

**Modelowe przedstawienia i analiza rozkładów  
orientacji oraz różnic orientacji  
w materiale jedno- i dwufazowym**

Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej  
im. Aleksandra Krupkowskiego

POLSKA AKADEMIA NAUK

Kraków 2008

## **Recenzja wydawnicza**

Prof. dr hab. inż. Krzysztof Wierzbanowski  
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Katedra Fizyki Materii Skondensowanej

Rysunek na okładce:

Przekroje pików funkcji rozkładu orientacji (ODF) oraz odpowiadającej jej funkcji rozkładu różnic orientacji (ODDF)

Wydanie publikacji dofinansowane przez Komitet Badań Naukowych  
PBZ-MNiSW-3/3/II-1.5

Copyright by 2008 Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej  
im. Aleksandra Krupkowskiego PAN Kraków

Wszelkie prawa zastrzeżone

POLSKA AKADEMIA NAUK

Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej im. Aleksandra Krupkowskiego  
ul. Reymonta 25 30-059 Kraków

<http://www.imim-pan.krakow.pl>

ISBN 83-921845-2-1

Druk: NET4 Kraków, ul Miechowska

## Spis treści

### Wstęp

1. Model geometryczny agregatu polikrystalicznego i charakterystyki orientacji	7
2. Symetrie w przestrzeni orientacji	21
3. Wyznaczanie funkcji rozkładu orientacji na podstawie danych doświadczalnych	22
3.1 Figury biegunowe	22
3.2 Pojedyncze orientacje	24
4. Model rozkładu orientacji	25
4.1 Składowa tekstury	25
4.2 Współczynniki szeregowego rozwinięcia funkcji rozmycia	29
4.3 Model funkcji rozkładu orientacji	29
4.4 Oszacowanie wartości parametrów modelu rozkładu orientacji	30
4.5 Zastosowanie funkcji modelowych do korekcji funkcji rozkładu orientacji wyznaczonej metodą rozwinięcia w szereg	34
4.6 Wybór funkcji rozmycia	38
5. Analiza rozkładu różnic orientacji przy pomocy funkcji modelowych	39
5.1 Zależność pomiędzy parametrami składowych rozkładu orientacji i rozkładu różnic orientacji	40
5.2 Modelowe przedstawienie funkcji FRRO_O	41
5.3 Porównanie modeli rozkładu orientacji i rozkładu różnic orientacji	44
6. Modelowe przedstawienie zaburzeń funkcji rozkładu orientacji wyznaczonej z figur biegunowych metodą rozwinięcia w szereg	46
6.1 Analiza zaburzeń FRO przy pomocy modelowego rozkładu orientacji	48
7. Oszacowanie minimalnej liczby pojedynczych orientacji N potrzebnych do określenia rozkładu orientacji	50
7.1 Oszacowanie N na podstawie modelu FRO	52
7.2 Odtwarzanie losowej składowej rozkładu orientacji	57
7.3 Wpływ metody określenia FRO na wartość N	59
8. Modelowe przedstawienie rozkładu orientacji i różnic orientacji w materiale dwufazowym	60
9. Rozkład potrójnych połączeń granic ziaren	69
9.1 Analiza typu potrójnych połączeń	70
9.2 Potrójna funkcja rozkładu różnic orientacji	72
10. Podsumowanie	74
Literatura	75

## Wstęp

Tekstura krystalograficzna z definicji oznacza rozkład orientacji krystalitów tworzących agregat polikrystaliczny. Stanowi zatem jedną z charakterystyk materiału krystalicznego związaną z jego anizotropowymi właściwościami.

Ilościowa (trójwymiarowa) analiza tekstury ma istotne znaczenie dla badania anizotropowego zachowania się materiału w procesach technologicznych. Znalazła ona zastosowanie w badaniach mechanizmów formowania się tekstur w metalach i ich stopach poddawanych procesom przeróbki plastycznej i obróbki cieplnej, aby uzyskać ich korzystne właściwości użytkowe; np. w blachach transformatorowych lub blachach przeznaczonych do głębokiego tłoczenia. Równie ważne jest zastosowanie metod ilościowej analizy tekstur w odniesieniu do materiałów ceramicznych, polimerów i próbek geologicznych [1-6].

Ilościową analizę tekstury stanowi zespół metod, za pomocą których są wyznaczone analizowane i interpretowane tzw. charakterystyki orientacji, najważniejsze z nich to funkcja rozkładu orientacji (FRO) oraz funkcja rozkładu różnic orientacji (FRRO). Stanowią one podstawę do śledzenia zmian w teksturze globalnej oraz w teksturze lokalnej (mikroteksturze) materiału.

Wartości charakterystyk orientacji nie są dostępne bezpośrednio na podstawie pomiarów. Dla określenia FRO oraz FRRO konieczne są metody rachunkowe, które na podstawie zmierzonych figur biegunowych lub zbiorów pojedynczych orientacji pozwalają na aproksymację ich wartości [7-22].

Aproksymacja wartości trójwymiarowej FRO z dwuwymiarowych figur biegunowych stanowi skomplikowany problem numeryczny, ze względu na charakter formuły łączącej obie funkcje, tzw. równanie podstawowe. Obecnie rutynowo stosowane są tzw. metody dyskretne. Zastąpiły one metodę rozwinięć szeregowych, która w swojej klasycznej postaci nie dostarczała pełnej informacji o rozkładzie, tzw. „problem duchów” [16,23,24].

Podczas badania efektywności metod obliczania wartości FRO oraz przy jej analizie bardzo pożyteczne okazało się zastosowanie opisu poszczególnych składowych tekstury (przez składową rozumiemy wyróżnioną orientację wraz z jej umownym otoczeniem) przy pomocy funkcji typu rozkład Gaussa, przybliżających rzeczywisty rozkład [4,5,25].

Zastosowanie rozkładów modelowych umożliwiło między innymi: uzupełnienie metody rozwinięć szeregowych procedurami korekcyjnymi w celu eliminacji systematycznych zaburzeń („duchów”) w dostarczanych przez nią wynikach, lokalizację tych zaburzeń oraz ich analizę.

Szczególnie ważna okazała się możliwość wyboru oraz ilościowego opisu składowych tekstury poprzez oszacowanie wartości parametrów składowej to jest: udziału objętościowego oraz

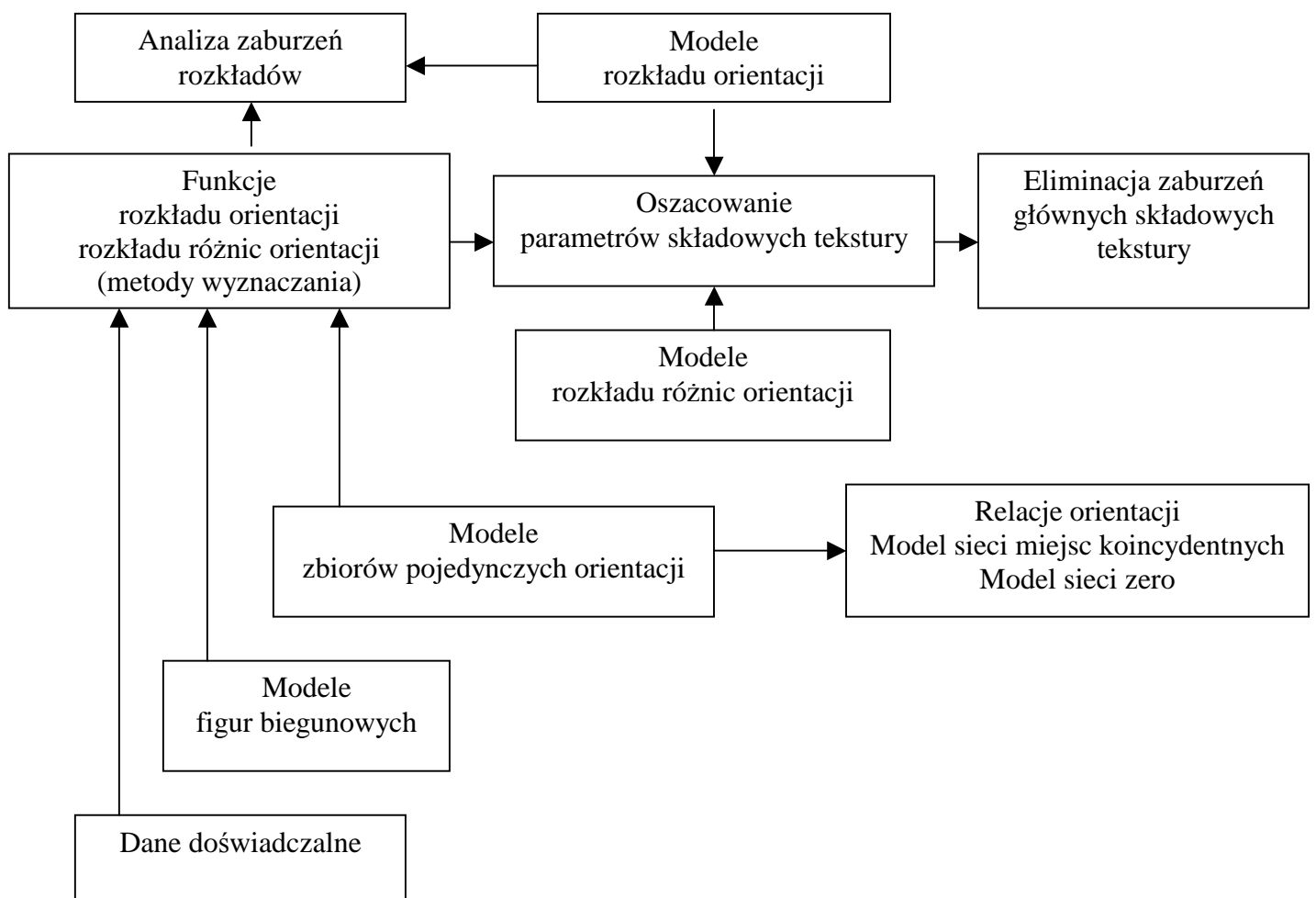
szerokości rozmycia wokół wyróżnionej orientacji. W ten sposób można uzyskać syntetyczną informację o teksturze [26-32].

Modele FRO oraz FRRO mają również zastosowanie przy testowaniu metod numerycznych używanych w ilościowej analizie tekstury.

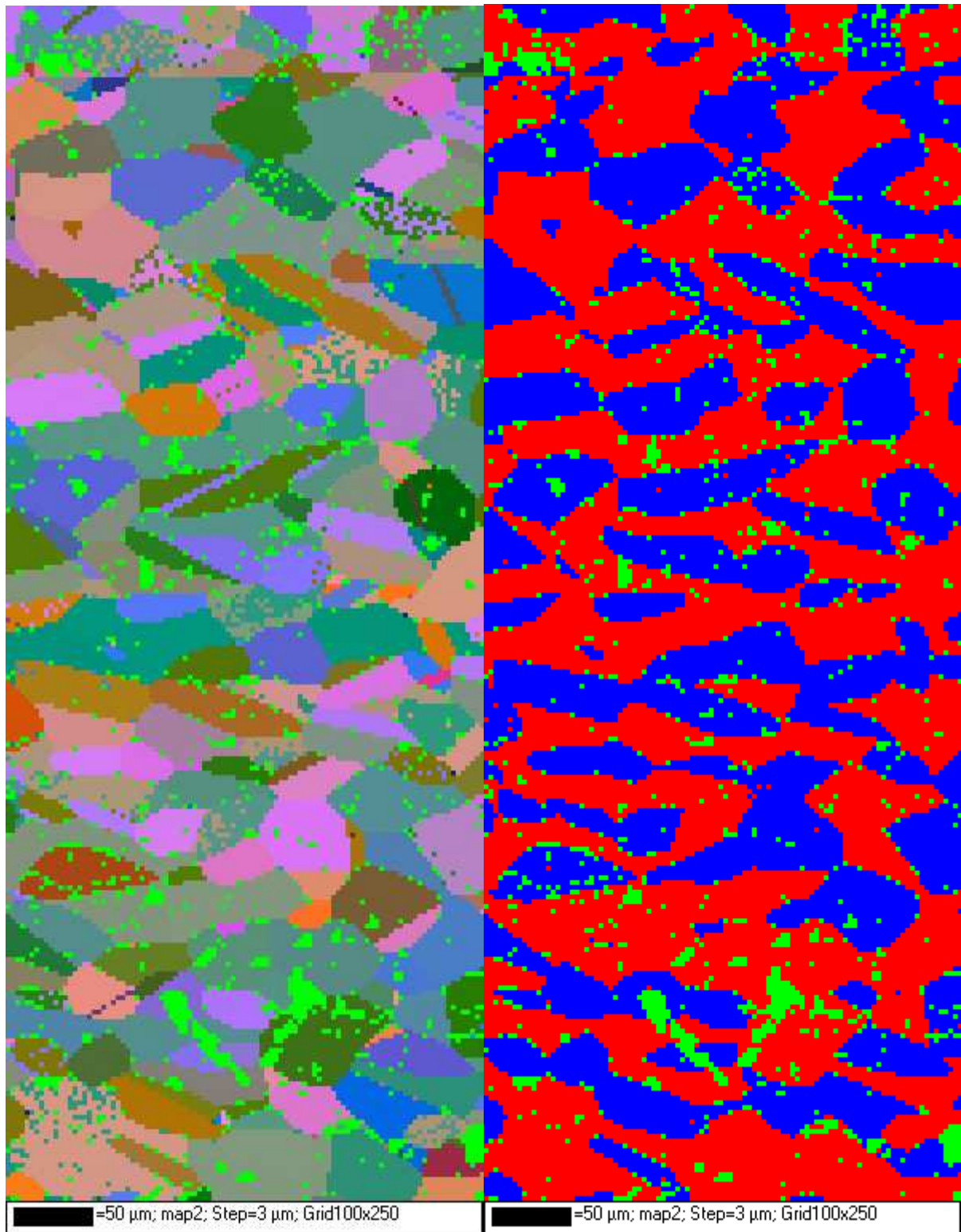
W przedstawionym opracowaniu podjęto problematykę opisu i analizy tekstury w oparciu o superpozycję składowych opisanych za pomocą funkcji typu rozkład Gaussa.

Rozważania i analizy rozwinięte w odniesieniu do rozkładów orientacji zastosowano dla rozkładów różnic orientacji i uogólniono na przypadek materiału dwufazowego. Przeprowadzono je w oparciu o formalizm matematyczny H.J.Bungego oraz S.Matthiesa.

Schemat na rysunku 1 przedstawia zastosowania modelowych funkcji i zbiorów orientacji w ilościowej analizie tekstury globalnej i lokalnej (mikrotekstury). Na rysunku 2 zamieszczono przykład tekstury lokalnej uzyskany metodą mikroskopii orientacji.



Rys. 1 Schemat blokowy zastosowania modelowych funkcji i zbiorów orientacji w ilościowej analizie tekstury globalnej i lokalnej (mikrotekstury).



( a )

( b )

Rys.2 Tekstura lokalna w stali ferrytyczno austenitycznej o strukturze duplex [33]  
 a) mapa orientacji; dyfrakcje nierozwiązane są oznaczone kolorem zielonym  
 b) mapa rozkładu faz: ferryt – kolor czerwony, austenit – kolor niebieski

## 1. Model geometryczny agregatu polikrystalicznego i charakterystyki orientacji

Materiał polikrystaliczny zawierający wiele różnie zorientowanych ziaren rozpatrujemy jako agregat złożony z pozbawionych defektów kryształów – krystalitów, którym przypisana jest orientacja. Pomiedzy dwoma krystalitami występuje różnica orientacji.

Orientacja  $g$  dana jest obrotem właściwym i określa wzajemne położenie dwu kartezjańskich układów odniesienia o wspólnym początku, z których jeden ( $K_B$ ) związany jest z siecią krystalograficzną (np. kierunki osi  $x_A, y_A, z_A$  pokrywają się z kierunkami [100], [010], [001]), drugi układ ( $K_A$ ) ustalamy w odniesieniu do próbki badanego materiału ( np. kierunki osi  $x_B, y_B, z_B$  pokrywają się z kierunkami walcowania, poprzecznym i normalnym walcowanej blachy) [4].

Wykonując obrót  $g$  doprowadzamy do pokrycia osi układu  $K_A$  z osiami układu  $K_B$

$$K_B = g * K_A \quad (1.1)$$

lub

$$h = g * y \quad (1.2)$$

gdzie  $g$  oznacza macierz obrotu, natomiast  $h$  oraz  $y$  dowolne wektory odpowiednio w układzie  $K_B$  i  $K_A$ .

Różnicę  $\Delta g_{21}$  orientacji  $g_2 (K_{B2})$  oraz  $g_1 (K_{B1})$  dwu krystalitów definiujemy jako

$$K_{B2} = \Delta g_{21} * K_{B1}, \quad (1.3)$$

gdzie

$$\Delta g_{21} = g_2 * g_1^{-1} \quad \rightarrow \quad g_2 = \Delta g_{21} * g_1 \quad (1.4)$$

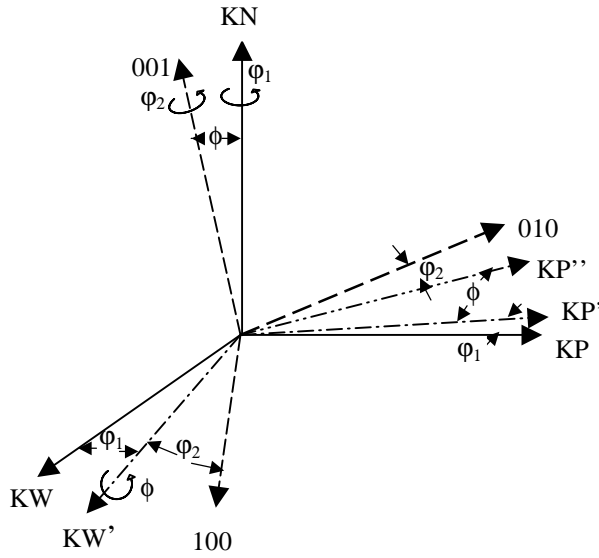
W ten sposób tworzymy geometryczny model agregatu polikrystalicznego.

Parametrami obrotu  $g$  zwykle są kąty Eulera:  $\varphi_1, \phi, \varphi_2$  zmieniające się w zakresach:  $\varphi_1, \varphi_2 = [0, 2\pi], \phi = [0, \pi]$ .

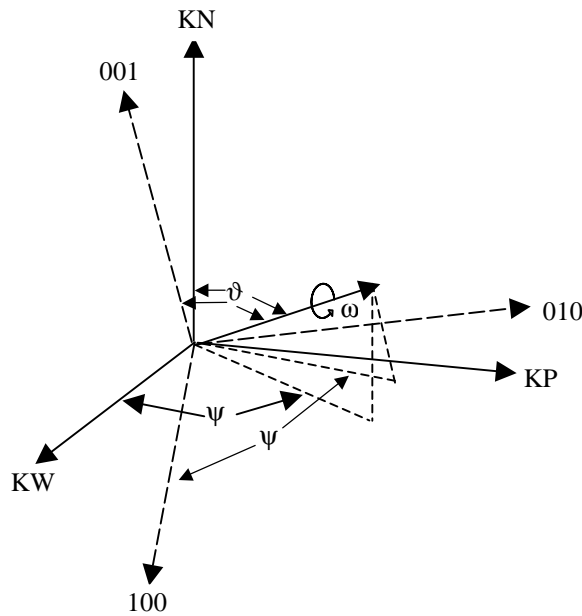
Obroty (rys.3) kolejno o  $\varphi_1, \phi, \varphi_2$  ( $g = g(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = g(\varphi_2)g(\phi)g(\varphi_1)$ ) przeprowadzają układ  $K_A$  w układ  $K_B$ .

Rozpatrując różnice orientacji jako parametry  $\Delta g$  wygodnie jest przyjąć współrzędne sferyczne  $\nu, \psi$  osi obrotu  $a = a(\nu, \psi)$  oraz kąt obrotu  $\omega$  (rys.4) [34-36]. Mamy wówczas

$g = g(\nu, \psi, \omega)$ , a przedziały zmienności kątów wynoszą:  $\nu \in [0, \frac{\pi}{2}], \psi \in [0, 2\pi], \omega \in [0, 2\pi]$ .



Rys.3 Definicja parametrów macierzy obrotu: kąty Eulera  $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$  [36].



Rys.4 Definicja parametrów macierzy obrotu: oś  $a(\vartheta, \psi)$  i kąt obrotu  $\omega$  [36]

Kiedy parametrami są kąty Eulera macierz obrotu  $g$  ma następującą postać

$$g(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = g(\varphi_2)g(\phi)g(\varphi_1) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_1 \cos \phi + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_2 \sin \phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & \cos \varphi_2 \sin \phi \\ \sin \varphi_1 \sin \phi & -\cos \varphi_1 \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

Natomiast dla parametrów osi i kąta obrotu otrzymujemy

$$g(\vartheta, \psi, \omega) = \begin{pmatrix} (1 - a_1^2) \cos \omega + a_1^2 & a_1 a_2 (1 - \cos \omega) + a_3 \sin \omega & a_1 a_3 (1 - \cos \omega) - a_2 \sin \omega \\ a_1 a_2 (1 - \cos \omega) - a_3 \sin \omega & (1 - a_2^2) \cos \omega + a_2^2 & a_2 a_3 (1 - \cos \omega) + a_1 \sin \omega \\ a_1 a_3 (1 - \cos \omega) + a_2 \sin \omega & a_2 a_3 (1 - \cos \omega) - a_1 \sin \omega & (1 - a_3^2) \cos \omega + a_3^2 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

gdzie:

$$a_1 = \cos \psi \cdot \sin \vartheta$$

$$a_2 = \sin \psi \cdot \sin \vartheta$$

$$a_3 = \cos \vartheta$$

W praktyce analizy tekstur określając orientację często stosuje się wskaźniki Millera (hkl)[uvw]. Odpowiadająca im macierz  $g$  ma postać

$$G_{(hkl)[uvw]} = \begin{pmatrix} \frac{u}{\Gamma_1} & \frac{kw - lv}{\Gamma_1 \Gamma_2} & \frac{h}{\Gamma_2} \\ \frac{v}{\Gamma_1} & \frac{lu - hw}{\Gamma_1 \Gamma_2} & \frac{k}{\Gamma_2} \\ \frac{w}{\Gamma_1} & \frac{hv - ku}{\Gamma_1 \Gamma_2} & \frac{l}{\Gamma_2} \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

gdzie:

$$\Gamma_1 = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$

$$\Gamma_2 = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Charakteryzując granice ziaren poprzez różnice orientacji często posługujemy się modelem sieci miejsc koincydentnych ( CSL ) określając parametr  $\Sigma$ . Tabela 1 zawiera wartości parametrów osi i kąta obrotu oraz kąty Eulera odpowiadające kolejnym wartościom  $\Sigma$ , [37-39].

Dla określenia różnicy orientacji stosowany jest również wektor Rodriguesa  $\rho$ . Reprezentacja różnicy orientacji jest wówczas dana przez zależność [40,41]

$$\rho = a \tan\left(\frac{\varpi}{2}\right), \quad (1.8)$$

gdzie

$$\varpi - \text{kąt obrotu wokół osi } a(\vartheta, \psi).$$

Przedstawienie rozkładu różnic orientacji w tzw. przestrzeni Rodriguesa-Franka ma zalety praktyczne, ze względu na możliwość prostej identyfikacji i interpretacji składowych rozkładu; np. składowe typu włókna ze stałą osią obrotu są liniami prostymi. Poza tym granice pomiędzy obszarami podstawowymi są fragmentami płaszczyzny, a nie zakrzywionej powierzchni jak to ma miejsce w parametryzacji poprzez kąty Eulera czy oś i kąt obrotu.

Do reprezentacji orientacji i różnic orientacji wykorzystywane są także kwaterniony [39].

