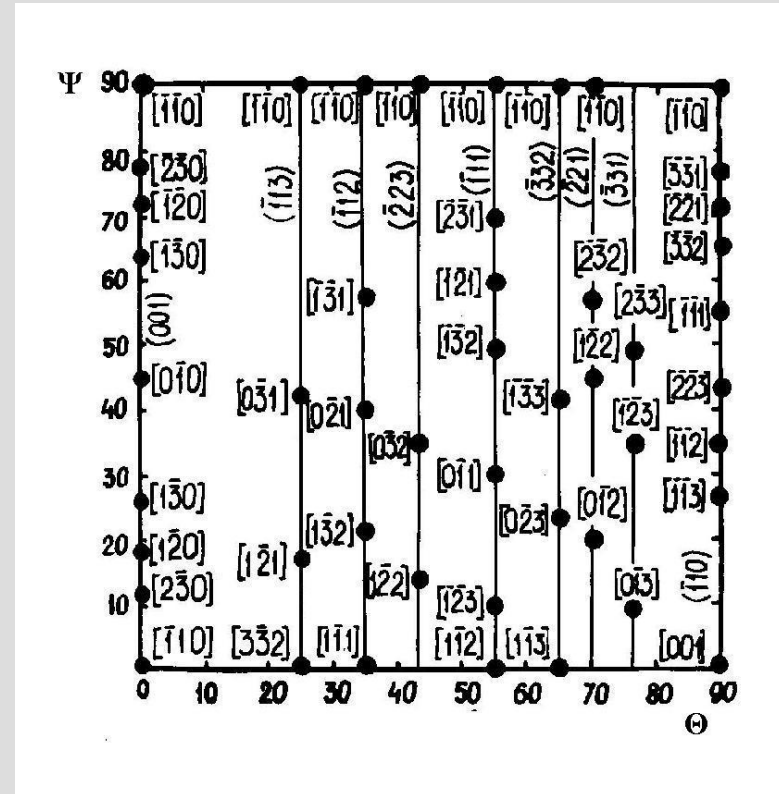
«Стандартные сечения» ФРО по Рое.