Tabela 1: Parametry osi i kąta obrotu  $\{\bar{\omega}, [uvw]\}$  oraz kąty Eulera  $\{\varphi_1, \phi, \varphi_2\}$  dla współczynnika  $\Sigma$  w modelu sieci miejsc koincydentnych

$\Sigma$	$\bar{\omega}$	$[uvw]$	$\varphi_1$	$\phi$	$\varphi_2$
3	60.00	1 1 1	45.0	70.53	45.0
5	36.86	1 0 0	0.0	90.0	36.86
7	38.21	1 1 1	26.56	73.4	63.44
9	38.94	1 1 0	26.56	83.62	26.56
11	50.47	1 1 0	33.68	79.53	33.68
13a	22.62	1 0 0	0.0	90.0	22.62
13b	27.79	1 1 1	18.43	76.66	71.57
15	48.19	2 1 0	19.65	82.33	42.27
17a	28.07	1 0 0	0.0	90.0	28.07
17b	61.9	2 2 1	45.0	86.63	45.0
19a	26.53	1 1 0	18.44	89.68	18.44
19b	46.8	1 1 1	33.69	71.59	56.31
21a	21.78	1 1 1	14.03	79.02	75.97
21b	44.41	2 1 1	22.83	79.02	50.91
23	40.45	3 1 1	15.25	82.51	52.13
25a	16.26	1 0 0	0.0	90.0	16.26
25b	51.68	3 1 1	36.87	90.0	53.13
27a	31.59	1 1 0	21.8	85.75	21.8
27b	35.43	2 1 0	15.07	85.75	31.33
29a	43.6	1 0 0	0.0	90.0	43.6
29b	46.4	2 2 1	33.69	84.06	56.31

Ilościowy opis tekstury uzyskamy wprowadzając trójwymiarową funkcję rozkładu orientacji (FRO) -  $f(g)$  [4]. FRO określa gęstość prawdopodobieństwa występowania orientacji  $g$

$$f(g) = \frac{dV}{Vdg} \quad (1.9)$$

gdzie

$dV$  objętość zajmowana przez kryształy o orientacjach z przedziału

$$\left[ g - \frac{1}{2}dg, g + \frac{1}{2}dg \right]$$

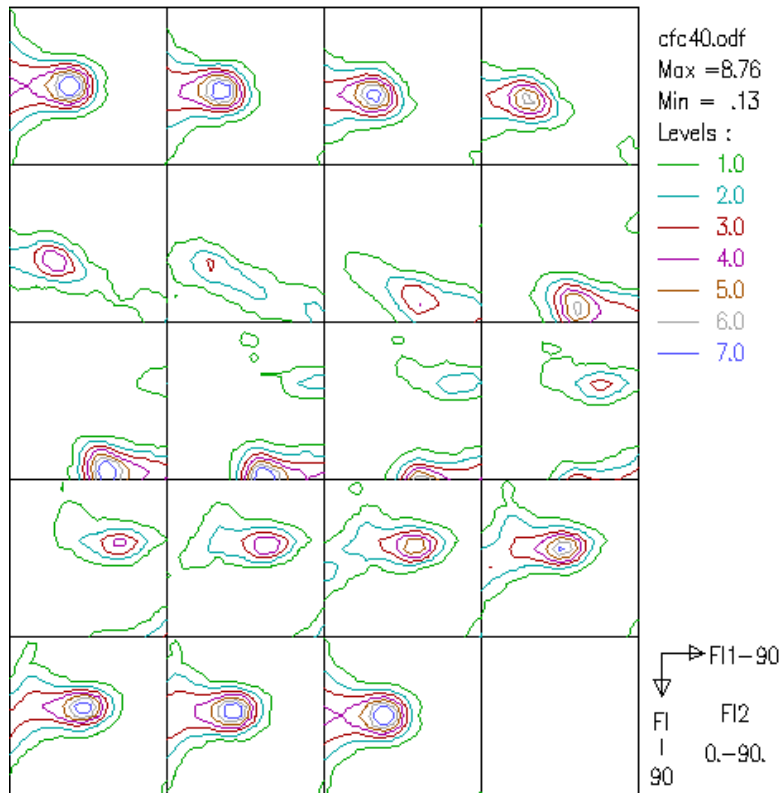
$V$  objętość próbki.

FRO przyjmuje wartości nieujemne  $f(g) > 0$  oraz spełnia warunek normalizacji

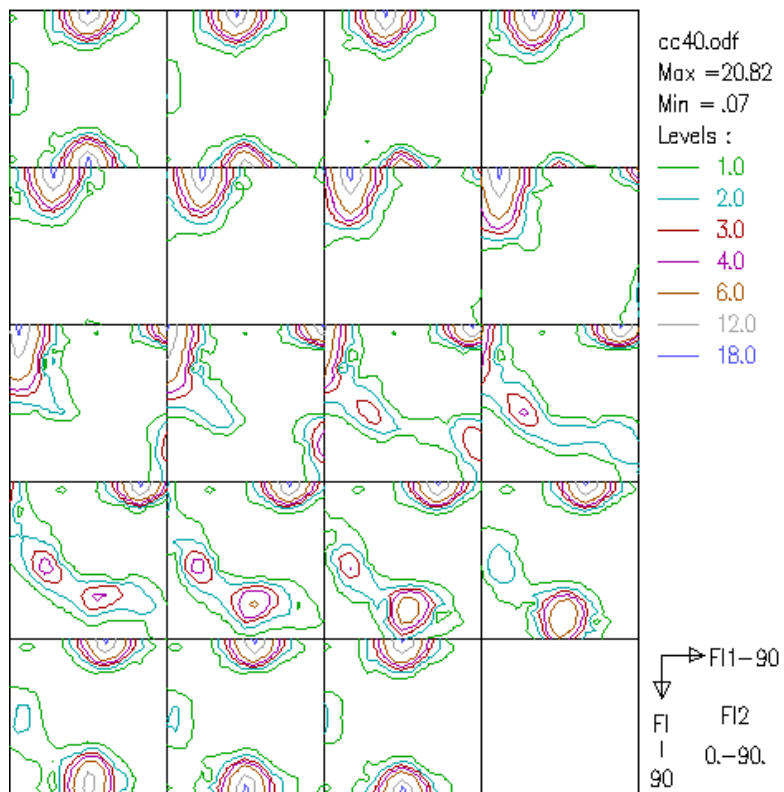
$$\oint f(g)dg = 1 \quad (1.10)$$

gdzie

$$dg = \frac{1}{8\pi^2} \sin \phi d\phi d\varphi_1 d\varphi_2$$

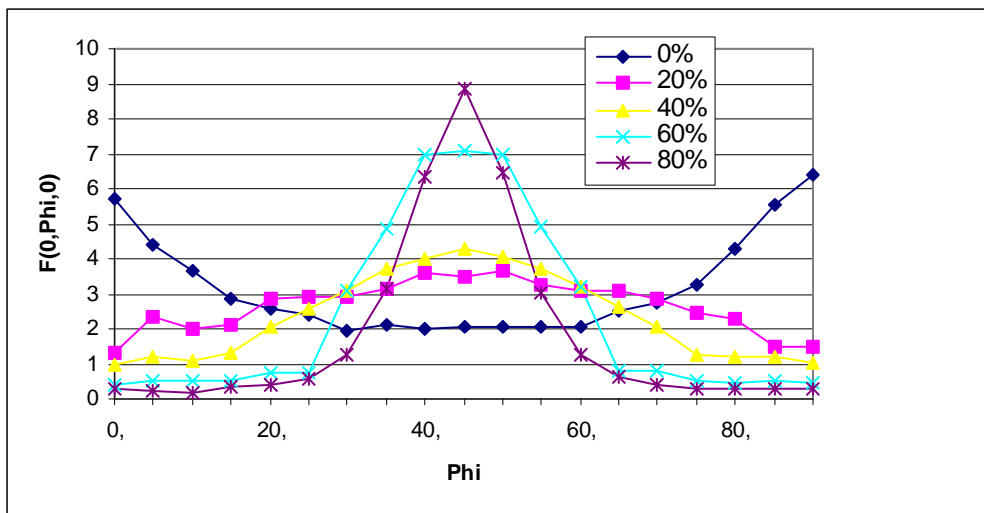


( a )

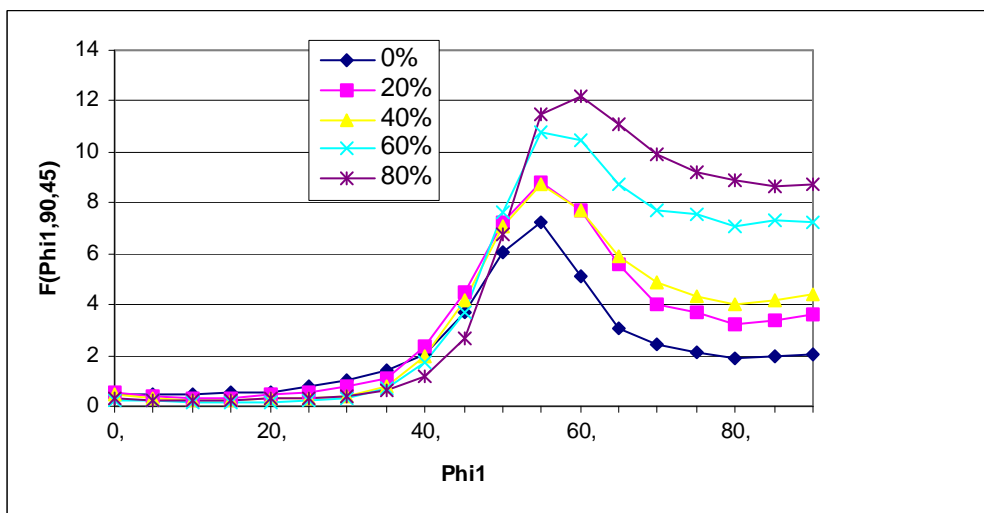


( b )

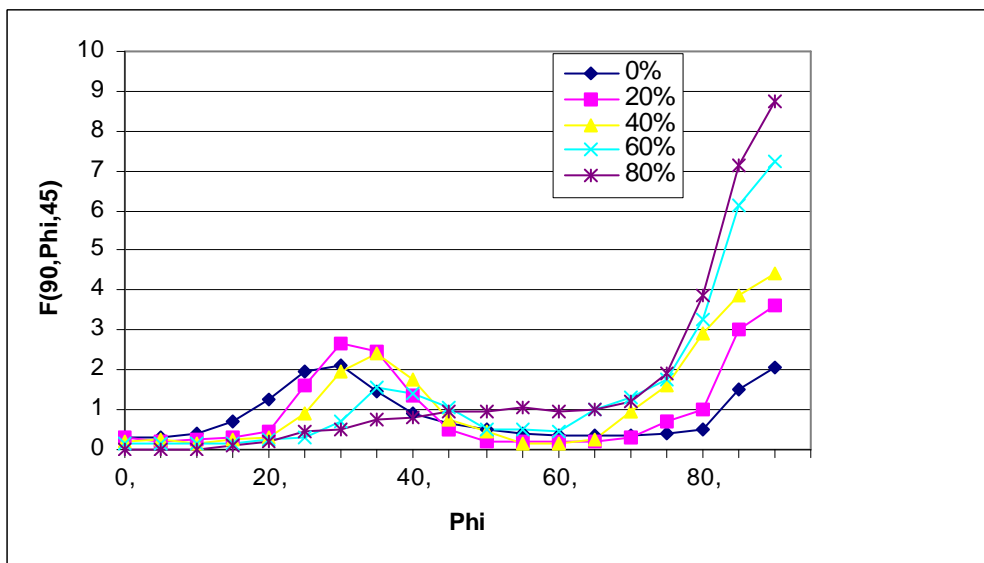
Rys. 5 Przykład funkcji rozkładu orientacji w walcowanej na zimno (zgniot 40%) stali ferrytyczno-austenitycznej: a) faza austenityczna b) faza ferrytyczna [42]



włókno  $\eta$  : kierunek  $\langle 100 \rangle$  równoległy do kierunku walcowania

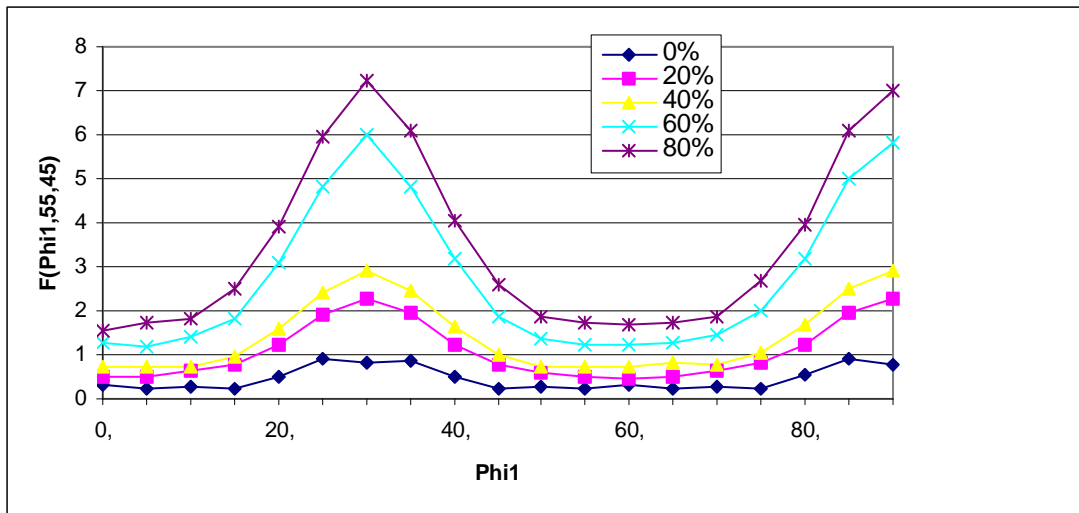


włókno  $\alpha$  : kierunek  $\langle 110 \rangle$  równoległy do kierunku normalnego

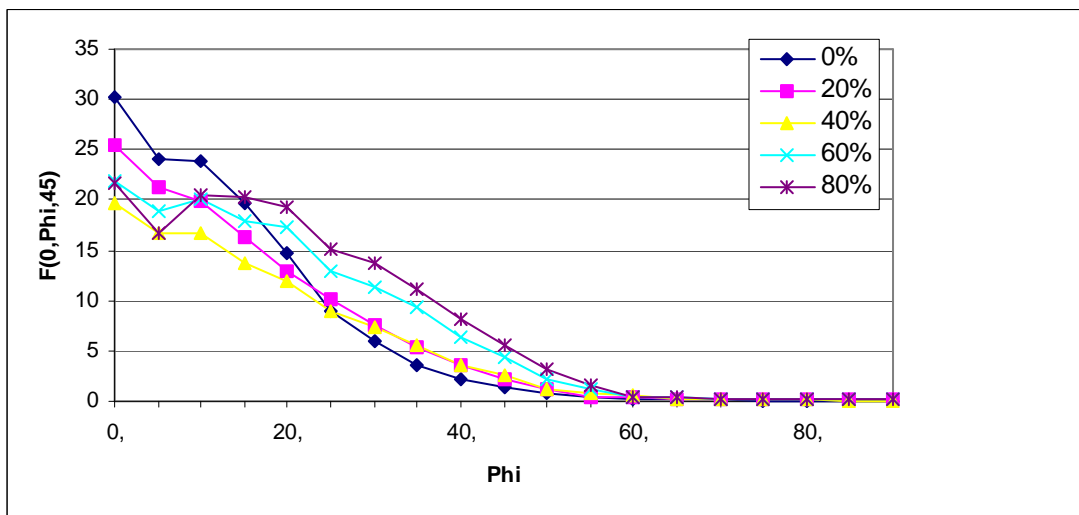


włókno  $\epsilon$  : kierunek  $\langle 110 \rangle$  równoległy do kierunku poprzecznego

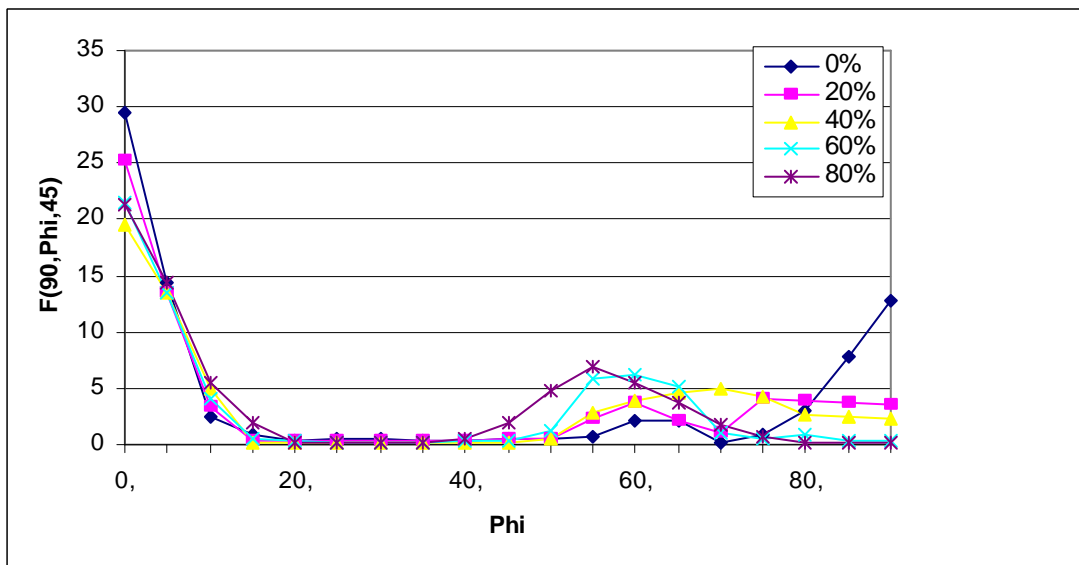
Rys. 6 Austenit po deformacji. Gęstość orientacji wzdłuż charakterystycznych „włókien” fazy  $\gamma$  .



włókno  $\gamma$  : kierunek  $\langle 111 \rangle$  równoległy do kierunku normalnego

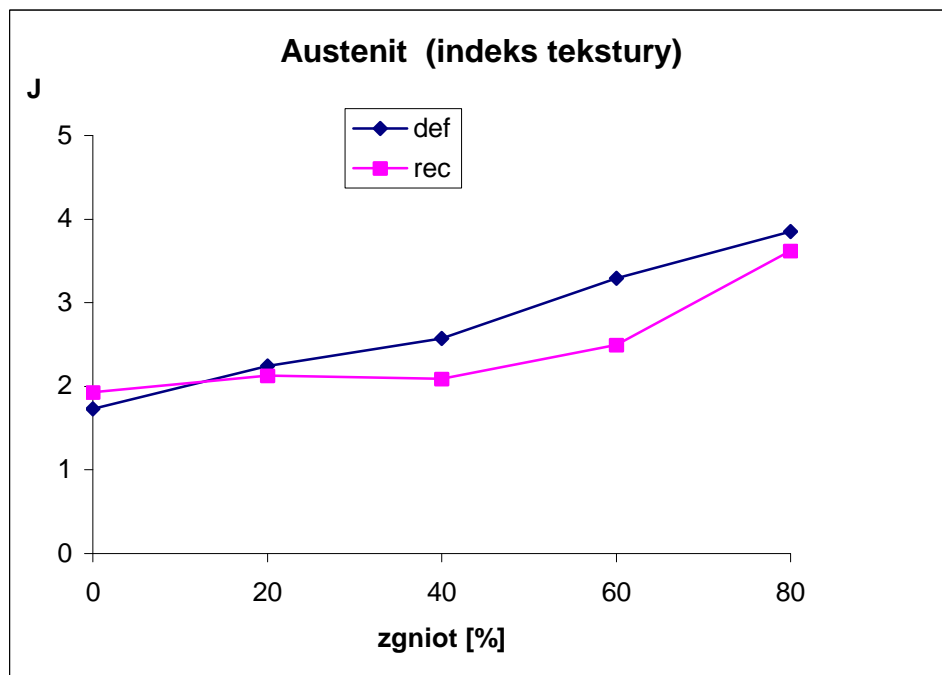
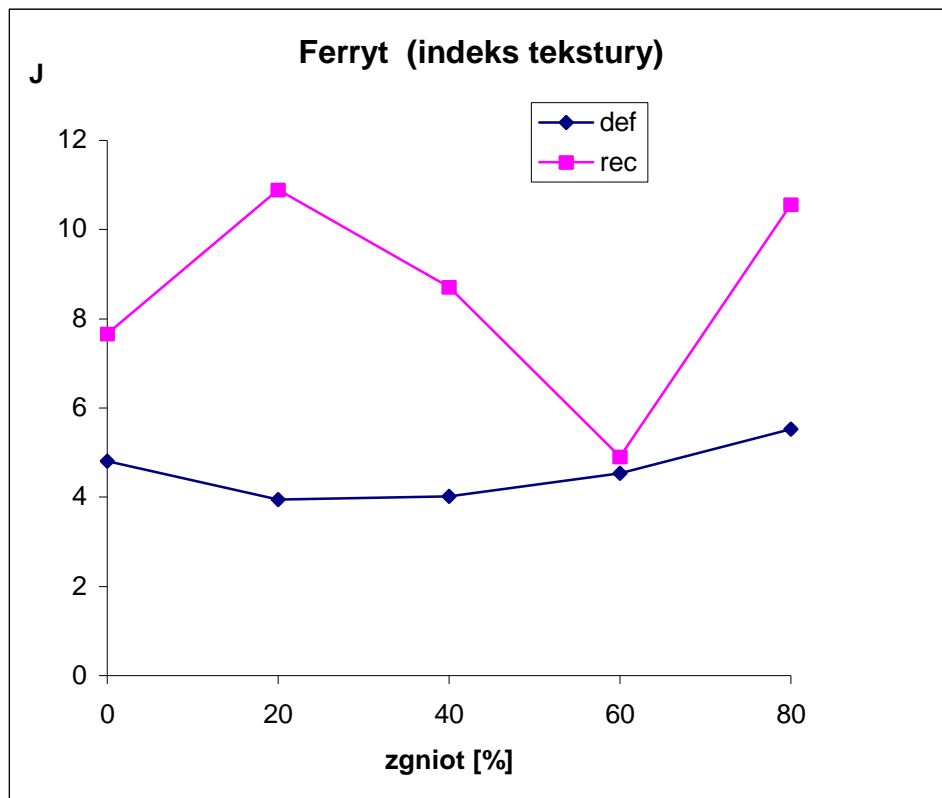


włókno  $\alpha$  : kierunek  $\langle 110 \rangle$  równoległy do kierunku walcowania



włókno  $\epsilon$  : kierunek  $\langle 110 \rangle$  równoległy do kierunku poprzecznego

Rys. 7 Ferryt po deformacji. Gęstość orientacji wzdłuż charakterystycznych „włókien” fazy  $\alpha$  .



Rys. 8 Zmiana indeksu tekstury J ( miara ostrości tekstury) w funkcji zgniotu w walcowanych i w wyżarzanych próbkach stali ferrytyczno-austenitycznej .

Rysunki 5, 6, 7 oraz 8 ilustrują sposoby przedstawiania rozkładu orientacji: przekroje FRO dla stałego kąta  $\varphi_2$ , rozkład gęstości orientacji wzdłuż charakterystycznych linii w przestrzeni orientacji, a także zmiany miary ostrości tekstury, tzw. indeksu tekstury  $J$

$$J = \oint f^2(g)dg \quad (1.11)$$

Podobnie jak FRO definiujemy funkcję rozkładu różnic orientacji (FRRO)  $F(\Delta g)$  [4]

$$F(\Delta g) = \frac{dV}{Vd\Delta g} \quad (1.12)$$

Tak zdefiniowana FRRO informuje o rozkładzie gęstości prawdopodobieństwa różnic orientacji każdej z możliwych par krystalitów, jest zatem zależna od tekstury w badanym materiale i dlatego nazywana jest „nieskorelowaną” funkcją rozkładu orientacji.

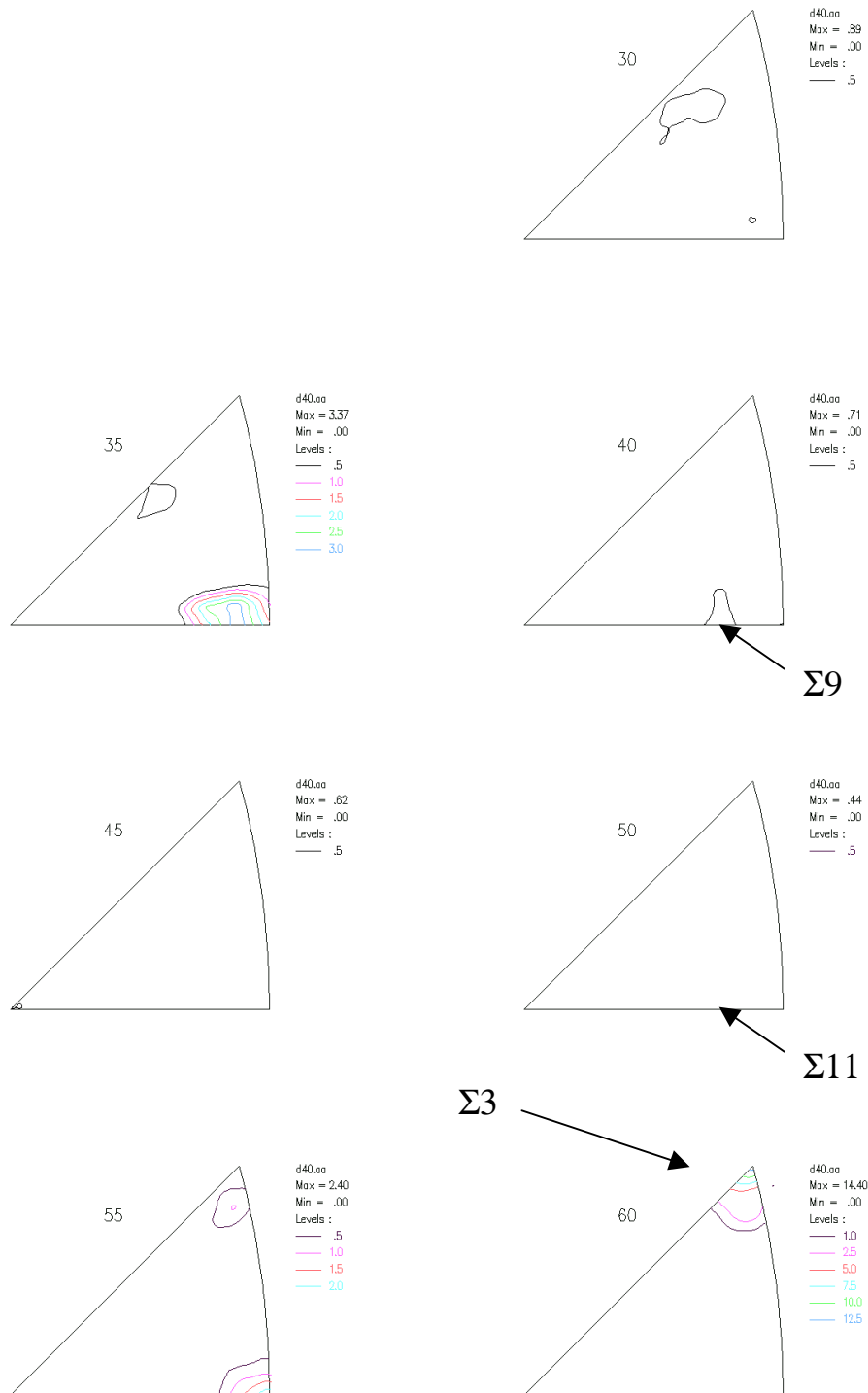
W praktyce ilościowej analizy tekstur często określana jest funkcja  $M(\Delta g)$ , w której uwzględnione są tylko różnice orientacji sąsiadujących krystalitów [43,44].

Z kolei funkcja  $F(\Delta g)$  traktowana bywa jako czynnik niwelujący wpływ tekstury (rozkładu orientacji) na rozkład różnic orientacji sąsiadujących krystalitów.

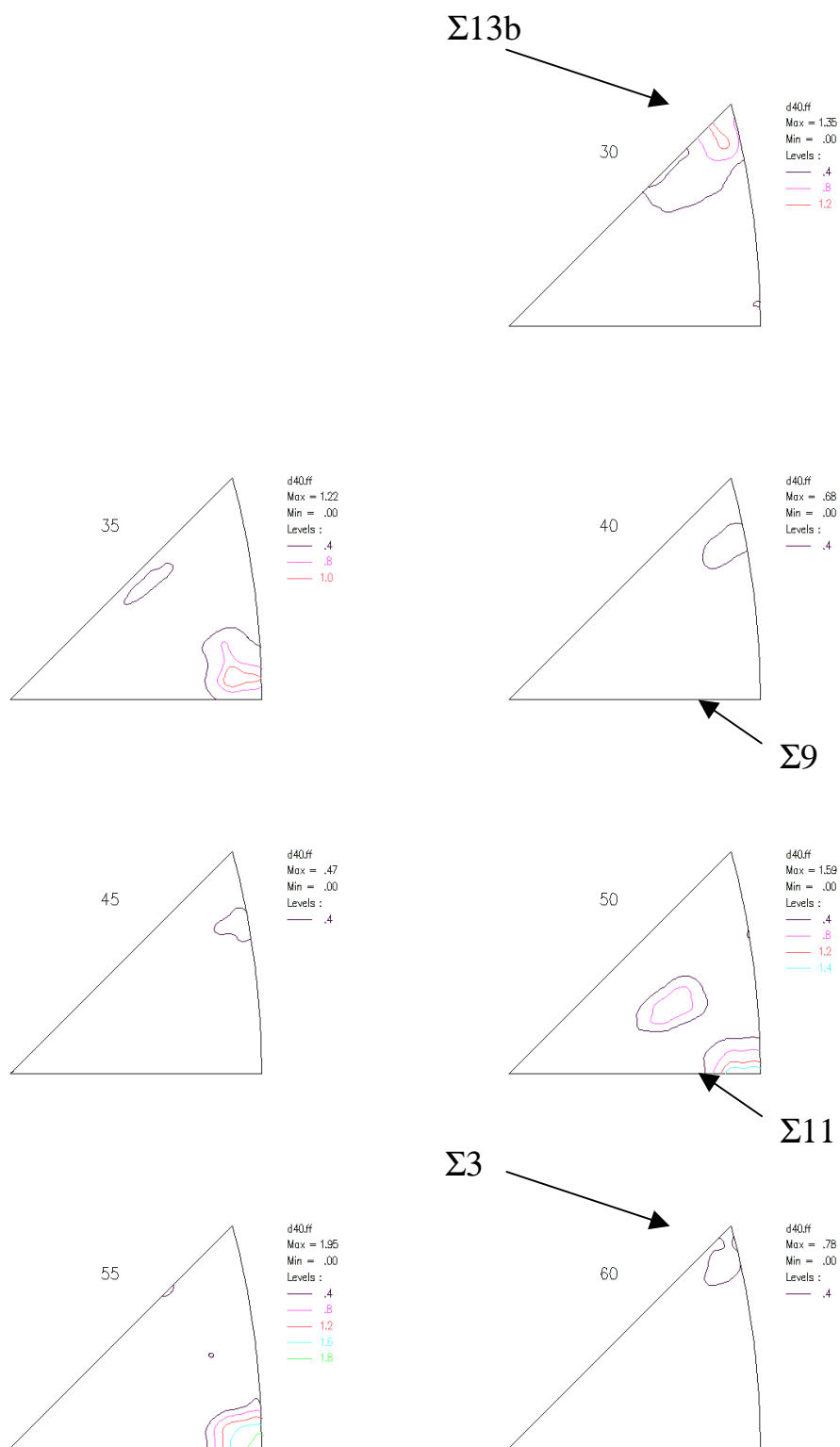
Określamy w ten sposób tzw. „skorelowaną” funkcję rozkładu różnic orientacji.

$$N(\Delta g) = \frac{M(\Delta g)}{F(\Delta g)} \quad (1.13)$$

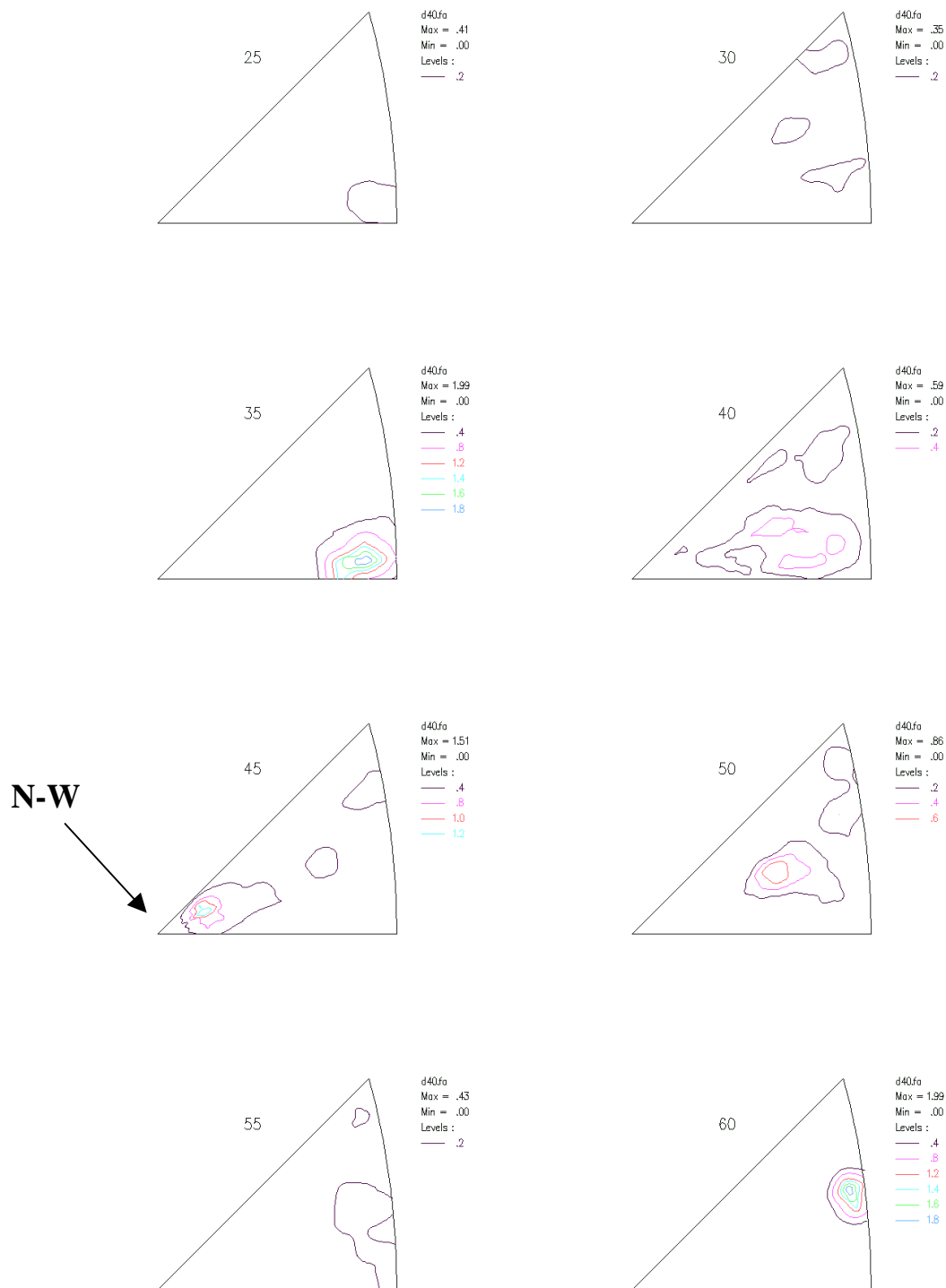
Często jako oszacowanie  $M(\Delta g)$  wyznaczany jest względny udział różnic orientacji par sąsiadujących punktów pomiarowych z pominięciem różnic orientacji o kącie  $\varpi < \varpi_{\min}$ , zazwyczaj przyjmuje się  $\varpi_{\min} = 5^\circ$ . Przykłady tak wyznaczonych rozkładów różnic orientacji przedstawione są na rysunkach 9 - 11. Kolejne rysunki 12 - 14 ilustrują różne sposoby przedstawiania składowych rozkładu różnic orientacji [ ].



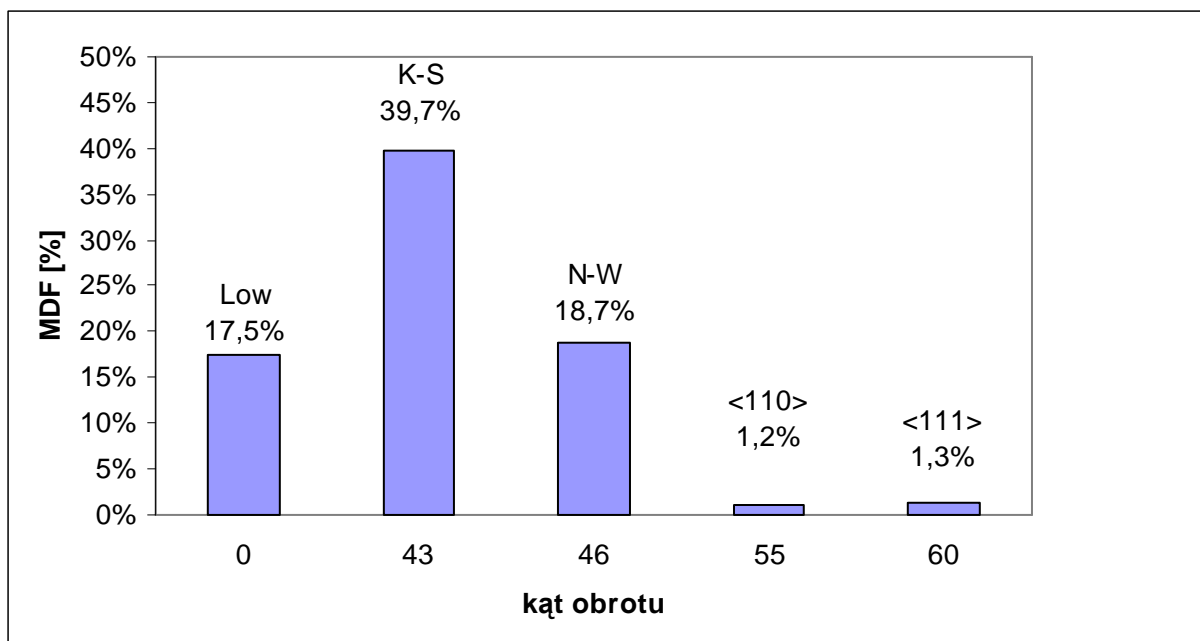
Rys.9 Oszacowanie funkcji rozkładu różnic orientacji  $M(\Delta g)$  w fazie austenitycznej



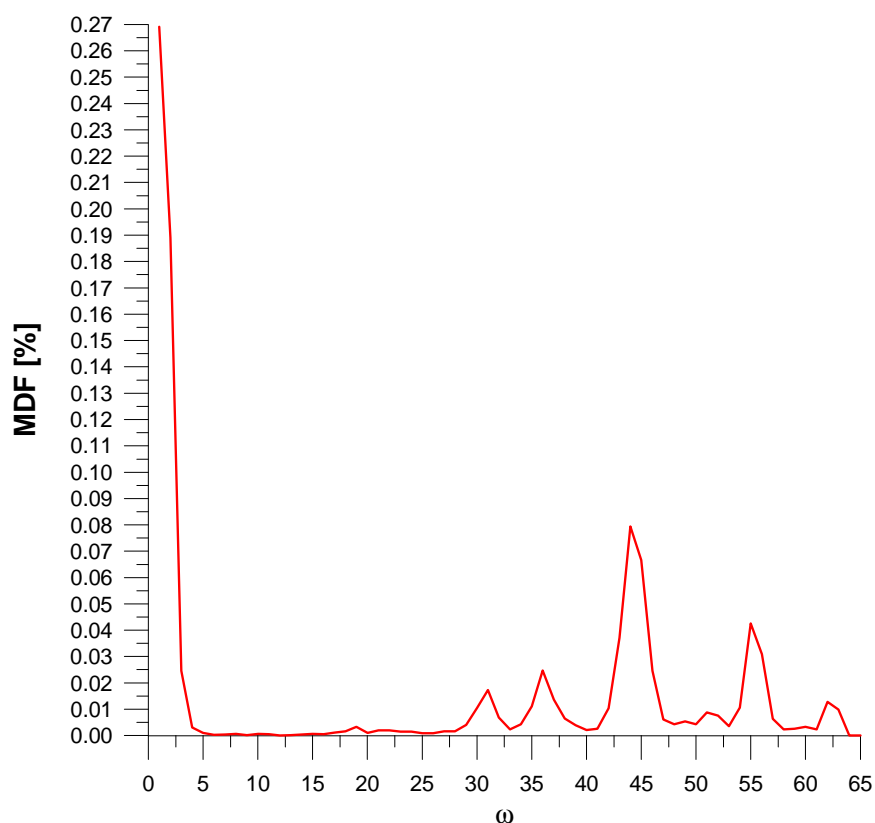
Rys.10 Oszacowanie funkcji rozkładu różnic orientacji  $M(\Delta g)$  w fazie ferrytycznej



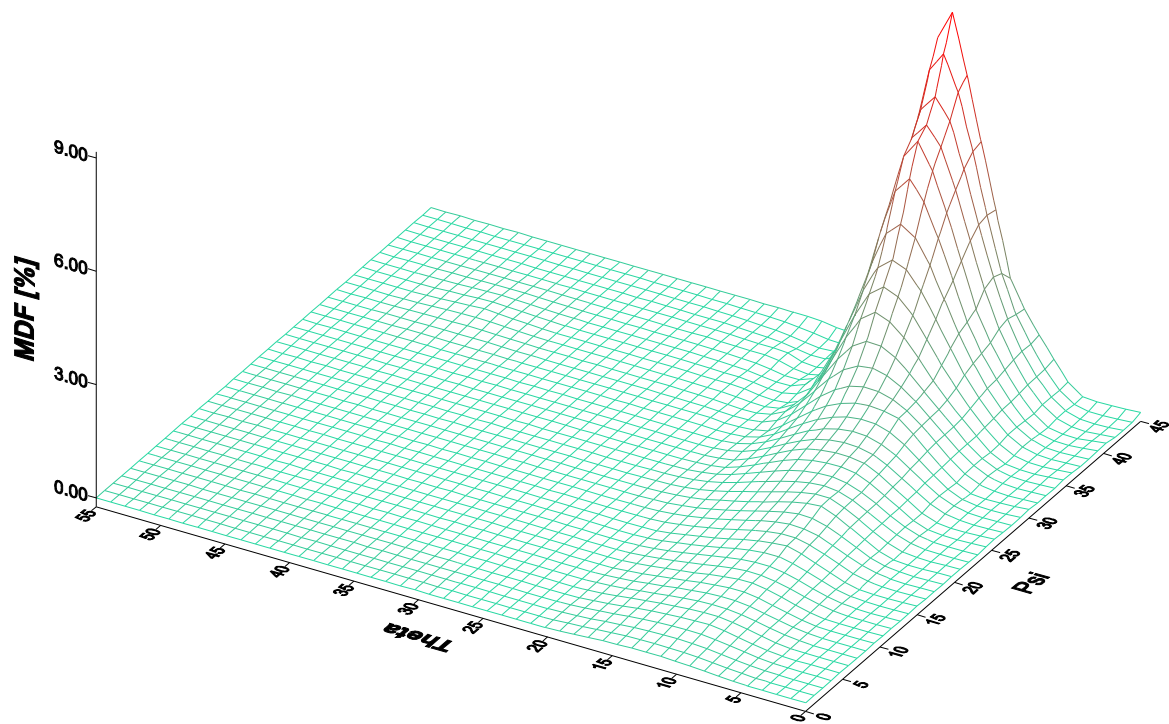
Rys.11 Oszacowanie funkcji rozkładu różnic orientacji  $M(\Delta g)$  pomiędzy ziarnami fazy austenitycznej i ferrytycznej



Rys.12 Względny udział dominujących różnic orientacji pomiędzy ziarnami faz austenicznej i ferrytycznej w funkcji kąta obrotu  $\omega$ ; K - S oznacza relację Kurdiumowa - Sachs, N - W relację Nishiyamy – Wassermana [45]



Rys. 13 Procent różnic orientacji pomiędzy ziarnami faz austenicznej i ferrytycznej w funkcji kąta obrotu  $\omega$  [45]



Rys. 14 Dwuwymiarowe przedstawienie rozkładu różnic orientacji pomiędzy ziarnami faz austenicznej i ferrytycznej dla kąta obrotu  $42.5^{\circ} < \varpi < 47.5^{\circ}$ . Rozległy pik obejmuje relacje K - S oraz N - W ( za zgodą prof. J.Mizery WIM PW, Raport z badań 2005).

## 2. Symetrie w przestrzeni orientacji

Rozpatrując właściwości rozkładów orientacji (jak również rozkładów różnic orientacji) musimy uwzględnić symetrię sieci krystalograficznej materiału oraz symetrię posiadaną przez materiał, wynikającą z symetrii charakteryzującej proces jego wytworzenia (np. symetrię procesu walcowania).

Symetria sieci krystalograficznej sprawia, że istnieje wiele symetrycznie równoważnych, tzn. fizycznie nierozróżnialnych sposobów zdefiniowania układu współrzędnych  $K_B$  związanego z siecią krystaliczną.

$$K_B^i = g_B^i * K_B \quad (2.1)$$

gdzie

$g_B^i$  - oznacza element symetrii punktowej układu krystalograficznego,  $i = 1, I$ .

Analogicznie uwzględniamy symetrię materiału (badanej próbki) wymuszoną przez symetrię procesu wytwarzania

$$K_A^j = g_A^j * K_A \quad (2.2)$$

gdzie

$g_A^j$  - jest elementem symetrii punktowej układu próbki,  $j = 1, J$ .

Symetria w układzie próbki uzewnętrznia się kiedy rozpatrujemy dużą ilość ziaren (kryształitów) tworzących polikrystaliczny agregat. Dlatego też jest określamy jako statystyczna.

Uwzględniając obie symetrie otrzymamy

$$K_B^{ij} = g_B^i g * g_A^j K_A \quad (2.3)$$

Iloczyn macierzy  $= g_B^i * g * g_A^j$  musi stanowić obrót właściwy to znaczy  $g_B^i, g_A^j$  muszą być równocześnie albo obrotami właściwymi albo niewłaściwymi, co warunkuje zachowanie tej samej skrętności przez układy  $K_A, K_B$ .

Z kolei FRO musi spełniać warunek niezmienniczości

$$f(g) = f(g_B g g_A) . \quad (2.4)$$

Analogicznie dla rozkładu różnic orientacji spełnione są warunki

$$K_A^{ij} = g_A^i \Delta g * g_A^j K_A \quad (2.5)$$

oraz

$$F(\Delta g) = F(g_A \Delta g g_A) . \quad (2.6)$$

Implikacje symetrii w układach  $K_A, K_B$  w przestrzeni orientacji przedstawiono w [46].

### 3. Wyznaczanie funkcji rozkładu orientacji na podstawie danych doświadczalnych

Wartości trójwymiarowej funkcji rozkładu orientacji nie można bezpośrednio zmierzyć. Dane pomiarowe, na podstawie których można aproksymować wartości FRO to zbiór ( na ogół trzech lub czterech ) dwuwymiarowych figur biegunowych zmierzonych techniką dyfrakcji promieni rentgenowskich lub neutronów dla różnych krystalograficznych płaszczyzn odbicia lub zbiór (od kilkuset do kilkudziesięciu tysięcy ) pojedynczych orientacji określonych na podstawie analizy obrazów dyfrakcyjnych otrzymanych w mikroskopie elektronowym, np. linii Kikuchiego.

#### 3.1 Figury biegunowe

Pomiar intensywności odbicia promieni rentgenowskich lub neutronów od płaszczyzn krystalograficznych pozwala określić rozkład ( gęstość prawdopodobieństwa ) normalnych do tych płaszczyzn czyli figurę biegunową.

W ilościowej analizie tekstury wprowadzono tzw. ogólną funkcję rozkładu osi  $A(h, y)$ , która określa gęstość prawdopodobieństwa występowania płaszczyzny krystalograficznej, której normalna ma współrzędne  $h = h(\vartheta, \psi)$  w układzie  $K_B$  oraz współrzędne  $y = y(\alpha, \beta)$  w układzie  $K_A$ . Pomiędzy  $f(g)$  i  $A(h, y)$  zachodzi związek

$$A(h, y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(g(\gamma)) d\gamma \quad (3.1)$$

gdzie

$\gamma$  oznacza kąt obrotu krystalitu wokół wektora o współrzędnych  $h$  w układzie  $K_B$  oraz  $y$  w układzie  $K_A$ .