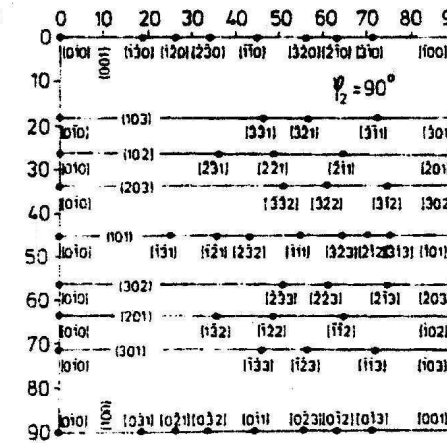
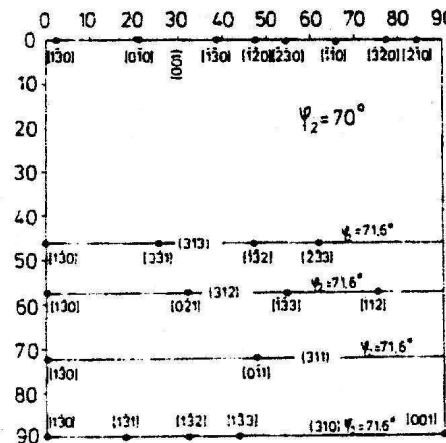
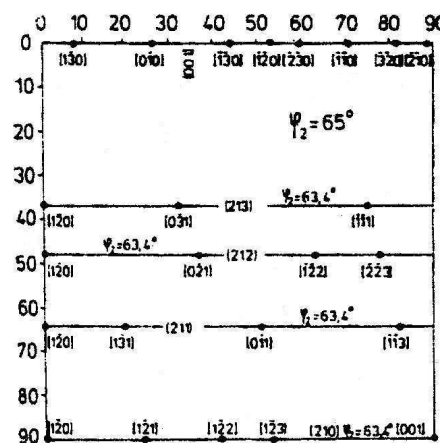
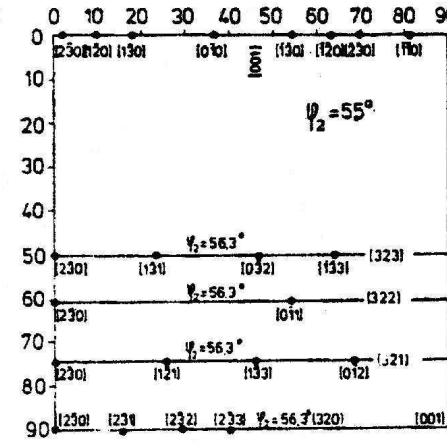
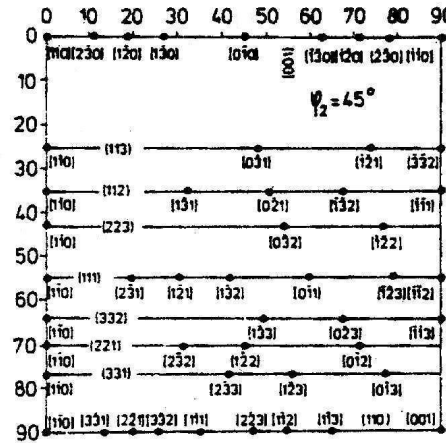
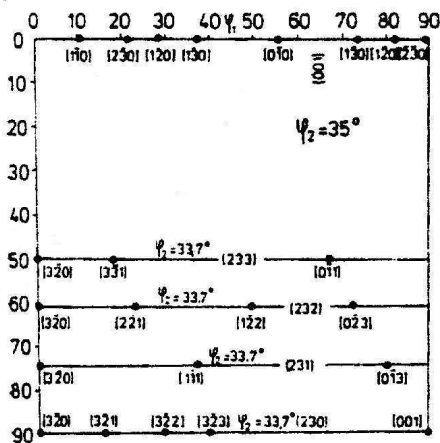
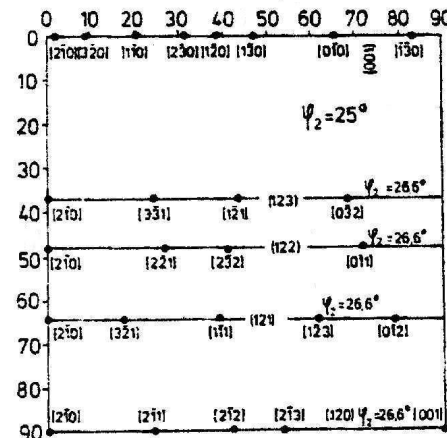
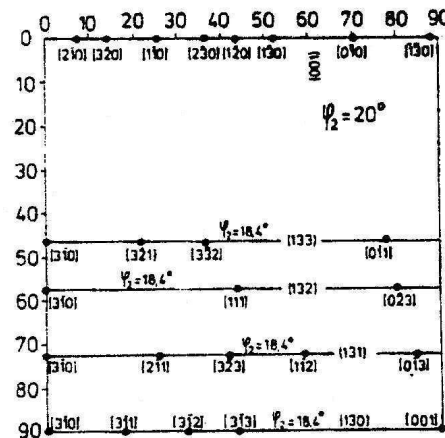
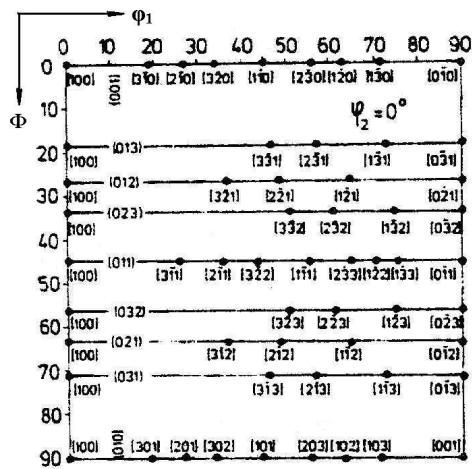
Положение идеальных ориентировок в сечениях пространства углов Эйлера при фиксированных значениях угла Φ . Эти сечения можно назвать «стандартными» по аналогии со стандартными сетками на гномо-стереографических проекциях.



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 θ и Ψ задают положение кристаллографической плоскости, поэтому на сечении плоскость изображается отрезком прямой, параллельной вертикальной оси. Угол Ψ определяет положение направления в плоскости.