Równanie ( 3.1) nazywane jest równaniem podstawowym. Warunek normalizacji  $A(h, y)$  ma postać

$$\oint A(h, y) dh dy = 16\pi^2 . \quad (3.2)$$

Specyfika dyfrakcyjnego pomiaru figury biegunowej  $P_h(y)$  sprawia, że nierozróżnialny pozostaje zwrot wektora  $h$  normalnego do płaszczyzny dyfrakcji (prawo Friedela) zachodzi zatem zależność

$$P_h(y) = \frac{1}{2}[A(h, y) + A(-h, y)]. \quad (3.3)$$

W ogólnym przypadku przekształceniu inwersji  $h \rightarrow -h$  nie odpowiada przekształcenie orientacji  $g$  w jej położenie symetrycznie równoważne ( rys.15 oraz rys.16 ) na co zwrócił uwagę S.Matthies formułując nową postać równania podstawowego określającego związek pomiędzy zmierzoną w eksperymencie dyfrakcyjnym figurą biegunową i FRO [7,16]

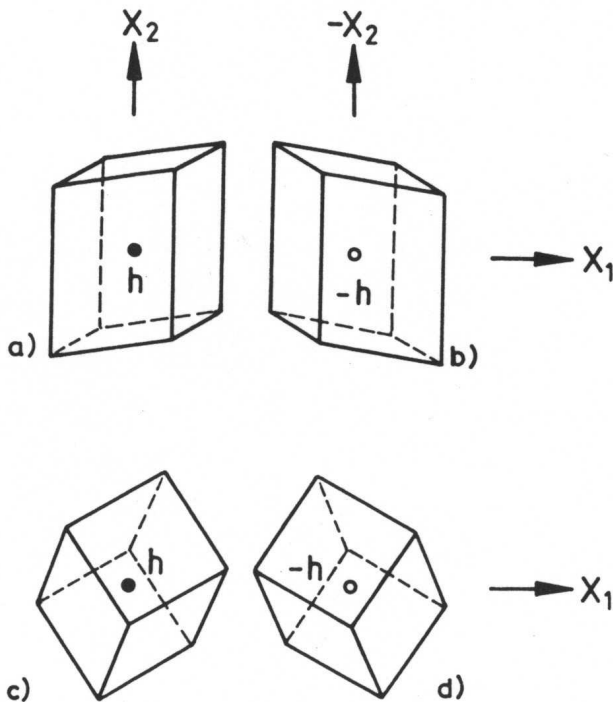
$$P_h(y) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} [f(H^{-1}(h, \gamma) * Y(y,0)) + f(H^{-1}(-h, \gamma) * Y(y,0))] d\gamma. \quad (3.4)$$

Iloczynny macierzy obrotu

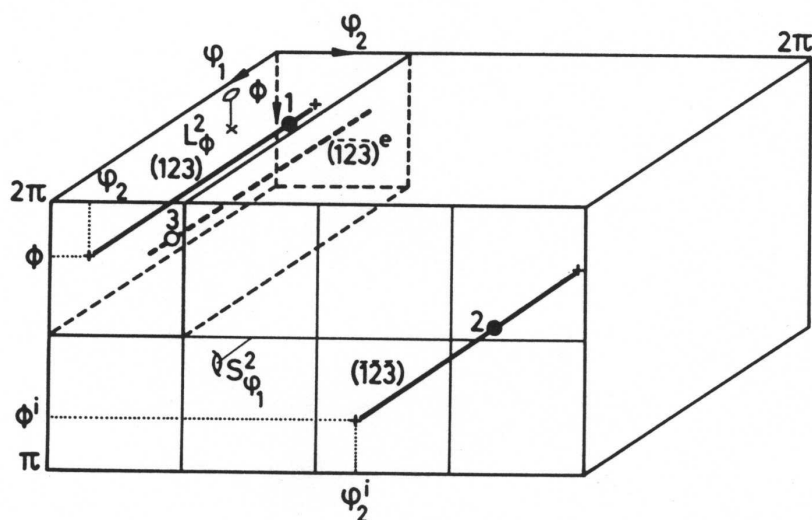
$$H^{-1}(h, \gamma) * Y(y,0) = g(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \quad \text{oraz} \quad H^{-1}(-h, \gamma) * Y(y,0) = g(\varphi_1', \phi', \varphi_2')$$

wyznaczają w przestrzeni orientacji linie całkowania, przy czym dla  $h = h(\vartheta, \psi)$  mamy

$$\varphi_1' = \pi + \varphi_1, \quad \phi' = \pi - \phi, \quad \varphi_2' = -2\psi - \varphi_2.$$



Rys.15 Kryształy symetrii regularnej ( c ,d ) oraz trojskońej ( a, b ) z kierunkiem  $h$  prostopadłym do płaszczyzny  $x_1x_2$  ( a, c ) oraz po obrocie kryształu o kąt  $180^\circ$  wokół osi  $x_1$  ( b, d ) [22].



Rys.16 Linie w przestrzeni orientacji odpowiadające obrotom kryształu o symetrii regularnej wokół kierunków (123) oraz  $(\bar{1}\bar{2}\bar{3})$  [22]. Linia przerywana  $(\bar{1}\bar{2}\bar{3})^e$  odpowiada położeniu symetrycznie równoważnemu z  $(\bar{1}\bar{2}\bar{3})$ .

Stosując relację ( 3.1 )

$$A(h, y) = P_h(y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(g(\gamma)) d\gamma = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(H^{-1}(h, \gamma) * Y(y, 0)) d\gamma \quad (3.5)$$

mylnie przyjmowano symetryczną równoważność orientacji po przekształceniu  $h \rightarrow -h$ .

W pracy [ ] wykazano, że jeżeli do rozwiązania równania podstawowego w postaci ( 3.1 ) stosowano metodę rozwinięć szeregowych to otrzymana FRO zawierała systematyczne błędy – zaburzenia nazwane w literaturze „duchami”.

Wprowadzenie poprawnej postaci równania podstawowego ( 3.4 ) miało istotne znaczenie dla metodyki ilościowej analizy tekstur i stanowiło czynnik inspirujący rozwój nowych metod wyznaczania FRO, które praktycznie eliminowały „duchy” [47-51,17-22].

### 3.2 Pojedyncze orientacje

Wykorzystanie zbiorów pojedynczych orientacji  $\{g_i; i = 1, I\}$  do określenia wartości FRO nie wiąże się z powyżej opisanymi trudnościami. Na podstawie uzyskiwanego w mikroskopie elektronowym obrazu dyfrakcyjnego (np. linii Kikuchiego) otrzymujemy trójwymiarową informację o orientacji w dowolnej parametryzacji, np.  $\{g_i = g(\varphi_1^i, \phi^i, \varphi_2^i)\}$ .

Aby otrzymać aproksymowane wartości  $f(g)$  wystarczy przekształcić zależność ( 1.9 ) definiującą FRO

$$f(g) = \frac{dV}{Vdg} \quad \rightarrow \quad f(g_i) \cong \frac{\Delta V(g_i)}{V\Delta g_i} \approx \frac{\Delta N(g_i)}{N\Delta g_i}, \quad (3.6)$$

gdzie  $\Delta N(g_i)$  oznacza liczbę pomiarów, dla których  $g \in [g_i - \frac{1}{2}\Delta g_i, g_i + \frac{1}{2}\Delta g_i]$ .

Dla „wygładzenia” wyników aproksymacji można stosować metodę rozwinięć szeregowych bez narażenia na „efekt duchów”. Występować jednak będzie systematyczny błąd związany z przzerwaniem szeregu dla skończonej wartości rzędu rozwinięcia.

#### 4. Model rozkładu orientacji

Rozkład orientacji w materiale polikrystalicznym formuje się pod wpływem działania wielu różnorodnych czynników takich jak skład chemiczny oraz parametry procesu wytwarzania, np. obróbki cieplno-mechanicznej: sposób odkształcania, zgniot, czas i temperatura wyżarzania.

Twierdzenie graniczne, znane ze statystyki, stwierdza; że rozkład wielkości, na którą wpływ ma wiele czynników jest bliski rozkładowi Gaussa. Czy zatem funkcja rozkładu orientacji, dla niektórych przypadków tekstur, może - w przybliżeniu - być interpretowana jako superpozycja rozkładów typu Gaussa wokół kilku wyróżnionych, charakterystycznych dla procesu formowania się i rozwoju tekstury orientacji .

Analiza rozkładów orientacji w metalach i ich stopach prowadzi do stwierdzenia, że posiadają one pewne charakterystyczne kształty. W metalach i stopach o sieci A1 postać rozkładu orientacji określa się w anglojęzycznej literaturze mianem „orientation tube”, dla którego trudno jest znaleźć polski odpowiednik. Natomiast formy obserwowane kiedy sieć jest typu A2 nazywane są włóknami lub ograniczonymi włóknami [4, 5].

Jak przedstawiono w licznych pracach [25-32, 52] „orientation tube” można interpretować jako superpozycję rozkładów typu Gaussa wokół kilku orientacji, np. stabilnych w procesie walcowania lub uprzywilejowanych w procesie rekrytalizacji podczas wyżarzania materiału.

Podobnie opisać można rozkład wokół osi „włókna” analizując tekstury w materiałach o sieci A2 [ 4, 5, 53, 54 ].

Dla wysokich stopni zgniotu i dla wielu tekstur w materiałach po rekrytalizacji pierwotnej takie modelowe przedstawienie stanowi dobre przybliżenie FRO [55].

Modelując FRO można mieć na względzie uzyskanie jej przybliżonej postaci jak najwierniej odpowiadającej tej, którą wyznaczono na podstawie danych doświadczalnych. Bardziej interesująca jest jednak możliwość ilościowego scharakteryzowania tzw. składowych tekstury to jest składników superpozycji wraz z ich parametrami: udziałami objętościowymi oraz parametrami rozmycia wokół wyróżnionych położeń - prostą próbę takiego opisu przedstawiono w pracy [56].

#### 4.1 Składowa tekstury

Przez składową tekstury rozumiemy orientację  $g_i$  wraz z jej umownie przyjętym otoczeniem, w którym występuje podwyższona gęstość orientacji ( FRO przyjmuje wartości wyższe od 1.0 ). Analiza rozkładów orientacji w metalach i ich stopach o regularnej sieci krystalicznej pozwala przyjąć założenie, że poprawny, a równocześnie prosty opis składowej  $g_i$  tekstury otrzymamy jeśli założymy, że orientacje  $g_{ic}$  w otoczeniu  $g_i$  określone obrotem krystalitu o orientacji  $g_i$  wokół dowolnej osi obrotu  $a(v, \psi)$  o ten sam kąt obrotu  $\omega_c$  występują z tą samą gęstością prawdopodobieństwa.

$$f_i(g) = f(g_{ic}) = f(a, \omega_c) = const; \quad \omega_c = |g_i^{-1} g_{ic}|. \quad (4.1)$$

Tak określona funkcja  $f_i(g)$  zależy tylko od kąta obrotu  $\omega$ ,  $f_i(g) = S_i(\omega)$ , gdzie funkcja  $S_i(\omega)$  charakteryzuje „rozmycie” rozkładu wokół położenia  $g_i$ .

Symetria sieci krystalicznej oraz tzw. statystyczna symetria próbki badanego materiału implikuje uwzględnienie wszystkich symetrycznie równoważnych orientacji  $\{g_i^k, k = 1, K_i\}$ .

Zaproponowany opis składowej tekstury jest „izotropowy” ze względu na kierunek osi  $\mathbf{a}$ . Obserwowane odstępstwa od modelu FRO wyznaczanych z danych doświadczalnych dla różnych symetrii sieci krystalicznej, przejawiające się jako „anizotropowy” rozkład kierunków osi  $\mathbf{a}$  można uwzględnić przy pomocy superpozycji kilka zlokalizowanych blisko siebie rozkładów lub też wprowadzić inny przepis na funkcję rozmycia  $S_i(g)$ , [ 57-64 ].

Współczynnik normalizacji funkcji rozmycia  $S_i$  odpowiada z definicji objętościowemu udziałowi  $W_i$ ,  $i$ -tej składowej w teksturze

$$W_i = \frac{V_i}{V} = \oint S_i(g) dg, \quad (4.2)$$

gdzie  $V$  – objętość próbki,  $V_i$  – objętość krystalitów przypisanych do  $i$ -tej składowej.

Rozmycie  $S_i(\omega)$  można określić, jak to zaproponował H.J.Bunge [4,5], przy pomocy funkcji typu rozkład Gaussa

$$f_i(g) = S_i(\omega) = S_{0i} \exp\left(-\frac{\omega^2}{\omega_{0i}^2}\right), \quad (4.3)$$

gdzie

$$S_{0i} = \frac{2\sqrt{\pi}W_i}{K_i\omega_{0i}\left[1 - \exp\left(\frac{\omega_{0i}^2}{4}\right)\right]}$$

$$\omega = |g \cdot g_i^{-1}|$$

Inny przepis na funkcję rozmycia, tzw. standardowy rozkład Gaussa, zaproponował S.Matthies [30a]

$$f_i(g) = S_i(\omega) = S_{0i} \exp[s_{0i} \cos(\omega)], \quad (4.4)$$

gdzie

$$s_{0i} = \frac{\ln(2)}{2 \sin^2\left(\frac{b_{0i}}{4}\right)}, \quad S_{0i} = \frac{W_i}{I_0(s_{0i}) - I_1(s_{0i})}$$

$I_0, I_1$  oznaczają zmodyfikowane funkcje Bessla.

Parametry  $\omega_{0i}, b_{0i}$  określają rozmycie rozkładu orientacji wokół położenia  $g_i$ . Zatem wartości :

$W_i, \omega_{0i}, b_{0i}$  ilościowo charakteryzują składową  $g_i$ .

Dla rozpatrywanych w praktyce ilościowej analizy tekstur wartości parametrów rozmycia (od 5 do 20 stopni) rozkłady zaproponowane przez H.J.Bungego oraz S.Matthies różnią się tylko w niewielkim stopniu. Zaletą standardowego rozkładu jest możliwość analitycznego wyznaczenia niektórych ważnych całek modelowych rozkładów orientacji oraz spełnianie zależności:  $S_i(\omega - \pi) = S_i(\omega + \pi)$ ; wynikającej z właściwości przestrzeni orientacji, a którą funkcja  $S_i(\omega)$  powinna posiadać.

Możliwość analitycznego całkowania rozkładu (4.4) pozwoliła na sporządzenie [30b,30c] atlasu modelowych FRO odpowiadających składowym typowym tekstur odkształcenia i rekrytalizacji dla metali o regularnej sieci krystalicznej. Natomiast prosta formuła określająca rozkład (4.3) predestynuje go w obliczeniach numerycznych wymagających wielokrotnego powtarzania; na przykład przy oszacowywaniu wartości parametrów składowych ( $W_i, \omega_{0i}, b_{0i}$ ) na podstawie FRO wyznaczonej z danych doświadczalnych.

Opisane modelowe przedstawienie składowej tekstury dobrze odpowiada postaciom rozkładów orientacji wyznaczanym dla metali i stopów o sieci A1.

Jak wspomniano powyżej w materiałach o sieci A2 występuje typ rozkładu orientacji określany jako „włókno”. Rozkład typu włókno oznacza, że wszystkie orientacje  $g$  powstające przez obrót o dowolny kąt  $\omega$  wokół tej samej osi  $a_j$  występują z jednakową gęstością prawdopodobieństwa

$$f_j(g) = f(g_{jc}) = f(a_j, \omega) = \text{const.} \quad (4.5)$$

Oś  $a_j$  jest określona przez zadanie kierunków  $h_j$  – w układzie krystalitu oraz  $y_j$  w układzie próbki:

$$a_j = \langle h_j, y_j \rangle. \text{ Kierunki } h_j, y_j \text{ spełniają równanie } h_j = g * y_j.$$

W przypadku istnienia symetrii sieci krystalicznej i statystycznej symetrii próbki należy uwzględnić wszystkie symetrycznie równoważne osie  $\{a_j^k; k = 1, K_j\}$ .

Tak zdefiniowany rozkład orientacji jest rotacyjnie symetryczny względem osi  $a_j$ , zatem odpowiada teksturze typu włókna.

Przyjmijmy, że w pewnym obszarze przestrzeni orientacji wartości FRO zależą tylko od kąta  $\vartheta$  pomiędzy pewną  $a_j$  i dowolną osią  $a$  czyli  $f_j(g) = S_j(\vartheta)$  i opiszmy funkcję rozmycia  $S_j(\vartheta)$  przy pomocy rozkładu typu Gaussa [4,5]

$$f_j(g) = S_j(\vartheta) = S_{0j} \exp\left(-\frac{\vartheta^2}{\vartheta_{0i}^2}\right), \quad (4.6)$$

gdzie

$$S_{0j} = \frac{4W_j}{\sqrt{\pi} K_j \vartheta_{0j} \exp\left(\frac{\vartheta_{0j}^2}{4}\right) \text{erf}\left(\frac{\vartheta_{0j}}{2}\right)}.$$

Współczynnik normalizacji  $W_j$  funkcji rozmycia  $s_j(\vartheta)$  jest z definicji równy objętościowemu udziałowi składowej typu włókna  $\langle h_j, y_j \rangle$ .

Analiza rozkładów orientacji wskazuje, że obserwowana gęstość orientacji przy zadanej osi  $a$  nie zawsze jest stała w funkcji kąta  $\vartheta$ . Czasem maleje ona silnie w pobliżu pewnej orientacji  $g_r$  odpowiadającej wartości kąta  $\vartheta = \vartheta_r$ . Mówimy wówczas o składowej typu „ograniczonego włókna”. Prosty model tego typu składowej uzyskamy umieszczając w położeniu  $g_r$  składową o tej samej szerokości rozmycia i wartości gęstości orientacji w położeniu  $g_r$  jaką ma składowa typu włókna, ale o ujemnej wartości udziału objętościowego  $W_r < 0$ , [53].

Udział objętościowy takiego ograniczonego włókna jest równy:  $W_{jr} = W_j + W_r$ .

Zachodzi także:  $S_{0r} = S_{0j} = S_{0jr}$  oraz  $\omega_{0r} = \vartheta_{0j} = \sigma_{0jr}$

Udziały faz  $W_j, W_r$  są określone przez zależności

$$W_j = \frac{W_{jr}}{1-q}, \quad W_r = -\frac{qW_{jr}}{1-q} \quad (4.7)$$

gdzie

$$q = \frac{2K_i[1 - \exp(-\Omega_{0jr}^2/4)]}{\pi K_j \exp(-\Omega_{0jr}^2/4) \operatorname{erf}(\Omega_{0jr}/2)}.$$

#### 4.2 Współczynniki szeregowego rozwinięcia funkcji rozmycia

Dla wykonywania obliczeń numerycznych funkcja rozkładu orientacji  $f(g)$  jest przedstawiana w postaci rozwinięcia w szereg uogólnionych funkcji kulistych  $T_l^{mn}(g)$  z współczynnikami rozwinięcia  $C_l^{mn}$  [ ]. Również funkcje rozmycia  $S_i(\omega)$  oraz  $s_j(\vartheta)$  można rozwinąć w szereg funkcji  $T_l^{mn}(g)$ . Jeżeli funkcja  $S_i(\omega)$  dana jest przez relację ( 4.3 ) to współczynniki jej szeregowego rozwinięcia są równe [25]

$$C_{li}^{mn} = W_i \frac{\exp[-l^2 \omega_{0i}/4] - \exp[-(l+1)^2 \omega_{0i}/4]}{1 - \exp[-\omega_{0i}^2/4]} T_l^{*mn}(g_i). \quad (4.8)$$

Natomiast w przypadku gdy  $S_i(\omega)$  dana jest przez formułę ( 4.4 ) mamy [30a]

$$C_{li}^{mn} = W_i \frac{I_l(s_{0i}) - I_{l+1}(s_{0i})}{I_0(s_{0i}) - I_1(s_{0i})} T_l^{*mn}(g_i). \quad (4.9)$$

Z kolei dla składowej typu włókna otrzymamy [53,54]

$$C_{lj}^{mn} = \frac{4}{\sqrt{2\pi}} W_j \left\{ \frac{1}{\operatorname{erf}(v_{0j}/2)} \sum_{r=1(2)}^{\infty} \varepsilon_r M_j^r \exp[-(r^2 - 1)v_{0j}^2/4] \right\} k_l^{*m}(h_j) k_l^n(y_j) \quad (4.10)$$

gdzie

$$\varepsilon_r = 1 \quad \text{dla } r = 0$$

$$\varepsilon_r = 2 \quad \text{dla } r \neq 0$$

$M_l^r$  są stałymi współczynnikami [4,5]

$k_l^m(h), k_l^n(y)$  oznaczają powierzchniowe funkcje kuliste.

### 4.3 Model funkcji rozkładu orientacji

W teksturze badanego materiału mogą występować wysokie gęstości orientacji ( to jest wartości funkcji  $f(g)$  ) zarówno w otoczeniu wyróżnionych pojedynczych orientacji  $g_i, \{g_i; i = 1, I\}$  jak i w obszarach, w których orientacje są związane obrotem wokół osi  $a_j, \{a_j; j = 1, J\}$ .

Modelowe przedstawienie FRO –  $f_{\text{mod}}(g)$  uzyskamy przyjmując opis składowych  $g_i$  oraz  $a_j$  przy pomocy funkcji rozmycia  $S$ . Dodatkowo można wprowadzić stały składnik  $R$  reprezentujący udział krystalitów zorientowanych chaotycznie

$$f_{\text{mod}}(g) = R + \sum_{i=1}^I f_i(g) + \sum_{j=1}^J f_j(g) \quad (4.11)$$

Z warunku normalizacji FRO otrzymamy wówczas

$$R + \sum_{i=1}^I W_i + \sum_{j=1}^J W_j = 1 \quad (4.11)$$

Tak skonstruowana modelowa reprezentacja rozkładu orientacji pozwala scharakteryzować teksturę badanego materiału przy pomocy wartości parametrów określających objętościowe udziały składowych oraz ich rozmycia. Uzyskamy w ten sposób syntetyczny opis tekstury.

### 4.4 Oszacowanie wartości parametrów modelu rozkładu orientacji

Przeprowadzając średniokwadratową aproksymację rozkładu wyznaczonego na podstawie danych doświadczalnych  $f_{\text{exp}}(g)$  poprzez jego modelowe przedstawienie  $f_{\text{mod}}(g)$  - to jest superpozycję rozkładów  $f_{i\text{mod}}(g)$  oraz  $f_{j\text{mod}}(g)$  przypisanych głównym składowym tekstury oraz składnika  $R$  określającego udział krystalitów zorientowanych chaotycznie możemy oszacować wartości parametrów modelu czyli: udziały objętościowe składowych  $W_i, W_j, R$  oraz szerokości rozmycia  $\omega_{0i}, \vartheta_{0j}$ .

$$\oint [f_{\text{exp}}(g) - f_{\text{mod}}(g)]^2 dg = \min. \quad (4.12)$$

Oszacowanie wartości parametrów modelu można wykonać w oparciu o szeregowe rozwinięcia funkcji  $f_{\text{exp}}(g)$  oraz  $f_{\text{mod}}(g)$ , wówczas aproksymujemy współczynniki  $C_{l\text{exp}}^{mn}$  za pomocą  $C_{l\text{mod}}^{mn}$

$$\sum_{l,m,n} \frac{1}{2l+1} [C_{l\text{mod}}^{mn}(R, \{W_i, \omega_{0i}, g_i, i = 1, I\}, \{W_j, \vartheta_{0j}, a_j, j = 1, J\}) - C_{l\text{exp}}^{mn}]^2 = \min \quad (4.13)$$

gdzie współczynniki  $C_{l\text{mod}}^{mn}$  określa wyrażenie

$$C_{l\text{mod}}^{mn} = \sum_{i=1}^l C_{\text{limod}}^{mn} + C_{lj\text{mod}}^{mn} . \quad (4.14)$$

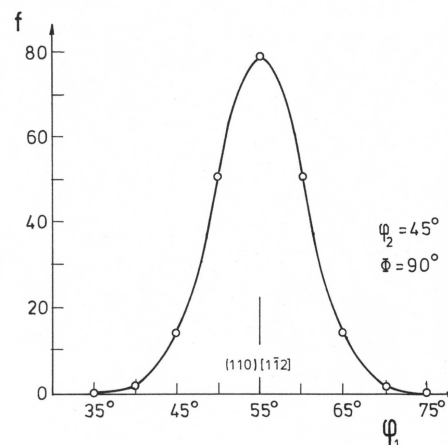
Jeżeli dysponujemy zbiorem wartości funkcji  $f_{\text{exp}}(g) : \{f_{\text{exp}}(g_o); o = 1, O\}$  otrzymanym w wyniku zastosowania tzw. bezpośrednich metod wyznaczania FRO, wówczas oszacowanie wartości parametrów składowych można przeprowadzić na podstawie formuły

$$\sum_{o=1}^O [f_{\text{exp}}(g_o) - f_{\text{mod}}(g_o)]^2 = \min \quad (4.15)$$

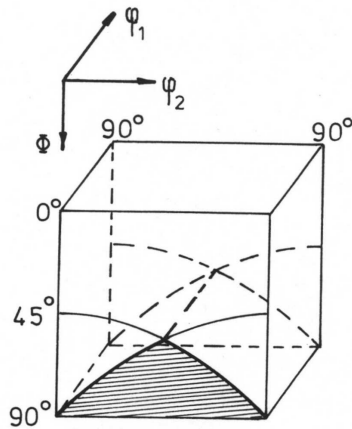
lub

$$\sum_{o=1}^O [f_{\text{exp}}(g_o) - f_{\text{mod}}(g_o)]^2 \Delta g_o = \min . \quad (4.16)$$

Taki sposób oszacowywania wartości parametrów składowych pozwala uniknąć tzw. błędu obciążenia rozwinięcia szeregowego przy  $l = L_{\text{max}}$ . Metody bezpośrednie dostarczają również dokładniejszych wartości FRO ponieważ eliminują zaburzenia rozkładu spowodowane tzw. „efektem duchów” występujące przy klasycznej metodzie rozwinięć szeregowych. Wynik jest natomiast zależny od liczności zbioru zmierzonych orientacji  $O$  oraz od gęstości rozmieszczenia punktów pomiarowych  $g_o$  w przestrzeni orientacji.



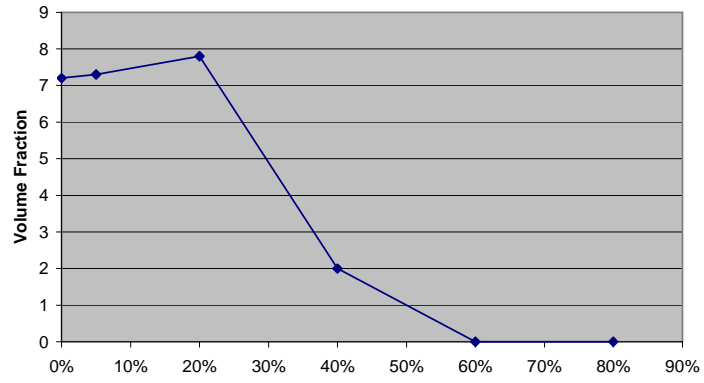
Rys. 17 Przekrój przez pik składowej  $\{110\}\langle 112\rangle$ ; o – wartości wzorcowej FRO, x – wartości otrzymane na podstawie oszacowania.



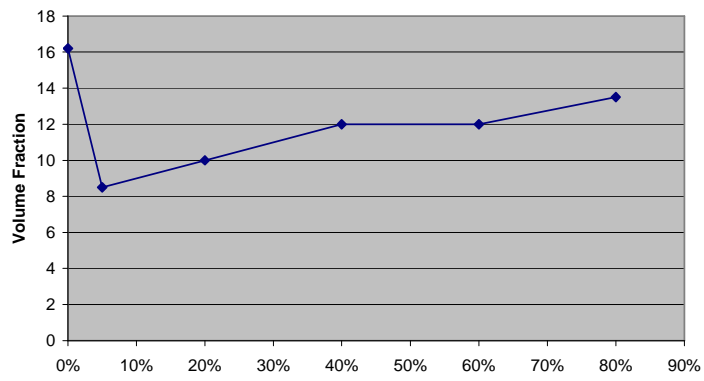
Rys. 18 Obszar podstawowy przestrzeni orientacji przy symetrii regularno-rombowej, w którym przeprowadzane jest oszacowanie parametrów składowych

Przykład zastosowania metody oszacowania parametrów składowych tekstur przedstawiono na rysunkach 17 i 18. Rysunek 17 pokazuje wynik testu metody przeprowadzonego na podstawie zbioru wartości modelowego rozkładu orientacji ( rozkład wzorcowy) w jednym z obszarów podstawowych przestrzeni orientacji ( rys.18 ) dla przypadku regularno-rombowej symetrii krystalit-próbka.

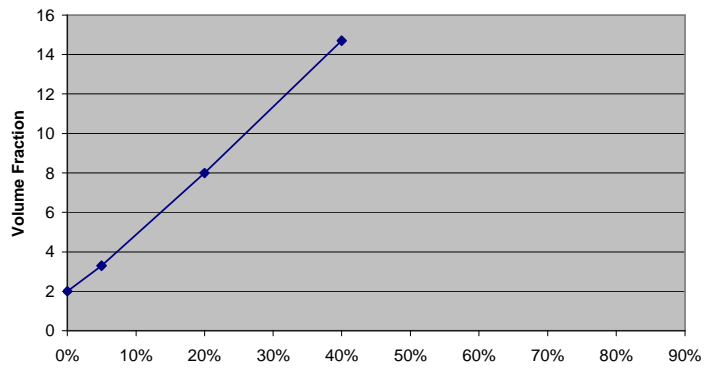
Z kolei rysunki 19 i 20 zawierają wyniki oszacowania głównych składowych w teksturze fazy ferrytycznej oraz austenicznej stali o strukturze duplex walcowanej na zimno do różnych stopni zgniotu [ ].



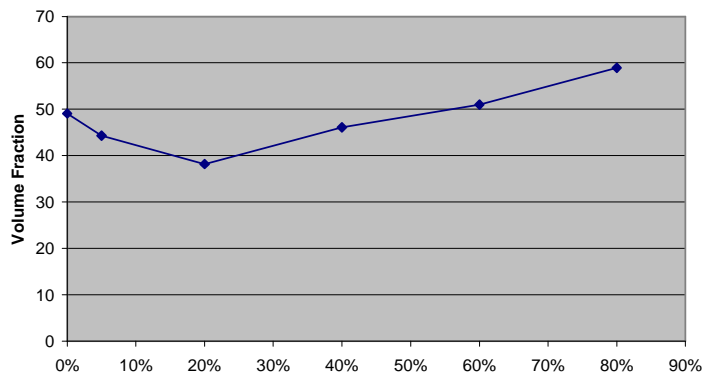
**{110}<001>**



**{001}<110>**

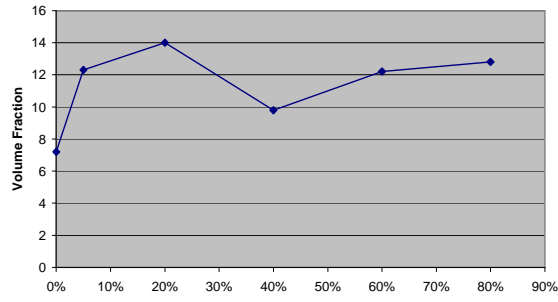


**{332}<113>**

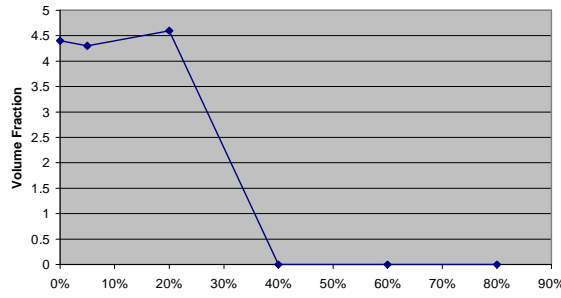


**110//RD**

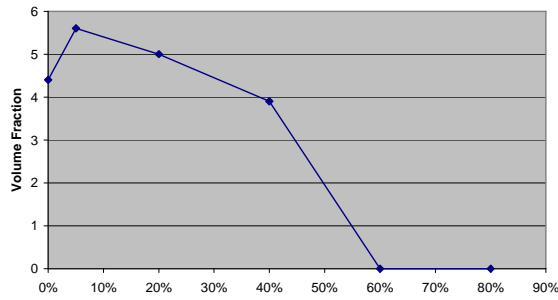
Rys. 19 Zmiany udziału składowych tekstury ferrytu w funkcji zgniotu [42]



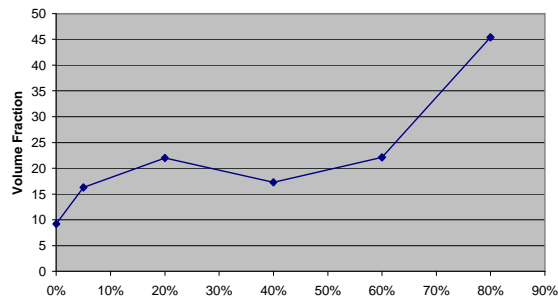
**{110}<112>**



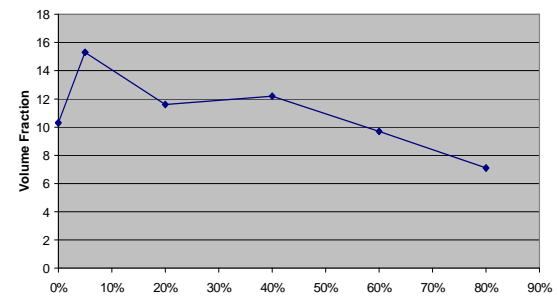
**{100}<001>**



**{112}<111>**



**110//ND**



**100//RD**

Rys. 20 Zmiany udziału składowych tekstury austenitu w funkcji zgniotu [42]

#### 4.5 Zastosowanie funkcji modelowych do korekcji funkcji rozkładu orientacji wyznaczonej metodą rozwinięcia w szereg

Jedną z możliwości zastosowania modelowego przedstawienie rozkładu orientacji stanowi korekcja wartości FRO wyznaczonej klasyczną metodą rozwinięcia w szereg. Jeśli  $f(g)$  zapiszemy w postaci rozwinięcia w szereg, wówczas na podstawie równania ( 3.1 ) łączącego wartości figury biegunowej z FRO otrzymamy tylko współczynniki  $C_l^{mn}$  z parzystym indeksem  $l$  ( $l = 2l'$ ) [48]. Rozwinięcie szeregowe FRO zawierające tylko składniki z parzystym  $l$  -  $\tilde{f}(g)$  zawiera tzw. „duchy” czyli lokalne maksima gęstości orientacji nie odpowiadające rzeczywistemu rozkładowi orientacji w badanym materiale. Prowadziło to do błędnych analiz tekstury. Jeśli jednak wykonamy przybliżenie  $\tilde{f}_{exp}(g)$  przez  $\tilde{f}_{mod}(g)$  to na podstawie wyznaczonych wartości parametrów modelu możemy określić wartości  $C_{l_{mod}}^{mn}$  z nieparzystym indeksem  $l$  ( $l = 2l' + 1$ ) i obliczyć funkcję  $\tilde{\tilde{f}}_{mod}(g)$ . Suma funkcji  $\tilde{f}_{exp}(g)$  oraz  $\tilde{\tilde{f}}_{mod}(g)$  nie zawiera „duchów” składowych tekstury uwzględnionych przez model rozkładu – z dokładnością z jaką model ten przybliży  $\tilde{f}_{exp}(g)$  - są one bowiem wyeliminowane przez  $\tilde{\tilde{f}}_{mod}(g)$ . Ten sposób korygowania FRO [13] był szczególnie atrakcyjny kiedy metody bezpośrednio wyznaczające wartości FRO ( Wektorowa [11,12], „Imhofa”[14,15], WIMV [16,17], ADC [18,19, 20] ) nie były jeszcze dostatecznie rozwinięte i wymagały stosunkowo długich obliczeń.

Przedstawiona metoda korekcji FRO umożliwia eliminację „duchów” głównych składowych tekstury, przez co pozwala na identyfikację składowych pobocznych ( o małym udziale objętościowym ). Na podstawie  $\tilde{f}_{exp}(g)$  błędnie - jako składowe poboczne - interpretowano „duchy” składowych głównych. Model FRO pozwala także oszacować błąd  $\Delta_{L_{max}}$  wynikający z obcięcia szeregu przy skończonej wartości  $l$ ,  $l = L_{max}$  - rutynowo dla materiałów o regularnej symetrii stosowane jest  $L_{max} = 22$  lub  $34$  - na podstawie wartości  $C_{l_{mod}}^{mn}$  wyznaczonych dla  $l = L_{max}$ .

$$\Delta_{L_{max}} = \frac{1}{2l+1} \sum_{l=L_{max}}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l [C_l^{mn}]^2 \quad (4.17)$$

Obecnie funkcjonuje kilka efektywnych algorytmów dla bezpośrednich metod wyznaczania wartości FRO jak również wykorzystujących skorygowany formalizm szeregowego rozwinięcia ( np. Dahms [21] ). Można zatem postawić pytanie: z jaką dokładnością i precyzją skorygowane w wyżej opisany sposób FRO odzwierciedlają rzeczywisty rozkład orientacji? Profile rozkładów przedstawione na rysunkach 21 oraz 22 oraz wartości parametrów składowych zamieszczone w

tabelach 2, 3 i 4 ilustrują porównanie z wynikami otrzymanymi metodą bezpośrednią ( ADC, Pawlik [19,20] ). Pozwala one sądzić, że dla silnie rozwiniętych tekstur z wyraźnie wykształtowanymi składowymi teksturami uzyskamy zadowalającą korektę wartości FRO.

Tabela 2 ( srebro, zgniot 90.9% [26,27,66] )

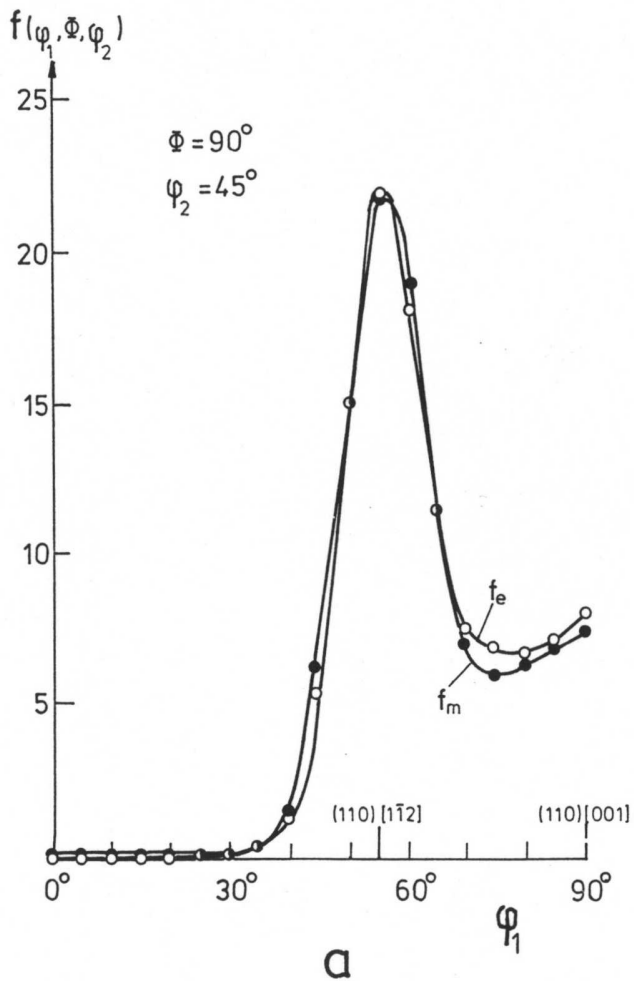
Składowa	Metoda bezpośrednia		Metoda szeregową	
	V [%]	$\varpi_0$ [°]	V[%]	$\varpi_0$ [°]
{110}<112>	30.0	10.3	27.6	10.6
(110)<001>	29.2	15.9	22.3	14.8
~{113}<364>	25.8	10.1	22.9	10.3
r	17.5	--.	27.2	--.

Tabela 3 ( srebro, zgniot 98.4% [26,27,66] )

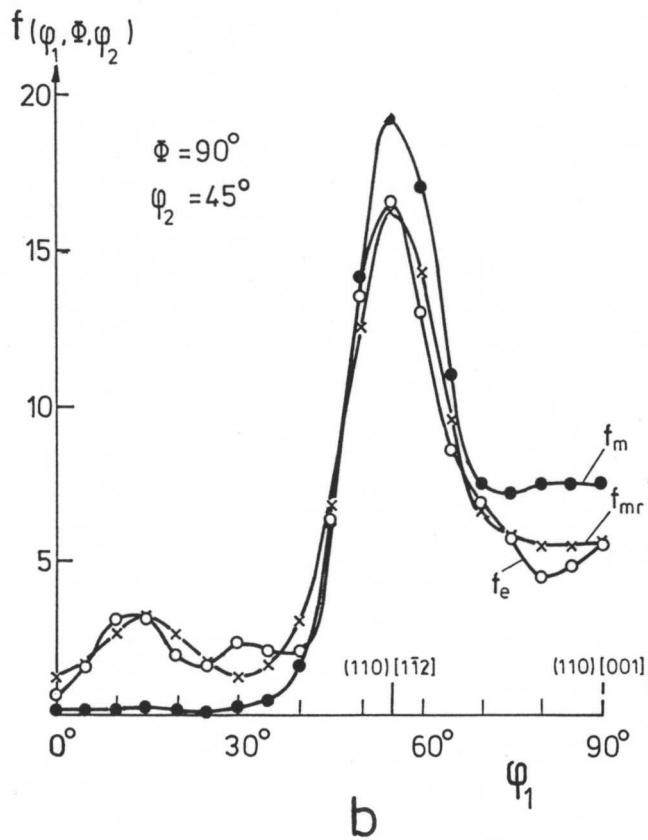
Składowa	Metoda bezpośrednia		Metoda szeregową	
	V [%]	$\varpi_0$ [°]	V[%]	$\varpi_0$ [°]
{110}<112>	50.4	7.4	47.2	8.4
(110)<001>	8.0	8.2	6.0	9.6
~{110}<115>	17.3	8.4	7.0	8.3
~{627}<496>	24.2	8.8	23.5	8.1
r	0.0	--.	16.4	--.

Tabela 4 ( stop miedzi z germanem, Cu8%Ge, zgniot 98.0% [67,68] )

Składowa	Metoda bezpośrednia		Metoda szeregową	
	V [%]	$\varpi_0$ [°]	V[%]	$\varpi_0$ [°]
{110}<112>	35.4	9.8	31.6	9.9
(110)<001>	5.3	10.2	7.2	10.7
~{110}<115>	14.1	11.8	9.5	9.6
~{627}<496>	19.5	9.3	25.0	9.6
r	26.0	--.	25.0	--.



Rys. 21 Rozkład orientacji (przekrój FRO) w otoczeniu składowej  $\{110\}\langle 112\rangle$ .  
 Stop miedzi z germanem (Cu8%Ge), zgniot 98% [67, 68]  
 -  $f_e$  rozkład wyznaczony metodą bezpośrednią z danych doświadczalnych  
 -  $f_m$  rozkład wyznaczony na podstawie wartości parametrów modelu z tabeli 4.



Rys. 22 Rozkład orientacji (przekrój FRO) w otoczeniu składowej  $\{1\ 1\ 0\} \langle 1\ 1\ 2 \rangle$ .  
 Stop miedzi z germanem (Cu8%Ge), zgniot 98% [67,68]

- $f_e$  rozkład wyznaczony metodą rozwinięć szeregowych ( $l_{\max} = 22$ ) z danych doświadczalnych, zawiera tylko człony rozwinięcia z parzystym indeksem  $l$
- $f_{mr}$  rozkład wyznaczony na podstawie wartości parametrów modelu z tabeli 4., zawiera tylko człony rozwinięcia z parzystym indeksem  $l$
- $f_m$  rozkład wyznaczony na podstawie wartości parametrów modelu z tabeli 4., zawiera człony rozwinięcia z parzystym i z nieparzystym indeksem  $l$ .

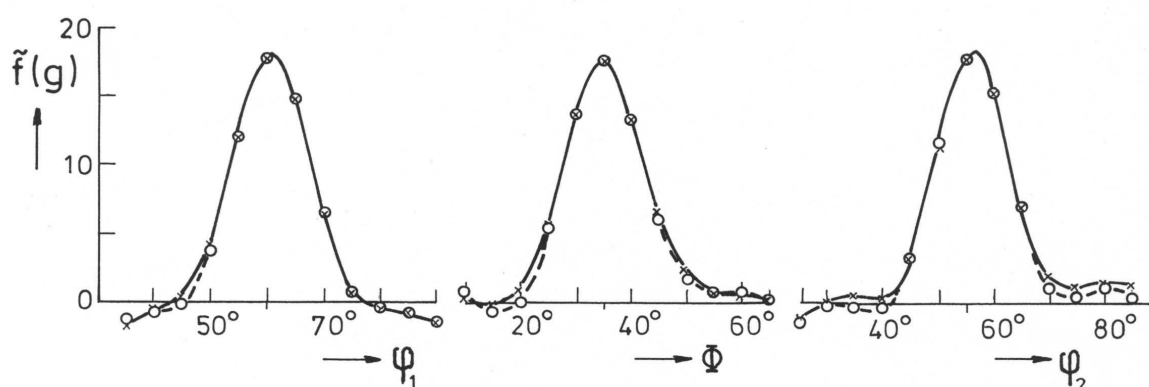
## 4.6 Wybór funkcji rozmycia

Rutynowo, przy konstruowaniu modeli FRO do opisu rozmycia wokół wyróżnionych orientacji stosowane są rozkłady typu Gaussa w postaci zaproponowanej przez H.J.Bungego [4,5] lub po modyfikacji zaproponowanej przez S.Matthiesa [30a ].

W pracy [69] S.Matthies zaproponował funkcję rozmycia typu rozkład Lorentza

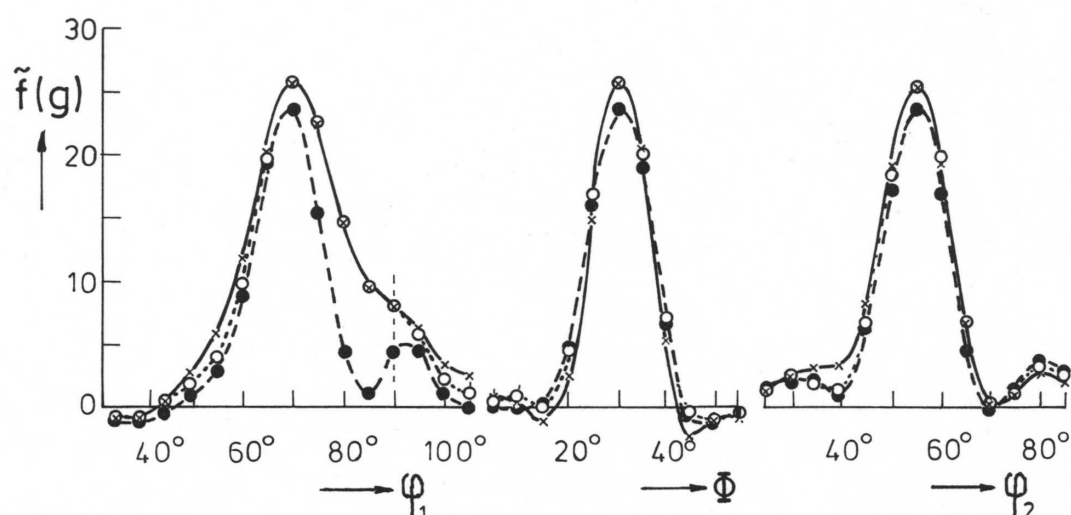
$$S_L(\varpi) = \frac{S_{0L}}{1 + \left(\frac{2\varpi}{b}\right)^2} \quad (4.17)$$

Analiza różnic w opisie i interpretacji składowych tekstury przy pomocy rozkładów typu Gaussa i typu Lorentza [55] prowadzi do konkluzji, że ze względu na swoją uniwersalność ( twierdzenie graniczne ) oraz intuicyjne rozumienie przynależności do składowej tekstury orientacji skupionych w najbliższym otoczeniu wyróżnionej orientacji  $g_0$  rozkład typu Gaussa lepiej opisuje rozmycie orientacji. Przykłady profili rozkładów wokół wyróżnionych orientacji zamieszczone na rysunkach 23 oraz 24 stanowią ilustrację poprawności stosowania rozkładów typu Gaussa.



Rys. 23 Gęstość orientacji wokół położenia  $\{235\}\langle 835 \rangle$  w próbce aluminium Al0.007%Fe walcowanej na zimno (zgniot 95%) i wyżarzanej w temperaturze 520°C [65]

- × — ×  $\tilde{f}_{\text{exp}}(g)$  wyznaczona z figur biegunowych
- o — o  $\tilde{f}_{\text{mod}}(g)$  modelowa złożona ze składowych  $\{235\}\langle 835 \rangle$ ,  $\{001\}\langle 100 \rangle$ ,  $\{025\}\langle 100 \rangle$ ,  $r \approx 10\%$  .



Rys. 24 Gęstość orientacji wokół położenia  $\{236\}\langle 322\rangle$  w próbce aluminium Al0.007%Fe walcowanej na zimno (zgniot 95%) [65]

- × -- ×  $\tilde{f}_{\text{exp}}(g)$  wyznaczona z figur biegunowych
- o -- o  $\tilde{f}_{\text{mod}}(g)$  modelowa złożona ze składowych  $\{236\}\langle 322\rangle$ ,  $\{112\}\langle 111\rangle$ ,  $\{110\}\langle 112\rangle$ ,  $r \approx 25\%$  [ , ]
- -- • składowa  $\{236\}\langle 322\rangle$ , niewielki pik przy  $\varphi_1 = 90^\circ$  należy do orientacji symetrycznie równoważnej w położeniu  $\{\varphi_1 = 110^\circ, \phi = 30^\circ, \varphi_2 = 35^\circ\}$ .