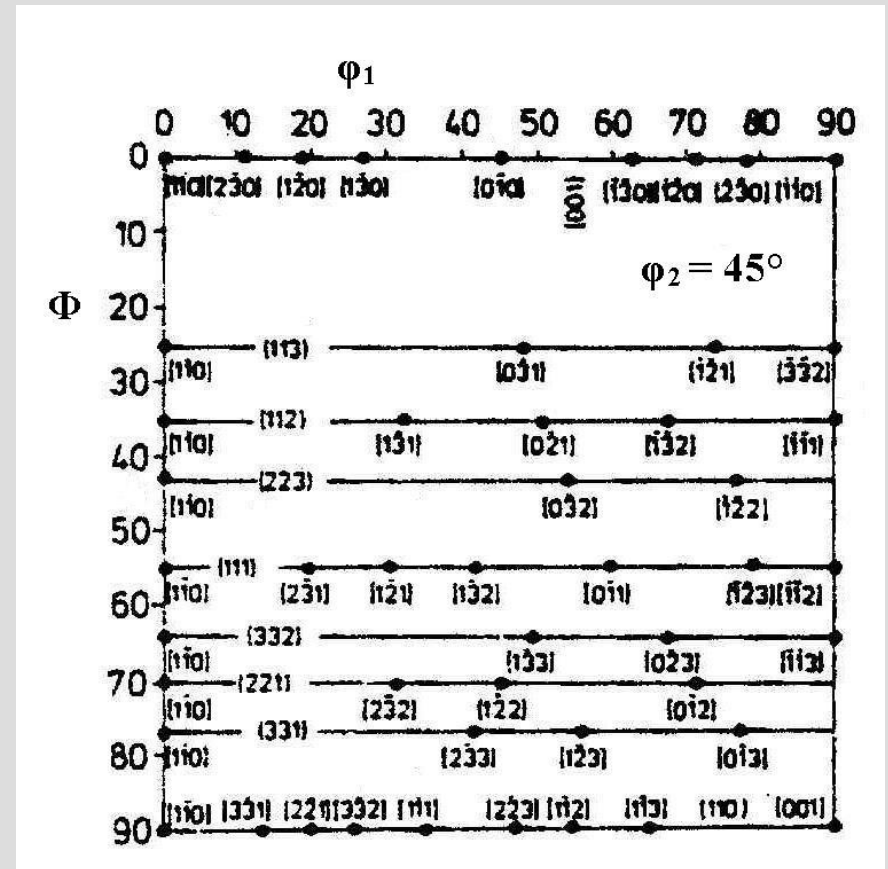


«Стандартные сечения» ФРО по Бунге.

Положение идеальных ориентировок в сечениях пространства углов Эйлера при фиксированных значениях угла φ_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

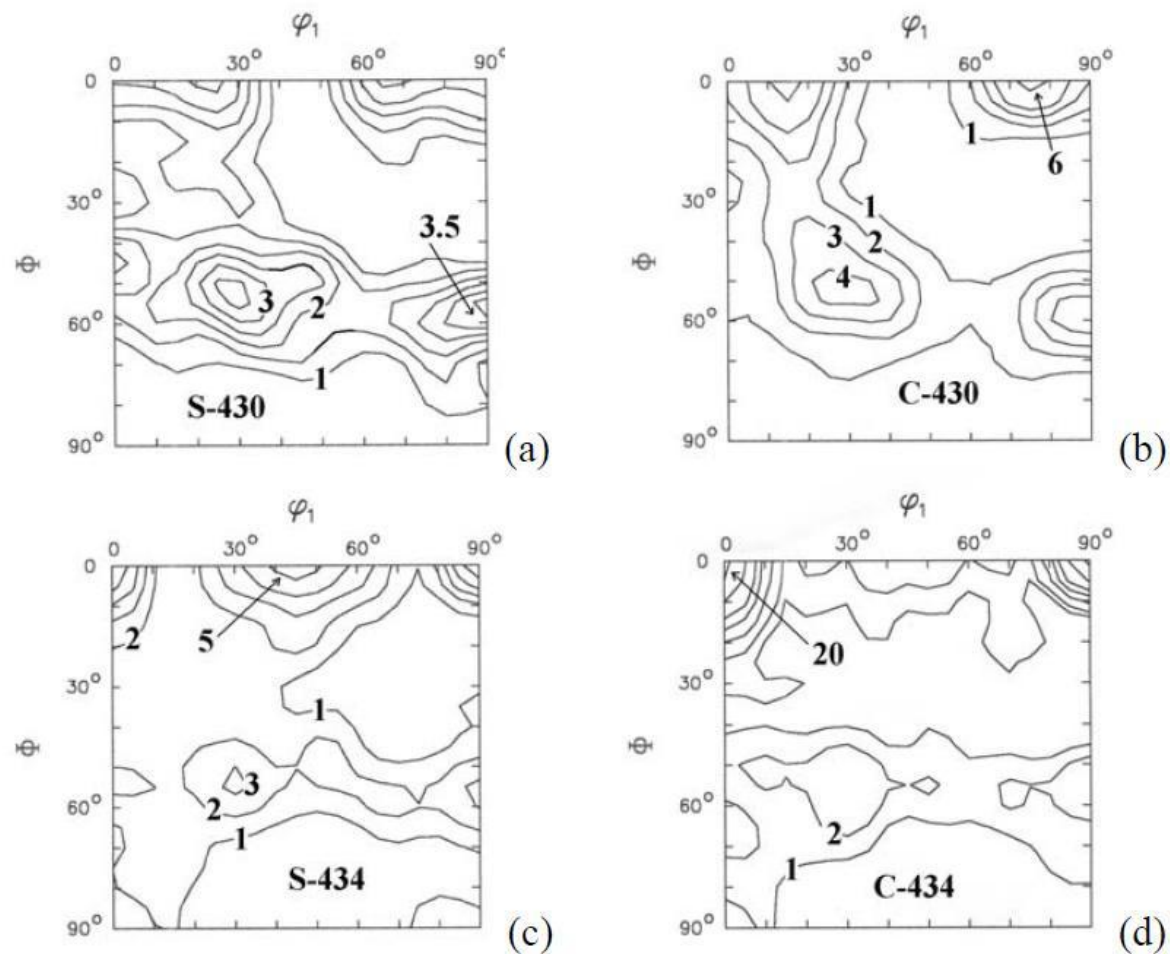


Fig.5. ODF for: Steel 430: (a) surface; (b) mid-plane; Steel 434: (c) surface; (d) mid-plane.