## 5. Analiza rozkładu różnic orientacji przy pomocy funkcji modelowych

Przedstawione w tym rozdziale rozważania oparte na modelowych przestawieniach rozkładów orientacji oraz różnic orientacji mają na celu zbadanie możliwości teoretycznej i praktycznej analizy ich ilościowych związków.

Charakterystyki orientacji w materiale polikrystalicznym określamy stosownie do - zależnego od mikrostruktury - problemu, który chcemy rozwiązać.

Spośród wielu różnego typu charakterystyk orientacji [43,44] szczególnie ważne są: funkcja rozkładu orientacji (FRO) oraz funkcja rozkładu różnic orientacji - ogólna (FRRO\_O) oraz różnic orientacji sąsiadujących ziaren (FRRO\_S).

Funkcja FRRO\_O -  $F(\Delta g)$  dostarcza informacji o rozkładzie wszystkich możliwych różnic orientacji i może być stosowana jako czynnik normalizujący inne charakterystyki na przykład dla FRRO\_S, aby uwzględnić wpływ tekstury.

Z definicji [4,5]  $F_i(\Delta g)$  równa się

$$F_i(\Delta g) = \oint f_i(\Delta g g) f_i(g) dg \quad (5.1)$$

Ze względu na prostą, jednoznaczną zależność określającą FRRO\_O i łączącą ją z FRO możliwa jest ilościowa analiza ODDF\_O na podstawie modelowego przedstawienia FRO.

Takie rozważania stanowią punkt wyjścia do ogólnej analizy cech rozkładów różnic orientacji. Zauważmy, że funkcja  $F(\Delta g)$  jest całkowicie określona przez  $f(g)$ .

Zachodzi także

$$F(\Delta g = e) = \oint f(g)^2 dg = J, \quad (5.2)$$

gdzie  $J$  oznacza tzw. indeks tekstury – będący miarą jej „ostrości”.

## 5.1 Zależność pomiędzy parametrami składowych rozkładu orientacji i rozkładu różnic orientacji

Założmy, że rozkład orientacji wokół położenia  $g_i$  jest określony przez funkcję  $f_i(g)$  (4.3). Zatem, na podstawie (5.1) określona jest także funkcja  $F_i(\Delta g)$ . Postawmy pytanie: jaka jest zależność pomiędzy parametrami składowych FRO, a parametrami składowych odpowiadającej jej FRRO\_O ?

Jeżeli obie funkcje przedstawimy w postaci rozwinięć w szereg uogólnionych funkcji kulistych  $T_l^{mn}(g)$  wówczas współczynniki rozwinięcia szeregowego FRO -  $C_l^{mn}$  z współczynnikami rozwinięcia FRRO\_O -  $C_l^{m_1 m_2}$  łączy zależność [70]

$$C_l^{m_1 m_2} = \frac{1}{2l+1} \sum_{n=-l}^l C_l^{m_1 n} C_l^{*m_2 n}. \quad (5.3)$$

Rozważmy modelową FRO złożoną z  $I$  składowych o parametrach  $\{g_i, V_i, \varpi_i; i = 1, I\}$ . Współczynniki rozwinięcia takiej funkcji są określone przez zależność

$$C_l^{mn} = \sum_{i=1}^I \Psi_l(\varpi_i) V_i T_l^{*mn}(g_i), \quad (5.4)$$

gdzie

$$\Psi_l(\varpi_i) = \frac{e^{-l\varpi_i^2/4} - e^{-(l+1)\varpi_i^2/4}}{1 - e^{-\varpi_i^2/4}}.$$

Funkcję  $\Psi_l(\varpi_i)$  można w przybliżeniu [71] przedstawić w postaci

$$\Psi_l(\varpi_i) \cong (2l+1) \exp[-l(l+1) \frac{\varpi_i^2}{4}] \quad (5.5)$$

wówczas

$$C_l^{mn} \cong (2l+1) \sum_{i=1}^l V_i \exp[-l(l+1) \frac{\varpi_i^2}{4}] T_l^{*mn}(g_i). \quad (5.6)$$

Uwzględniając relację ( 5.3 ) otrzymamy

$$C_l^{m_1 m_2} \cong (2l+1) \sum_{i,i'=1}^l c_{ii'} V_i V_{i'} \exp[-l(l+1) \frac{\varpi_i^2 + \varpi_{i'}^2}{4}] T_l^{*m_1 m_2}(\Delta g_{ii'}) \quad (5.7)$$

gdzie

$$\Delta g_{ii'} = g_i g_{i'}^{-1}, \quad c_{ii'} = 1 \text{ dla } i = i', \quad c_{ii'} = 2 \text{ dla } i \neq i'.$$

Jeżeli FRO zawiera składowe  $\{g_i, V_i, \varpi_i; i = 1, I\}$  to odpowiadająca jej FRRO\_O będzie zawierała składowe  $\{\Delta g_{ii'}, c_{ii'} V_i V_{i'}, \sqrt{\varpi_i^2 + \varpi_{i'}^2}; i, i' = 1, I\}$ .

## 5.2 Modelowe przedstawienie funkcji FRRO\_O

Jeżeli założymy, że FRO zawiera tylko jedną składową  $g_i$ , daną przez rozkład typu Gaussa z parametrem rozmycia  $\varpi_{iFRO}$  ( pomijamy możliwość występowania statystycznej symetrii w układzie próbki ), wówczas odpowiadająca jej FRRO\_O dana jest również przez rozkład typu Gaussa to jest pik o wysokości równej indeksowi tekstury FRO z parametrem rozmycia  $\varpi_{iFRRO\_O} = \sqrt{2} \varpi_{iFRO}$ .

Niezależnie od położenia  $g_i$  składowej FRO w przestrzeni orientacji maksimum odpowiadającej jej składowej FRRO\_O w przestrzeni różnic orientacji znajduje się w położeniu  $\Delta g_i = e = \{0,0,0\}$ .

Rozważmy przypadek gdy FRO zawiera K składników (składowych i ich komplementarnych ze względu na symetrię próbki odpowiedników)  $\{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\}$ . Przy czym każdy komplementarny odpowiednik składowej (generowany przez statystyczną symetrię próbki) jest traktowany jako niezależny składnik modelowego przedstawienia FRRO\_O.

Analiza wyprowadzonych powyżej zależności pozwala wówczas na sformułowanie następujących stwierdzeń odnośnie odpowiadającego modelowego przedstawienia FRRO\_O:

- K składników FRO generuje  $1 + \frac{1}{2}(K(K+1))$  składowych FRRO\_O
- w położeniu  $\Delta g = e = \{0,0,0\}$  występuje superpozycja pików generowanych przez każdy z k składników FRO z udziałem objętościowym  $V_k^2$  i rozmyciem  $\sqrt{2}\varpi_k$
- w położeniach  $\Delta g_{kk'} = g_k g_{k'}^{-1}$ ;  $(k, k' = 1, K; k \neq k')$  występują piki składowych FRRO\_O; uwzględniając równość  $\Delta g_{kk'} = \Delta g_{k'k}$  otrzymamy  $\frac{1}{2}K(K-1)$  składowych o udziałach  $2V_k V_{k'}$  i parametrach rozmycia  $\sqrt{\varpi_k^2 + \varpi_{k'}^2}$ .

Jeśli spełniony jest warunek normalizacji dla składowych FRO

$$\sum_{k=1}^K V_k = 1 \quad (5.8)$$

to zachodzi również

$$\sum_{k, k'=1}^K c_{kk'} V_k V_{k'} = 1, \quad c_{kk'} = 1 \text{ dla } k = k', \quad c_{kk'} = 2 \text{ dla } k \neq k'.$$

Dla pewnych dwóch par składników FRO:  $(g_k, g_{k'}), (g_l, g_{l'})$  może zachodzić  $\Delta g_{kk'} = \Delta g_{ll'}$ .

Jeśli taki przypadek nastąpi  $K_C$  razy to spowoduje to zmniejszenie liczby lokalnych maksimum i odpowiadających im pików składowych FRRO\_O o  $K_C$ . Występuje wtedy nakładanie się pików generowanych przez dwie różne pary składników FRO. Dla uproszczenia pominiemy w rozważaniach przypadek więcej niż dwu „koincydujących” par.

Hipotetycznie można także przyjąć istnienie  $K_S$  wyróżnionych różnic orientacji o wysokiej lokalnej gęstości prawdopodobieństwa wynikającej z sumowania się gęstości od pików FRRO\_O usytuowanych w różnych położeniach  $\Delta g_{kk'}$ .

Zatem ogólnie liczbę  $K_O$  maksimum lokalnych FRRO\_O generowanych przez K składników FRO można określić przy pomocy formuły

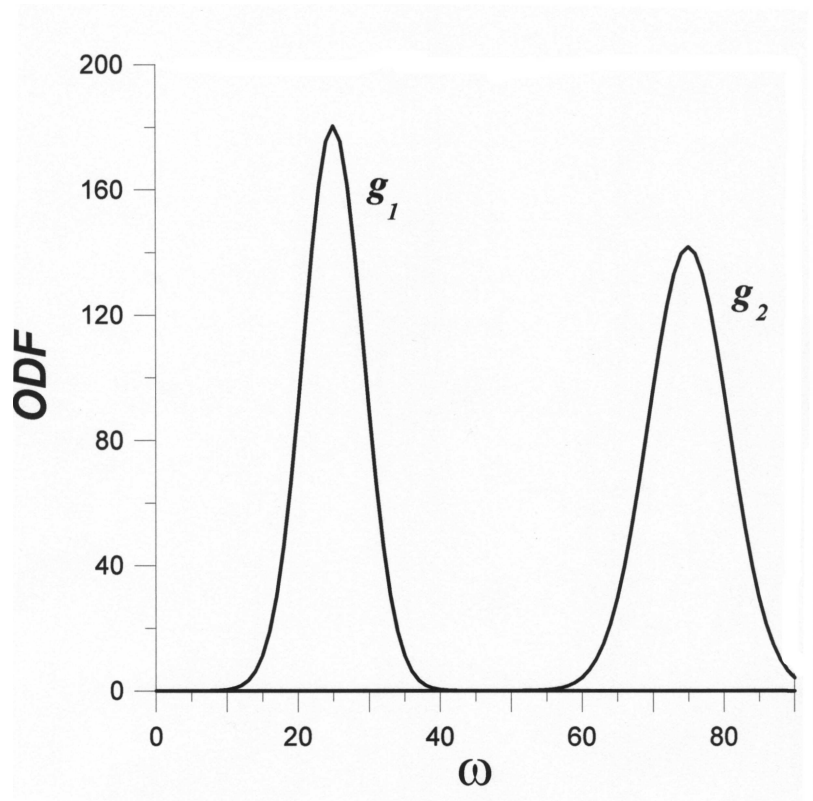
$$K_O = 1 + \frac{1}{2}(K(K+1)) - K_C + K_S. \quad (5.9)$$

Rozważmy teraz przypadek kiedy model FRO uwzględnia udział R krystalitów zorientowanych losowo. Wówczas udziały składowych FRRO\_O odpowiadającej modelowej FRO o parametrach  $\langle R, \{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\} \rangle$  spełniać będą równanie

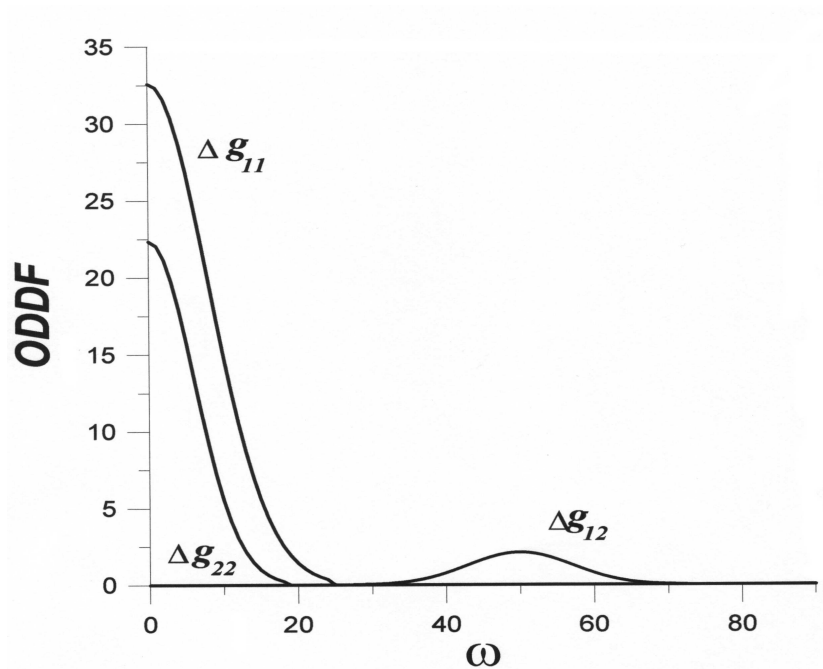
$$R(1 + 2\sum_{k=1}^K V_k) + \sum_{k, k'=1}^K c_{kk'} V_k V_{k'} = 1, \quad (5.10)$$

w którym pierwszy składnik określa udział „składowej losowej” w FRRO\_O.

Rysunek 25 przedstawia modelową FRO zawierającą dwa składniki, a rysunek 26 odpowiadający model FRRO\_O [71].



Rys. 25 Modelowy rozkład orientacji:  $g_1 = \{\varpi = 25^0, V = 35\%, \vartheta = 6^0\}$ ,  
 $g_2 = \{\varpi = 75^0, V = 65\%, \vartheta = 8^0\}$ .



Rys. 26 Modelowy rozkład różnic orientacji odpowiadający rozkładowi orientacji z rys. 25:

$$\Delta g_{11} = \{\omega = 0^0, V = 12.25\%, \bar{\omega} = 6^0 \sqrt{2}\}, \quad \Delta g_{22} = \{\omega = 0^0, V = 42.25\%, \bar{\omega} = 8^0 \sqrt{2}\}$$

$$\Delta g_{12} = \{\omega = 50^0, V = 45.5\%, \bar{\omega} = 10^0\}$$

### 5.3 Porównanie modeli rozkładu orientacji i rozkładu różnic orientacji

Przedstawiona analiza struktury FRRO\_O wynika z zależności określającej z definicji związek pomiędzy ogólnym rozkładem różnic orientacji i rozkładem orientacji danym przez FRO. Wynika z niej, że FRRO\_O ma bardziej złożoną postać aniżeli generująca ją FRO, ale jej strukturę można przewidzieć na podstawie analizy FRO. W przypadku wystąpienia koincydencji orientacji, tzn. równości  $\Delta g_{kk'} = \Delta g_{ll'}$  dla par  $(g_k, g_{k'}), (g_l, g_{l'})$  różne FRO mogą generować takie same FRRO\_O.

Piki odpowiadające składowym FRRO\_O mają większe rozmycia wokół lokalnych maksimum niż indukujące je składniki FRO; co wynika z zależności  $\varpi_k, \varpi_{k'} < \sqrt{\varpi_k^2 + \varpi_{k'}^2}$ , a ich objętościowe udziały są mniejsze  $V_k, V_{k'} > V_k V_{k'}$  dla  $V < 1$ .

Jak wynika z zależności ( 5.10 ) FRRO\_O ma także większy niż FRO udział składowej reprezentującej rozkład losowy  $r(1 + 2\sum_{k=1}^K V_k) > r$ .

Szczególnie ciekawy przypadek stanowi różnica orientacji równa  $\Delta g = e = \{0,0,0\}$ . W tym punkcie przestrzeni różnic orientacji nakładają się piki o rozmyciach  $\sqrt{2}\varpi_k$  i udziałach  $V_k^2$  generowane przez wszystkie składniki FRO o parametrach  $\varpi_k, V_k$ . Punkt ten nie jest interesujący podczas analizy rozkładu różnic orientacji; natomiast duża wysokość występującego w nim lokalnego maksimum utrudnia badanie FRRO\_O. Również niska krotność (wynikająca z symetrii w układzie krystalitu):  $S_A$  dla  $\Delta g = e$ , przy maksymalnie  $S_A S_A$  dla dowolnej różnicy orientacji; dodatkowo – ze względu na normalizację – ujemnie wpływa na pozostałe piki obniżając ich wysokości. Ponadto część pików FRRO\_O może znajdować się w obszarze rozmycia pików w  $\Delta g = e$  co też utrudni ich identyfikację. Jeśli FRRO\_O przedstawiamy w przestrzeni osi  $\mathbf{a}$  i kąta obrotu  $\omega$  to można przyjąć, że analiza w obszarze  $\omega < \sqrt{2}\varpi_k^{\max}$  jest bardzo trudna.

Aby uniknąć tej niedogodności, kiedy w praktyce określamy FRRO\_O lub FRRO\_S na podstawie zbioru różnic orientacji (np. wyznaczonych z pomiarów techniką elektronów wstecznie rozproszonych – EBSD) pomijamy  $\Delta g$ , dla których  $|\Delta g| < \omega_{\text{lim}}$ . Jak wynika z powyższych rozważań można przyjąć, że  $\omega_{\text{lim}} < \sqrt{2}\varpi_k^{\max}$ .

W praktyce analizy mikrotekstury bardziej interesująca jest funkcja FRRO\_S wyznaczona na podstawie zbioru różnic orientacji sąsiadujących ziaren, często przy uwzględnieniu dodatkowo przyjętych „reguł wyboru” odnośnie szczególnych właściwości mikrostrukturalnych; takich jak:

określone relacje orientacji pomiędzy najbliższymi sąsiadami, np. relacje z modelu sieci miejsc koincydentnych (CSL) w tym relacje bliźniacze, model sieci zero (0-Lattice) .

Dla takich charakterystyk orientacji FRRO\_O spełnia rolę czynnika korelującego gęstość prawdopodobieństwa wystąpienia różnicy orientacji przy spełnionych specjalnych warunkach z gęstością prawdopodobieństwa tej samej różnicy orientacji i przy tym samym rozkładzie orientacji (FRO) ale bez dodatkowych warunków. Mówimy wtedy o eliminacji wpływu tekstury na rozkład różnic orientacji [43,44].

Podobnie jak w przypadku FRO wyznaczanej na podstawie zbioru  $N_{FRO}$  pojedynczych orientacji nasuwa się pytanie o oszacowanie wartości  $N_{FRRO\_O}$  , czy też  $N_{FRRO\_S}$ .

Czy jeżeli określenie  $N_{FRO}$  orientacji jest wystarczające do wiarygodnego obliczenia rozkładu orientacji to równocześnie zbiór ten umożliwia wiarygodne odtworzenie rozkładu różnic orientacji zawierającego, jak to pokazano powyżej, więcej składowych i z większymi rozmyciami wokół wyróżnionych różnic orientacji?

Zbiór  $N_{FRO}$  orientacji generuje  $N_{FRRO\_O}$  różnic orientacji

$$N_{FRRO\_O} = \frac{1}{2} N_{FRO} (N_{FRO} - 1) \approx \frac{1}{2} N_{FRO}^2 . \quad (5.11)$$

Przy założeniu, że szerokości rozmycia pików FRO i FRRO\_O są dane przez równanie

$$\varpi_{FRRO\_O} = \sqrt{2} \varpi_{FRO} , \quad (5.12)$$

wówczas na podstawie rozważań z rozdziału 7 ( relacja 7.16 ) - przy zachowaniu takiego samego podziału przestrzeni orientacji i przestrzeni różnic orientacji przez siatkę punktów węzłowych – otrzymamy

$$N_{FRRO\_O} = (\sqrt{2})^3 N_{FRO} . \quad (5.13)$$

Przy pojedynczym pikie już dla  $N_{FRO} > 6$  zachodzi  $N_{FRO} > N_{FRRO\_O}$  .

W przypadku gdy FRO zawiera wiele składników, problem odtwarzalności pików FRRO\_O w położeniach  $\Delta g_{kk}$ , można formalnie rozpatrywać stosując kryterium zaproponowane w rozdziale 7. To jest (  $\min - \vartheta_k, \max - V_k$  ), zakładając  $\sqrt{2} \vartheta_{FRO}^{\max}$  jako maksymalne  $\vartheta_{FRRO\_O}$  i  $\min(V_k \times V_{k'})$  jako minimalne  $V_{FRRO\_O}$  .

Bliskie usytuowanie wielu pików FRRO\_O w przestrzeni różnic orientacji może być przyczyną nakładania się pików i utrudniać jej analizę. Poza tym jeżeli symetria sieci krystalicznej jest wyższa niż statystyczna symetria próbki - co ma często miejsce - wówczas obszar podstawowy przestrzeni różnic orientacji jest mniejszy niż obszar podstawowy w przestrzeni orientacji to czyni rozróżnianie pików FRRO\_O jeszcze trudniejszym zadaniem.

Istotne znaczenie ma również różnica krotności pików wynikająca z symetrii w przestrzeni różnic orientacji. Ogólnie jest ona równa lub mniejsza od  $S_A^2$  dla dowolnej  $\Delta g$ ; ale jeżeli  $\Delta g = e$  krotność równa się  $S_A$  co wraz z warunkiem normalizacji powoduje obniżenie wysokości pików poza  $\Delta g = e$ .

Ocenę możliwości analizy FRRO\_O uzyskamy na podstawie analizy FRO i wartości parametrów jej modelowego przedstawienia. Na podstawie składowych  $FRO < r, \{g_k, V_k, \omega_k; k = 1, K\} >$  możemy wyznaczyć wszystkie możliwe  $\Delta g_{kk'}$ , a następnie porównując  $|\Delta g_{kk'}| = \omega_{kk'}$  z  $\sqrt{2}\omega_{FRO}^{\max}$  ustalić czy znajdują się one w obszarze rozmycia pików w  $\Delta g = e$ .

## 6. Modelowe przedstawienie zaburzeń funkcji rozkładu orientacji wyznaczonej z figur biegunowych metodą rozwinięcia w szereg

Na podstawie figur biegunowych standardową metodą rozwinięć szeregowych [4,5] można wyznaczyć tylko współczynniki rozwinięcia dla parzystych wartości indeksu  $l : C_{2l}^m$ .

Funkcja  $f(g)$  skonstruowana tylko z parzystych członów szeregu  $\tilde{f}(g)$  zawiera zaburzenia, tzw. „duchy”, pod postacią lokalnych maksimów (i minimów) gęstości orientacji, które nie odpowiadają rzeczywistemu rozkładowi orientacji w badanym materiale, a zatem poważnie utrudniają analizę jego tekstury krystalograficznej. Taka FRO przybiera również, sprzeczne z jej definicją, ujemne wartości. Natomiast położenia pików głównych składowych tekstury pozostają niezmienione. Zupełnie nieokreślona pozostaje „część” FRO złożona z nieparzystych członów szeregu  $\tilde{f}(g)$ .

Pomiędzy funkcjami  $f(g), \tilde{f}(g), \tilde{\tilde{f}}(g)$  zachodzą następujące związki [48]

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g), \quad (6.1)$$

$$\tilde{f}(g) = \frac{1}{2}f(g) + f_G(g), \quad (6.2)$$

$$\tilde{\tilde{f}}(g) = \frac{1}{2}f(g) - f_G(g). \quad (6.3)$$

Funkcja  $f_G(g)$  odpowiada rozkładowi zaburzeń

$$f_G(g) = \frac{1}{2}[\tilde{f}(g) - \tilde{\tilde{f}}(g)]. \quad (6.4)$$

Równanie podstawowe ( 3.4 ) spełnia każda funkcja postaci

$$f(g) = \tilde{f}(g) + c\tilde{f}'(g), \quad (6.6)$$

$c$  – oznacza dowolną stałą.

Opracowano kilka [8-10,21] zmodyfikowanych algorytmów wyznaczania FRO z wykorzystaniem metody rozwinięć szeregowych oraz dodatkowych warunków wynikających z właściwości FRO, np.  $f(g) \geq 0$ . Dostarczają one skorygowanych, pozbawionych zaburzeń rozwiązań równania podstawowego.

Jednego ze sposobów oszacowania funkcji  $\tilde{f}(g)$  dostarcza również modelowe przedstawienie rozkładu orientacji [9].

Mimo istotnych trudności jakie stanowi brak prostego sposobu wyznaczenia FRO ze zmierzonych figur biegunowych metoda rozwinięć szeregowych pozostaje jednym z rutynowych formalizmów ilościowej analizy tekstur.

Funkcja  $f_G(g)$  określa rozkład zaburzeń  $f(g)$  powstały wskutek braku  $\tilde{f}(g)$ .

Z równania ( 6.4 ) wynika

$$f_G(g) = \frac{1}{2} \sum_{l,m,n} (-1)^l C_l^{mn} T_l^{mn}(g). \quad (6.7)$$

W celu analizy S.Matthies [16] zaproponował przedstawienie  $f_G(g)$  w postaci sumy

$$f_G(g) = f_\pi(g) + f_\Omega(g), \quad (6.8)$$

gdzie

$$f_\pi(g) = \frac{1}{2} \oint f(t_\pi g) dt$$

$$f_\Omega(g) = \frac{1}{2} \oint [f_G(t_\pi g) - f(tg)] \frac{1}{2 \cos^2(\frac{\omega}{2})} dt ;$$

przy czym  $t = (\omega, \langle v, \xi \rangle)$  oznacza obrót o kąt  $\omega$  wokół osi o współrzędnych sferycznych

$$\langle v, \xi \rangle ; \text{ podczas gdy } t_\pi = (\omega = \pi, \langle v, \xi \rangle), \quad dt = \frac{1}{4\pi^2} \sin(v)(1 - \cos(\omega)) d\omega dv d\xi .$$

Funkcja  $f_\pi(g)$  przyjmuje tylko dodatnie wartości, a jej współczynnik normalizacji równy jest  $\frac{1}{2}$ .

Funkcja  $f_\Omega(g)$  ma wartości ujemne i dodatnie oraz współczynnik normalizacji równy 0.

Obie funkcje można rozwinąć w szereg [48]

$$f_\pi(g) = \frac{1}{2} \sum_{l,m,n} \frac{(-1)^l}{2l+1} C_l^{mn} T_l^{mn}(g) \quad (6.9)$$

$$f_\Omega(g) = \frac{1}{2} \sum_{l,m,n} \frac{2l(-1)^l}{2l+1} C_l^{mn} T_l^{mn}(g) \quad (6.10)$$

Lokalne maksima funkcji  $f_\pi(g)$  i  $f_\Omega(g)$  zajmują te same położenia jak maksima  $f(g)$ . Wskazuje to, jak istotny dla poprawnej analizy tekstury jest problem wyznaczenia niezaburzonej FRO. Dokładną analizę obu funkcji przeprowadzono w pracy [ ], w której rozważano występowanie zaburzeń (nazywanych w literaturze „duchami”) w różnych punktach przestrzeni orientacji. W tym celu rozwinięto tzw. geometrię przecięć „płaszczyzn -  $\pi$ ”. Krotność przecinania się „płaszczyzn -  $\pi$ ” jest proporcjonalna do wysokości pików odpowiadających zaburzeniom FRO.

## 6.1 Analiza zaburzeń FRO przy pomocy modelowego rozkładu orientacji

Zaburzenia funkcji  $\tilde{f}(g)$  można ilościowo ująć rozważając modelowe przedstawienie FRO. Przyjmijmy, że rozkład orientacji wokół położenia  $g_0$  jest opisany przez rozkład typu Gaussa

$$S(\omega) = f_0 \exp\left(-\frac{\omega^2}{\varpi_0^2}\right), \quad (6.11)$$

gdzie  $f_0 = S(0) = f(g_0)$ .

Rozkład (6.11) można wstawić do całkowych relacji ( ) określających  $f_G(g)$  co prowadzi do skomplikowanych wyrażeń, albo zastosować rozwinięcie w szereg przyjmując skończony rząd rozwinięcia, np.  $l_{\max} = 34$ .

Analiza tak uzyskanego rozkładu wskazuje, że duże wartości  $f_G(g)$  występują tylko w pobliżu  $f_G(g)$  czyli „płaszczyzny -  $\pi$ ”.

Dla  $\omega = 0$  zachodzi

$$f_{G0}(\omega = 0) = -\frac{1}{4}. \quad (6.12)$$

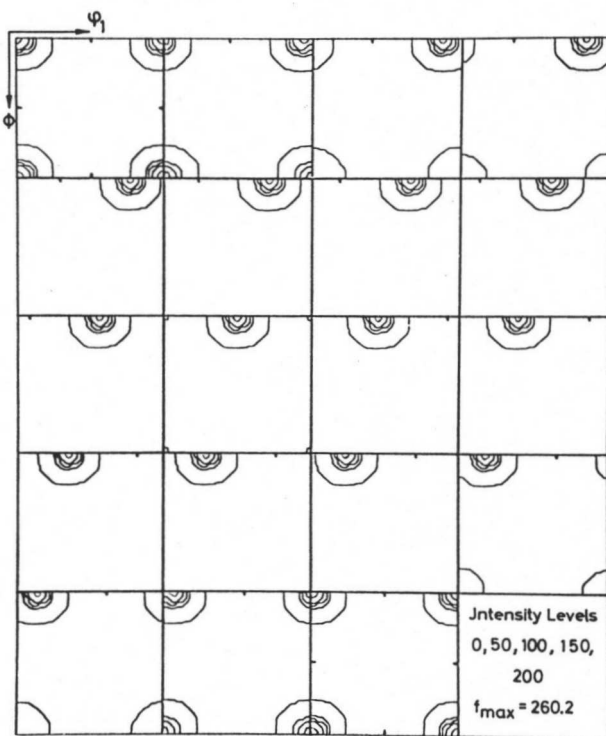
Natomiast dla  $\omega = \pi$  otrzymamy

$$f_{G\pi} = f_G(\omega = \pi) = \frac{1}{2[1 - \exp(-\frac{\omega_0^2}{4})]}. \quad (6.13)$$

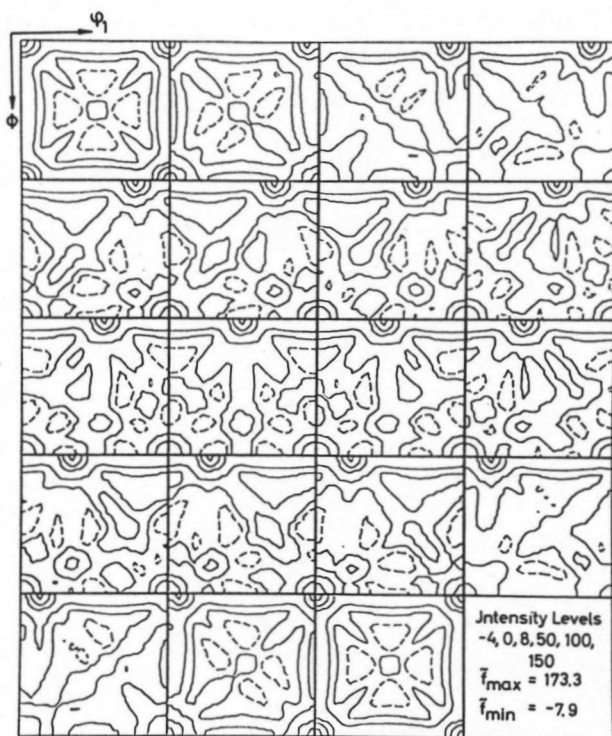
Z kolei dla  $\omega \ll \pi$  zachodzi

$$\frac{f_{G\pi}}{f_0} = \frac{\varpi_0}{4\sqrt{\pi}}. \quad (6.14)$$

Analiza powyższych zależności prowadzi do wniosku, że ze wzrostem  $\varpi_0$  wartość  $f_{G\pi}$  maleje, podczas gdy stosunek  $\frac{f_{G\pi}}{f_0}$  rośnie.



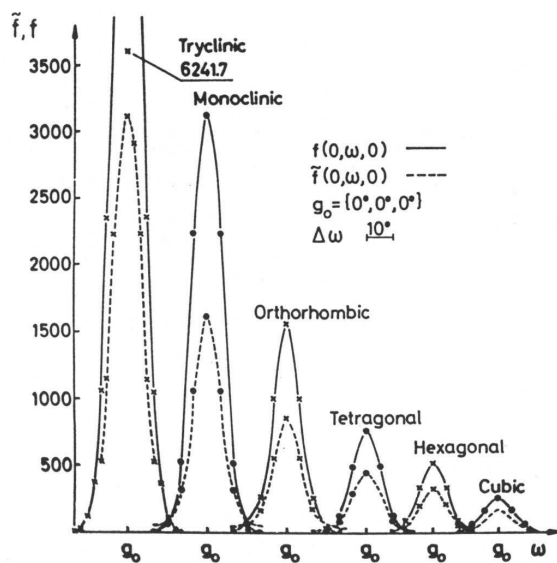
a



b

Rys 27 Modelowe FRO dla składowej  $\{001\}\langle 100\rangle$  (rozkład typu Gaussa [23]):

a)  $f(g)$ , b)  $\tilde{f}(g)$ .



Rys 28 Przekroje przez  $f(g)$  oraz  $\tilde{f}(g)$  dla różnych symetrii sieci krystalicznej ( $\varpi_0 = 7.5^\circ$ ), [23].

Symetria sieci krystalicznej oraz statystyczna symetria próbki indukują w przestrzeni orientacji położenia symetrycznie równoważne  $g_0^{ij}$ . Każdemu z nich odpowiada rozkład  $f_G^{ij}(g)$ . Rozkład  $f_G(g)$  jest wówczas bardzo skomplikowany.

Na rysunku 28 przedstawiono - dla różnych symetrii sieci krystalicznej oraz trójskośnej symetrii próbki - profile  $f, \tilde{f}$  w funkcji  $\omega$  w otoczeniu orientacji  $g_0$ . Jak widać różnica wskutek braku  $\tilde{f}$  jest tym większa im niższa jest symetria krystalograficzna.

## 7. Oszacowanie minimalnej liczby pojedynczych orientacji $N$ potrzebnych do określenia funkcji rozkładu orientacji

Funkcja rozkładu orientacji jest zazwyczaj wyznaczana na podstawie kilku figur biegunowych zmierzonych techniką dyfrakcji promieni rentgenowskich lub neutronów. Technika dyfrakcji elektronów rozproszonych wstecznie w skaningowym mikroskopie elektronowym (EBSD) pozwala obecnie uzyskiwać zbiory wielu tysięcy pojedynczych orientacji i razem z technikami ich analizy stanowi tzw. metodę mikroskopii orientacji. Możliwy jest również pomiar zbiorów orientacji przy wykorzystaniu mikroskopu transmisyjnego.

Ilość standardowo uzyskiwanych pojedynczych orientacji od dawna może przekraczać  $10^5$  umownie przyjmowaną jako liczba ziaren, które powinna w próbce badanego materiału prześwietlać wiązka promieni X lub neutronów, aby uzyskać wiarygodną statystycznie informację o rozkładzie orientacji ziaren.

Pomiar pojedynczych orientacji może być wykonany ze skokiem pomiarowym dobranym do cech morfologicznych materiału (wielkość i kształt ziarna) jak również z uwzględnieniem celu badań, np. czy interesuje nas lokalny lub globalny rozkład orientacji, czy też chcemy poznać zmiany orientacji w obszarach granic pomiędzy ziarnami lub wewnątrz samych ziaren.

W licznych pracach dotyczących problemu określania FRO na podstawie zbioru pojedynczych orientacji, np. [72-75] sugerowane były liczby od kilkuset do kilku tysięcy orientacji potrzebnych do wyznaczenia FRO porównywalnej z określoną na podstawie figur biegunowych dla tego samego obszaru próbki materiału. Oczywiście należy uwzględnić, że pomiar pojedynczych orientacji z reguły obejmuje obszar mniejszy niż przy pomiarze figur biegunowych i odnosi się do tekstury w warstwie powierzchniowej ze względu na mniejszą niż dla promieni X przenikalność elektronów.

Dużą rolę odgrywa zatem niejednorodność tekstury zarówno na powierzchni jak i na grubości próbki. Przyjmuje się; że techniką EBSD, a tym bardziej gdy korzystamy z mikroskopu transmisyjnego, uzyskujemy informację o teksturze lokalnej; podczas gdy pomiar figur biegunowych (zwłaszcza techniką dyfrakcji neutronów) wraz z formalizmami ilościowej analizy tekstur umożliwia określenie tekstury globalnej

Wydaje się też oczywiste, że liczba pomiarów powinna zależeć od typu tekstury – rosnąć wraz ze zmniejszaniem się stopnia „ostrości tekstury”- oraz od liczby i wartości parametrów jej składowych reprezentowanych przez obszary wysokiej gęstości orientacji wokół lokalnych maksimów FRO.

Dla analizy powyższych zagadnień interesujące mogą okazać się rozważania dotyczące oszacowania minimalnej liczby orientacji  $N_{\min}$  potrzebnych do określenia FRO. W tym celu wykorzystano modelowe przedstawienie rozkładu orientacji przy pomocy superpozycji rozkładów typu Gaussa wokół wyróżnionych orientacji, tzw. składowych tekstur.

Wartość  $N_{\min}$  można oszacować na podstawie zmian jakim ulegają parametry rozkładu orientacji wraz ze wzrostem liczby pomiarów. Parametry te mogą być lokalne, tzn. dotyczyć wybranych cech rozkładu takich jak pozycja i wartość lokalnych maksimów FRO, linia szkieletowa rozkładu, czy profile pików głównych składowych tekstury. Z kolei parametry globalne uwzględniają całość rozkładu, jak na przykład wyostrzenie tekstury (indeks tekstury) czy

średniokwadratowe odchylenia  $\rho_{N_2N_1}$  rozkładów wyznaczanych dla wzrastającej wartości  $N$  :  
 $N_2 > N_1$  [74].

$$\rho_{N_2N_1} = \oint [f_{\text{exp}}^{N_2}(g) - f_{\text{exp}}^{N_1}(g)]^2 dg . \quad (7.1)$$

Jeśli badana tekstura (FRO) została wyznaczona także na podstawie zmierzonych figur biegunowych , wówczas jest możliwe śledzenie zmian parametru  $\rho_{EN}$  , który charakteryzuje aproksymację  $f_{\text{exp}}(g)$  obliczonej na podstawie danych doświadczalnych przez  $f_{\text{exp}}^N(g)$  obliczoną na podstawie  $N$  zmierzonych orientacji

$$\rho_{EN} = \oint [f_{\text{exp}}(g) - f_{\text{exp}}^N(g)]^2 dg . \quad (7.2)$$

W przeprowadzonych testach [74,75] zbiory orientacji zostały wygenerowane dla typowych składowych tekstur w metalach o regularnej ściennie centrowanej sieci krystalicznej. Przyjęto rozkład typu Gaussa opisujący rozmycia wokół wyróżnionych położeń, a kryterium dla oszacowania  $N_{\min}$  było osiągnięcie przez  $\rho_{EN}$  i  $\rho_{N_2N_1}$  założonych wartości gradientu, np.1%. Porównywa no także bezwzględne wartości FRO. Stwierdzono, że  $N_{\min}$  zależy od szerokości rozmycia pików i objętościowego udziału składowej. Zaobserwowano także wpływ metody wyznaczania FRO. Przy stosowaniu rozwinięcia szeregowego, efekt wygładzania funkcji spotęgowany przerwaniem rozwinięcia w szereg powodował spełnienie założonego kryterium przy niższych wartościach  $N_{\min}$  aniżeli wówczas gdy wartości FRO były analizowane bezpośrednio w punktach węzłowych siatki podziału przestrzeni orientacji.

W przedstawionych poniżej rozważaniach rozpatrzemy zależność  $N_{\min}$  od parametrów składowych tekstury oraz od dokładności wyznaczania FRO rozumianej jako odległość pomiędzy węzłowymi punktami siatki podziału przestrzeni orientacji [76].

## 7.1 Oszacowanie $N$ na podstawie modelu FRO

Założmy modelowe przedstawienie FRO przy pomocy superpozycji rozkładów typu Gaussa odpowiadających głównym składowym tekstury  $\{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\}$ . Ze względu na warunek normalizacji FRO wysokość pików  $k$ -tej składowej  $H_k$  zależy od  $V_k, \varpi_k$

oraz od krotności  $Z_k$  składowej  $g_k$  w przestrzeni orientacji ( $Z_k$  zależy od  $g_k$  [55]).

Warunek normalizacji FRO zawierającej  $K$  składowych o udziałach  $V_k$  oraz udział  $R$  krystalitów o losowym rozkładzie ma postać

$$R + \sum_{k=1}^K V_k = 1. \quad (7.1)$$

Załóżmy, że w obszarze wokół orientacji  $g_k$  gęstość prawdopodobieństwa występowania orientacji  $g$  jest dana przez rozkład typu Gaussa

$$f_k^G = H_k \exp(-\omega^2 / \varpi_k^2), \quad (7.2)$$

gdzie

$$\varpi = |g g_k^{-1}|.$$

Wysokość piku  $H_k$  jest równa

$$H_k = 2\sqrt{\pi}V_k / \{Z_k \varpi_k [1 - \exp(-\varpi_k^2 / 4)]\}. \quad (7.3)$$

W dalszym ciągu rozważań krotność  $Z_k$  piku będziemy pomijać; zakładając, że  $f_k^G$  reprezentuje wszystkie położenia  $g_k^A$  symetrycznie równoważne ze względu na symetrię sieci krystalicznej –  $Z_k^A$ . Natomiast składniki generowane przez symetrię w układzie próbki –  $Z_k^B$  traktowane są jako niezależne rozkłady.

Średniokwadratowe odchylenie rozkładu (7.2) od  $V_k$  charakteryzuje stopień ostrości składowej  $g_k$

$$J_k = \oint [f_k^G(g) - V_k]^2 dg = V_k^2 \left\{ \frac{\sqrt{2\pi}}{\varpi_k [1 - \exp(-\varpi_k^2 / 4)] [1 + \exp(-\varpi_k^2)]} - 1 \right\}. \quad (7.4)$$

Rozważmy przypadek odtworzenia rozkładu orientacji (FRO) zawierającego jednej składnik  $V_k = 1$ , usytuowany w położeniu  $g_k$  - przy pomocy zbioru  $N_k$  orientacji. Przyjmijmy, że rozkład orientacji jest określony w przestrzeni orientacji o zmiennych  $\alpha, \beta, \gamma$  w siatce  $\Delta\alpha, \Delta\beta, \Delta\gamma = \Delta$  ( $\alpha, \beta, \gamma$  - oznaczają dowolnie wybrane parametry przestrzeni orientacji).

Dokładność wyznaczenia FRO jest określona przez wielkość komórki  $\Delta\alpha * \Delta\beta * \Delta\gamma = \Delta^3$ . Przestrzeń orientacji jest nieliniowa, a jej element niezmienniczy  $dg = J_{\alpha\beta\gamma} d\alpha d\beta d\gamma$  zależy od wyboru parametrów  $\alpha, \beta, \gamma$  co uwzględnimy wprowadzając uśrednioną wielkość komórki

w przestrzeni orientacji  $\bar{\Delta}g = \Delta^3 \bar{J}_{\alpha\beta\gamma}$  ( $\bar{J}_{\alpha\beta\gamma}$  oznacza średnią wartość  $J_{\alpha\beta\gamma}$ ).

Jeśli  $\alpha, \beta, \gamma$  odpowiadają parametrom osi i kąta obrotu  $\omega, \varphi, \psi$

$$\bar{\Delta}g = \frac{1}{2\pi^2} \Delta^3 \overline{SIN}^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \overline{SIN}(\varphi), \quad (7.5)$$

gdzie  $\overline{SIN}^2\left(\frac{\omega}{2}\right)$  oraz  $\overline{SIN}(\varphi)$  oznaczają średnie wartości  $\sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right)$  oraz  $\sin(\varphi)$

w przedziałach odpowiednio  $0 \leq \omega \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$ .

Otrzymamy wówczas

$$\bar{J}_{\omega\varphi\psi} = \frac{1}{2\pi^3}. \quad (7.6)$$

Natomiast w przypadku kątów Eulera  $\varphi_1, \phi, \varphi_2$  mamy

$$\bar{\Delta}g = \frac{1}{8\pi^2} \Delta^3 \overline{SIN}\left(\frac{\phi}{2}\right), \quad (7.7)$$

gdzie  $\overline{SIN}(\phi)$  oznacza średnią wartość  $\sin(\phi)$  w przedziale  $0 \leq \phi \leq \pi$ ,

Skąd średnia wartość  $J_{\varphi_1\phi\varphi_2}$  jest równa

$$\bar{J}_{\varphi_1\phi\varphi_2} = \frac{1}{4\pi^3}. \quad (7.8)$$

Założymy, że wszystkie krystality mają tę samą objętość wówczas liczba krystalitów  $n_i = n(g_i)$  jest proporcjonalna do ich objętościowego udziału  $\Delta V_i$ . Zgodnie z definicją FRO otrzymujemy

$$f_k(g_i) \approx \frac{\Delta V_i}{V_k \Delta g} = \frac{n_i}{N_k \Delta g}. \quad (7.9)$$

Jeżeli środek  $g_i$  komórki  $\bar{\Delta}g$  znajduje się w odległości  $\psi_x = |g_i g_k^{-1}|$  od położenia  $g_k$  odpowiadającego maksimum rozkładu orientacji  $f_k$  wówczas prawdopodobieństwo, że w komórce  $\bar{\Delta}g$  znajduje się  $n_i$  orientacji jest dane przez

$$\frac{n_i}{N_k} = \bar{\Delta}g f_k(\omega_x), \quad (7.10)$$

$$\begin{aligned} \omega = \arccos & \left[ \cos \frac{(\varphi_1^k - \varphi_1) + (\varphi_2^k - \varphi_2)}{2} \cos\left(\frac{\phi^k}{2}\right) \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + \right. \\ & \left. + \cos \frac{(\varphi_1^k - \varphi_1) - (\varphi_2^k - \varphi_2)}{2} \sin\left(\frac{\phi^k}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (7.11)$$

W przypadku gdy przynajmniej jedna orientacja  $n_i = 1$  znajduje się w komórce  $\bar{\Delta}g$ , wtedy

$$N_k = \frac{1}{\bar{\Delta}g f_k(\omega_x)}. \quad (7.12)$$

W ogólnym przypadku, kiedy składnik tekstury ma objętościowy udział  $V_k$

$$N_k^c = \frac{1}{V_k \bar{\Delta}g f_k(\omega_x)}. \quad (7.13)$$

Wskaźnik „c” oznacza, że  $N_k^c$  odnosi się do „całej” FRO, której  $k$ -ty składnik o udziale  $V_k$  chcemy odtworzyć. Ponieważ dla  $V_{k'} > V_k$  zachodzi  $N_{k'}^c > N_k^c$ , więc  $N_k^c$  jest wystarczająco duża, do odtworzenia składników  $g_{k'}$ , dla których  $V_{k'} \geq V_k$ .

Założmy, że  $f_k(\omega)$  jest dana przez rozkład typu Gaussa ( 7.2 ), wówczas mamy

$$N_k^c \geq \frac{\bar{\omega}_k [1 - \exp(-\bar{\omega}_k^2 / 4)]}{2\sqrt{\pi} V_k \Delta^3 \bar{J}_{\alpha\beta\gamma}} \exp(\omega_x^2 / \bar{\omega}_k^2). \quad (7.14)$$

Jeżeli uwzględnimy  $\bar{\Delta}g$  dla  $\alpha, \beta, \gamma$  odpowiadających kątom Eulera  $\varphi_1, \phi, \varphi_2$  to otrzymamy

$$N_k^c \geq \frac{2\pi^2 \sqrt{\pi} \bar{\omega}_k [1 - \exp(-\bar{\omega}_k^2 / 4)]}{V_k \Delta^3} \exp(\omega_x^2 / \bar{\omega}_k^2). \quad (7.15)$$

Po rozwinięciu  $\exp(-\bar{\omega}_k^2 / 4)$  w szereg i uwzględnieniu tylko pierwszych dwóch członów otrzymamy przybliżoną postać formuły (7.15)

$$N_k^c \geq \frac{1}{8\sqrt{\pi} \bar{J}_{\alpha\beta\gamma}} \frac{1}{V_k} \left(\frac{\bar{\omega}_k}{\Delta}\right)^3 \exp(\omega_x^2 / \bar{\omega}_k^2), \quad (7.16)$$

która ilustruje zależności pomiędzy parametrami  $\Delta, \bar{\omega}_k, \omega_x$  podczas oszacowania  $N_k^c$ .

Relacja (7.16) uwidacznia silną zależność wartości  $N_k^c$  od  $\bar{\omega}_k$  oraz odwrotną proporcjonalność  $N_k^c$  do  $V_k$ .

Oznaczając  $\bar{\omega}_k / \Delta = q_k, \omega_x / \bar{\omega}_k = Q_k$  otrzymamy

$$N_k^c \geq \frac{1}{8\sqrt{\pi} \bar{J}_{\alpha\beta\gamma}} \frac{1}{V_k} q_k^3 \exp(Q_k^2). \quad (7.17)$$

Współczynnik  $q_k$  określa stosunek szerokości połówkowej piku  $\bar{\omega}_k$  do odległości  $\Delta$  między węzłami siatki podziału przestrzeni orientacji ( tj. rozdzielczości, z którą chcemy odtworzyć rozkład orientacji). Dolna granica  $\bar{\omega}_k$  nie powinna być mniejsza niż  $\Delta$  ( $\bar{\omega}_k \geq \Delta$ ).

W praktyce ilościowej analizy tekstur wartość  $\Delta$  ( jako miara dokładności określenia FRO) rzadko jest mniejsze niż  $5^0$ , co uzasadnia założenie, że  $\varpi_k \geq 5^0$ . Z kolei maksymalna wartość  $\varpi_k$  nie przekracza  $20^0$ , zatem w przedziale  $5^0 \leq \psi_k \leq 20^0$  przy  $\Delta = 5^0$  wartość  $N_k^c$  wzrasta aż 64 –krotnie.

Współczynnik  $Q_k$  określa stosunek kątowej odległości  $\omega_x$  od maksimum piku o szerokości połówkowej  $\varpi_k$  do punktu, w którym chcemy „obserwować” przynajmniej jedną orientację. Z własności rozkładu Gaussa wynika, że w odległości  $\omega_x \leq 2\varpi_k$  orientację można znaleźć z prawdopodobieństwem  $\approx 95\%$ , czyli niemal wszystkie orientacje „należące” do składowej  $q_k$ . Jeżeli, więc w odległości  $\omega_x = 2\varpi_k$  rejestrujemy przynajmniej jedną orientację to możemy przyjąć, że  $N_k^c$  określone na podstawie (7.18) określa wiarygodne oszacowanie minimalnej liczby orientacji potrzebnych do odtworzenia rozkładu wokół orientacji  $g_k$ ;  $N_k^c = N_{\min}$

Tabela 5 zawiera wartości  $N^C$  dla różnych szerokości rozmycia  $\varpi$  przy założeniu  $V = 1(100\%)$  i  $\Delta = 5^0$  ( przyjęto parametry osi i kąta obrotu); uwzględniono przypadki:  $\varpi_x = 2\varpi \rightarrow N^C(2\varpi)$  oraz  $\varpi_x = \varpi \rightarrow N^C(\varpi)$ .

Zazwyczaj w teksturach badanych materiałów można wyróżnić kilka składowych o różnych wartościach szerokości rozmycia i objętościowego udziału  $\{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\}$ , wówczas przedstawiony sposób postępowania można zastosować do każdej z nich, aby określić odpowiednie  $N_k^c$ . Jednakże, wartości  $\{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\}$  nie są *a priori* znane, w powyższych rozważaniach składnik  $g_k$  był traktowany jako przykładowa składowa, dla której określono  $N_k^c$ . W przypadku kiedy występuje więcej niż jedna składowa, powstaje pytanie, która z wartości  $N_k^c$  stanowi właściwe oszacowanie dla liczby  $N^C$  orientacji potrzebnych do odtworzenia całego rozkładu?

Tabela 5.  $N^C$  w funkcji szerokości rozmycia  $\varpi$ ;  $V = 1(100\%)$ ,  $\Delta = 5^0$  ( parametry osi i kąta obrotu ) dla:  $\varpi_x = 2\varpi \rightarrow N^C(2\varpi)$   $\varpi_x = \varpi \rightarrow N^C(\varpi)$ , [76].

$\varpi$	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$N_{\min}(2\varpi)$	239	412	654	976	1388	1903	2531	3283	4170	5203
$N_{\min}(\varpi)$	12	21	33	49	69	95	126	163	208	259

Jeżeli ilościowe charakterystyki składowych tekstury nie są znane- co w praktyce ma często miejsce - wówczas jako racjonalne kryterium dla  $N^C$  można przyjąć założenia:

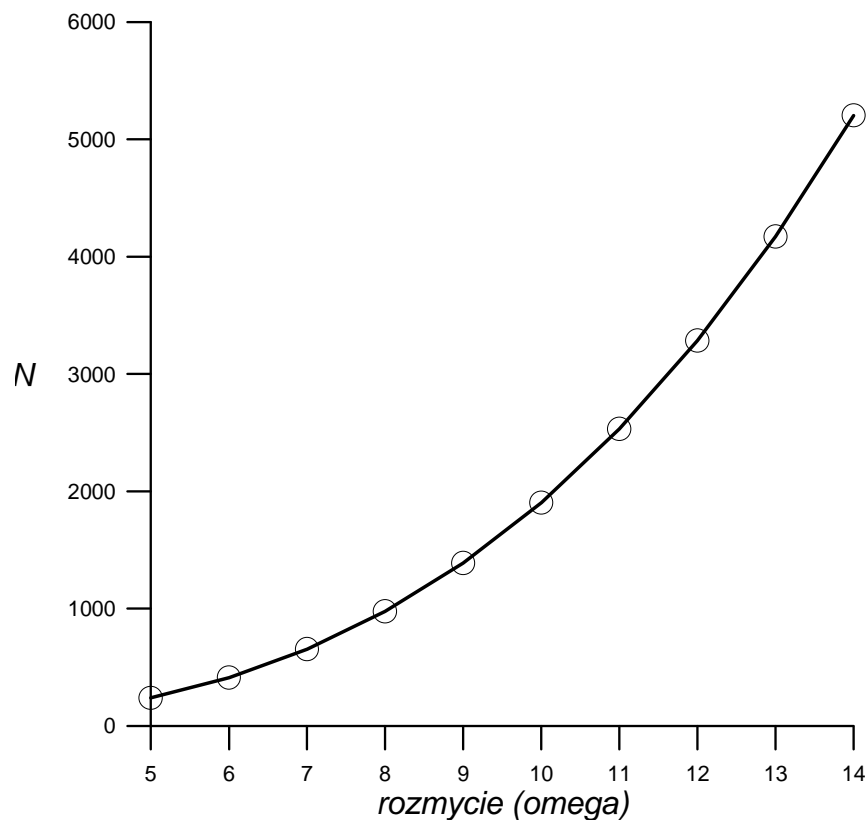
- minimalne  $V_k$ , dla którego chcemy określić składowe badanej tekstury
- maksymalne  $\varpi_k$  przypisane składowym w analizowanej teksturze,

na przykład:  $V_k = 10\%$ ,  $\varpi_k = 15^\circ$ .

Określone w ten sposób  $N_{\min-\max}^C$  stanowi oszacowanie liczby orientacji, które umożliwiają

odtworzenie rozkładu zawierającego  $K \leq \text{int}\left(\frac{1}{V_{\min}}\right)$  składników w położeniach  $g_k$  o para-

metrach  $V_k \geq V_{\min}$ ,  $\varpi_k \leq \varpi_{\max}$ .



Rys. 29 Zależność  $N_{\min}(2\varpi)$  ( według tabeli 5 ) w funkcji kąta rozmycia  $\varpi$ .

## 7.2 Odtwarzanie losowej składowej rozkładu orientacji

Oprócz składowych tekstury przypisanych do wyróżnionych orientacji rozważana jest również składowa odpowiadająca losowemu rozkładowi orientacji. Można wówczas przyjąć założenie, że w każdej z komórek, na które dzielimy przestrzeń orientacji powinna zostać

zaobserwowana przynajmniej jedna orientacja, zatem liczba zmierzonych orientacji  $N_r$  musi spełniać zależność

$$N_R \geq \frac{G_B}{\Delta g}, \quad (7.18)$$

gdzie  $G_B$  oznacza obszar podstawowy w przestrzeni orientacji, którego wielkość zależy od symetrii sieci krystalicznej badanego materiału.

Podobnie jak postąpiliśmy w przypadku składnika o udziale  $V_k$  przypisanego do orientacji  $g_k$  całkowita liczba orientacji potrzebna do odtworzenia rozkładu o „składowej losowej” z udziałem  $R$  powinna wynosić

$$N_R^C \geq \frac{G_B}{R\Delta g}. \quad (7.19)$$

Ogólnie w badanych rozkładach występują zarówno składniki  $\{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\}$  jak i składowa losowa  $\{R\}$ . Ponieważ wartość  $N_r^C$  jest odwrotnie proporcjonalna do  $R$  zatem im mniejszy jest udział chaotycznie zorientowanych krystalitów tym więcej orientacji powinniśmy zmierzyć, aby odtworzyć „kompletny” rozkład. Można umownie przyjąć, że z praktycznych względów odtwarzanie składowej losowej z  $R < 10\%$  nie wnosi istotnej informacji o rozkładzie, jest zatem zbędne. Jeśli jednak spodziewamy się; że obok składowej losowej o znacznym udziale – na przykład  $V_r \geq 50\%$  - występuje również zbiór składników  $\{g_k, V_k, \varpi_k; k = 1, K\}$ , wówczas należy porównać wartości  $N_{\min-\max}^C$  oraz  $N_r^C - N_r$ .

Jeżeli nie zachodzi  $N_r^C - N_r \geq N_{\min-\max}^C$  to powinniśmy przyjąć jako oszacowanie liczby  $N^{CR}$  - orientacji potrzebnych do odtworzenia „kompletnego” rozkładu:  $N^{CR} = N_R + N_{\min-\max}^C$ .

Obliczone na podstawie powyższych rozważań wartości  $N_{\min-\max}^C$  oraz  $N^{CR}$  są duże - rzędu  $10^5 \div 10^6$ . Dla  $V_k = 10\%$ ,  $\varpi_k = 15^\circ$ ,  $\Delta = 5^\circ$  oraz parametrów osi i kąta obrotu  $\omega, \varphi, \psi$  otrzymamy  $N_{\min-\max}^C = 63920$ .

Należy jednak uwzględnić, że przedstawiona analiza odnosi się bezpośrednio do częstości orientacji - zależnie od średniej wielkości komórki w przestrzeni orientacji oraz od względnej liczby orientacji w tej komórce. Zgrubne oszacowanie rozkładu można często uzyskać już na podstawie zbioru kilkuset zmierzonych orientacji.

### 7.3 Wpływ metody określenia FRO na wartość N

Wyznaczając wartości FRO na podstawie zbioru pojedynczych orientacji stosujemy albo jedną z „metod bezpośrednich” odwołujących się do częstości orientacji w arbitralnie przyjętej komórce przestrzeni orientacji.

$$f(g_i) \cong \frac{n_i}{N^C \Delta g}, \quad (7.20)$$

albo metodę rozwinięcia w szereg, dla której w przypadku zbioru  $\{n_i, g_i; i = 1, I\}$  orientacji mamy

$$f(g) = \sum_{l\mu\nu}^{l_{\max}} C_l^{mn} T_l^{mn}(g), \quad (7.21)$$

gdzie

$$C_l^{mn} = (2l+1) \sum_i^I \frac{n_i}{N^C} T_l^{*mn}(g_i).$$

Liczba współczynników  $C_l^{mn}$  nie powinna być większa od liczby zmierzonych orientacji  $N^C$ , aby możliwa była aproksymacja danych doświadczalnych. Rozwinięcie w szereg musi być zatem przerwane przy odpowiednim  $l = l_{\max}$ . Powoduje to tak zwany błąd obcięcia szeregu i powstanie wokół każdej orientacji  $g_i$  quasi-piku o szerokości  $\varpi_l$  zależnej od  $l_{\max}$ . Dla  $l_{\max} \rightarrow \infty$  zachodzi  $\varpi_l \rightarrow 0^0$  to znaczy quasi-pik przechodzi w funkcję delta  $\delta(gg_i^{-1})$ .

Przy regularnej symetrii sieci krystalicznej  $l_{\max}$  w praktyce jest równe 22 lub 34, otrzymujemy wówczas wartości  $\varpi_l \approx 6.5^0$  oraz  $\varpi_l \approx 4.5^0$  odpowiednio. W przybliżeniu oznacza to, że orientacje oddalone o  $\Delta_l \leq \sqrt{2}\varpi_l$  są nierozróżnialne. Dla wyżej wymienionych wartości  $\varpi_l$  otrzymamy odpowiednio  $\Delta_l \approx 9.2^0$  oraz  $\Delta_l \approx 6.4^0$ . Nakładanie się quasi-pików skutkuje zmniejszoną rozdzielczością wyznaczenia FRO i może być traktowane jako pozorne powiększenie rozmiaru komórki z podziału przestrzeni orientacji, na przykład wartość  $\Delta_l = 10^0$  odpowiada podwojeniu długości krawędzi komórki w porównaniu z jej standardową wielkością  $\Delta_l = 5^0$ . W konsekwencji można oczekiwać, że „efektywna” liczba orientacji potrzebnych do odtworzenia rozkładu zmniejszy się ośmiokrotnie  $\Delta_l^3 = 2^3 \Delta$ .

Nakładanie się quasi-pików powoduje, że powyżej kilku tysięcy orientacji praktycznie nie obserwuje się zmian w wyznaczonej metodą rozwinięć szeregowych FRO. Takie wygładzenie rozkładu odbywa się jednak kosztem zmniejszenia rozdzielczości wyznaczonej FRO.

Nakładanie się quasi-pików w położeniach  $g_i$  i o szerokościach  $\varpi_i$  powoduje również zniekształcenie profilu wypadkowego pików w położeniu  $g_k$ . Aby ograniczyć ten efekt można przyporządkować każdej pojedynczej orientacji rozkład typu Gaussa o szerokości  $\varpi_{0r} = \Delta$ . Dla  $\varpi_{0r} = \Delta = 5^\circ$  przy  $l_{\max} = 22$  oraz  $l_{\max} = 34$  otrzymamy  $\psi_{0r}^{l_{\max}} \approx 6^0$ . Można zatem wybrać pomiędzy pomiarem wielu tysięcy orientacji w celu osiągnięcia „zadowalającej statystyki”, a pomiarem około dziesięciokrotnie mniejszej liczby orientacji i aproksymacją FRO przez rozwinięcie w szereg lub przypisaniem rozkładu typu Gaussa do każdej zmierzonej orientacji.

Przedstawiona w tym rozdziale analiza wskazuje, że zakres oszacowań wartości  $N^C$  jest szeroki. Wartość  $N^C$  zależy od parametrów składowych tekstury, przestrzennej rozdzielczości odtwarzania FRO oraz od metody wyznaczania jej wartości. Główny cel rozważań stanowiło zaproponowanie i dyskusja „kryterium a priori” oszacowania  $N^C$ , a nie podanie ściśle wyznaczonych wartości.

## 8. Modelowe przedstawienie rozkładu orientacji i różnic orientacji w materiale dwufazowym

Funkcję rozkładu orientacji  $f_{\alpha\beta}(g)$  w materiale dwufazowym zawierającym fazy  $\alpha$  i  $\beta$  można przedstawić w postaci sumy rozkładów orientacji w każdej z faz

$$f_{\alpha\beta}(g) = f^\alpha(g) + f^\beta(g), \quad (8.1)$$

przy czym spełnione są warunki normalizacji:

$$\oint f_{\alpha\beta}(g) = 1, \quad \oint f^\alpha(g) = V^\alpha, \quad \oint f^\beta(g) = V^\beta, \quad V^\alpha + V^\beta = 1, \quad (8.2)$$

gdzie  $V^\alpha$ ,  $V^\beta$  oznaczają objętościowe udziały odpowiednio faz  $\alpha$  i  $\beta$ .

Analogicznie jak w materiale jednofazowym funkcja rozkładu różnic orientacji FRRO\_O  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$  dostarcza informacji o rozkładzie wszystkich możliwych różnic orientacji pomiędzy krystalitami w każdej z faz:  $F^{\alpha\alpha}(\Delta g)$  i  $F^{\beta\beta}(\Delta g)$  oraz pomiędzy krystalitami obu faz  $F^{\alpha\beta}(\Delta g)$ ,  $F^{\beta\alpha}(\Delta g)$ .

Na podstawie ogólnej matematycznej zależności ( 5.1 ) pomiędzy FRO oraz FRRO\_O funkcja  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$  odpowiadająca funkcjom  $f^\alpha(g)$ ,  $f^\beta(g)$  jest dana przez zależności

$$F_{\alpha\beta}(\Delta g) = \oint [f^\alpha(g) + f^\beta(g)][f^\alpha(\Delta gg) + f^\beta(\Delta gg)]dg, \quad (8.3a)$$

$$F_{\alpha\beta}(\Delta g) = F^{\alpha\alpha}(\Delta g) + F^{\beta\beta}(\Delta g) + F^{\alpha\beta}(\Delta g) + F^{\beta\alpha}(\Delta g), \quad (8.3b)$$

gdzie:

$$F^{\alpha\alpha}(\Delta g) = \oint f^\alpha(g)f^\alpha(\Delta gg)dg,$$

$$F^{\beta\beta}(\Delta g) = \oint f^\beta(g)f^\beta(\Delta gg)dg,$$

$$F^{\alpha\beta}(\Delta g) = \oint f^\alpha(g)f^\beta(\Delta gg)dg,$$

$$F^{\beta\alpha}(\Delta g) = \oint f^\beta(g)f^\alpha(\Delta gg)dg.$$

Związek pomiędzy funkcjami FRO oraz FRRO\_O można wyrazić rozpatrując ich rozwinięcia w szeregi uogólnionych funkcji kulistych  $T_l^{mn}(g)$ .

Ogólnie współczynniki  $C_l^{m_1m_2}$  ( FRRO ) oraz  $C_l^{mn}$  ( FRO ) łączą zależność (5.3), zatem współczynniki rozwinięcia szeregowego funkcji FRRO\_O dla funkcji  $F^{\alpha\alpha}$ ,  $F^{\beta\beta}$ ,  $F^{\alpha\beta}$  i  $F^{\beta\alpha}$  można przedstawić jak następuje:

$$C_l^{m_1m_2}(\alpha\alpha) = \frac{1}{2l+1} \sum_{n=-l}^l C_l^{m_1n}(\alpha)C_l^{*m_2n}(\alpha) \quad (8.4)$$

$$C_l^{m_1m_2}(\beta\beta) = \frac{1}{2l+1} \sum_{n=-l}^l C_l^{m_1n}(\beta)C_l^{*m_2n}(\beta) \quad (8.5)$$

$$C_l^{m_1m_2}(\beta\alpha) = \frac{1}{2l+1} \sum_{n=-l}^l C_l^{m_1n}(\beta)C_l^{*m_2n}(\alpha) \quad (8.6)$$

$$C_l^{m_1m_2}(\alpha\beta) = \frac{1}{2l+1} \sum_{n=-l}^l C_l^{m_1n}(\alpha)C_l^{*m_2n}(\beta) \quad (8.7)$$

Do analizy  $f_{\alpha\beta}(g)$  oraz  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$  można - podobnie jak w przypadku materiału jednofazowego - zastosować funkcje modelowe opisujące główne składowe tekstury przy pomocy

parametrów, którymi są udziały objętościowe ( $V_i^\alpha, V_j^\beta$ ) i szerokości rozmycia ( $\varpi_i^\alpha, \varpi_j^\beta$ ) wokół wyróżnionych orientacji ( $g_i^\alpha, g_j^\beta$ ).

Określimy związek pomiędzy parametrami obu funkcji w przypadku materiałów dwufazowych [77].

Jeśli rozkład orientacji w otoczeniu orientacji  $g_i^\alpha$  oraz  $g_j^\beta$  przedstawimy przy pomocy rozkładu typu Gaussa (4.3), wówczas funkcje  $f^\alpha(g)$ ,  $f^\beta(g)$  wyrażone są jako superpozycje rozkładów określonych parametrami  $\{g_i^\alpha, V_i^\alpha, \varpi_i^\alpha; i=1, I\}$  dla fazy  $\alpha$  oraz  $\{g_j^\beta, V_j^\beta, \varpi_j^\beta; j=1, J\}$  dla fazy  $\beta$ , gdzie  $V_i^\alpha + V_j^\beta = 1$ :

$$f^\alpha(g) = \sum_{i=1}^I f_i^\alpha(g), \quad \sum_{i=1}^I V_i^\alpha = V^\alpha \quad (8.8)$$

$$f^\beta(g) = \sum_{j=1}^J f_j^\beta(g), \quad \sum_{j=1}^J V_j^\beta = V^\beta \quad (8.9)$$

Współczynniki rozwinięcia szeregowego funkcji FRO opisanej równaniem (4.3) można w przybliżeniu przedstawić przy pomocy relacji (5.6)

$$C_l^{mn} \cong (2l+1) \sum_{i=1}^I \exp\left[-l(l+1) \frac{\varpi_i^2}{4}\right] V_i T_l^{*mn}(g_i). \quad (8.10)$$

Wykorzystując równania (8.4-8.7) oraz (5.7) otrzymamy współczynniki rozwinięć szeregowych funkcji  $F^{\alpha\alpha}$ ,  $F^{\beta\beta}$ ,  $F^{\alpha\beta}$  and  $F^{\beta\alpha}$ :

$$C_l^{m_1 m_2}(\alpha\alpha) = (2l+1) \sum_{i,i'}^I V_i^\alpha V_{i'}^\alpha \exp\left[-l(l+1) \frac{(\varpi_i^\alpha)^2 + (\varpi_{i'}^\alpha)^2}{4}\right] T^{*m_2 m_1}(\Delta g_{ii'}^\alpha) \quad (8.11)$$

$$C_l^{m_1 m_2}(\beta\beta) = (2l+1) \sum_{j,j'}^J V_j^\beta V_{j'}^\beta \exp\left[-l(l+1) \frac{(\varpi_j^\beta)^2 + (\varpi_{j'}^\beta)^2}{4}\right] T^{*m_2 m_1}(\Delta g_{jj'}^\beta) \quad (8.12)$$

$$C_l^{m_1 m_2}(\beta\alpha) = (2l+1) \sum_{i,j}^{I,J} V_i^\alpha V_j^\beta \exp\left[-l(l+1) \frac{(\varpi_i^\alpha)^2 + (\varpi_j^\beta)^2}{4}\right] T^{*m_2 m_1}(\Delta g_{ij}^{\alpha\beta}) \quad (8.13)$$

$$C_l^{m_1 m_2}(\alpha\beta) = (2l+1) \sum_{j,i}^{J,I} V_j^\beta V_i^\alpha \exp\left[-l(l+1) \frac{(\varpi_j^\beta)^2 + (\varpi_i^\alpha)^2}{4}\right] T^{*m_2 m_1}(\Delta g_{ji}^{\beta\alpha}) \quad (8.14)$$

gdzie

$$\Delta g_{ii'}^\alpha = g_i^\alpha (g_{i'}^\alpha)^{-1}, \Delta g_{jj'}^\beta = g_j^\beta (g_{j'}^\beta)^{-1}, \Delta g_{ji}^{\beta\alpha} = g_j^\beta (g_i^\alpha)^{-1}, \Delta g_{ij}^{\alpha\beta} = g_i^\alpha (g_j^\beta)^{-1}.$$

Gdy FRO  $f_{\alpha\beta}(g)$  zawiera składniki:

$$f^\alpha(g), \{g_i^\alpha, V_i^\alpha, \varpi_i^\alpha; i=1, I\} \text{ oraz } f^\beta(g), \{g_j^\beta, V_j^\beta, \varpi_j^\beta; j=1, J\}, \quad (8.15)$$

wtedy składniki FRRO\_O  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$  wyrażone są przez zależności:

$$\begin{aligned} & \{\Delta g_{ii'}^{\alpha\alpha}, V_i^\alpha V_{i'}^\alpha, \sqrt{(\varpi_i^\alpha)^2 + (\varpi_{i'}^\alpha)^2}; \Delta g_{jj'}^{\beta\beta}, V_j^\beta V_{j'}^\beta, \sqrt{(\varpi_j^\beta)^2 + (\varpi_{j'}^\beta)^2}; i, i' = 1, I, j, j' = 1, J\} \\ & \{\Delta g_{ij}^{\alpha\beta}, V_i^\alpha V_j^\beta, \sqrt{(\varpi_i^\alpha)^2 + (\varpi_j^\beta)^2}; \Delta g_{ji}^{\beta\alpha}, V_j^\beta V_i^\alpha, \sqrt{(\varpi_j^\beta)^2 + (\varpi_i^\alpha)^2}; i = 1, I, j = 1, J\}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Przedstawiona analiza pokazuje, że struktura funkcji FRRO\_O dla materiału dwufazowego jest bardziej złożona niż FRRO\_O w materiale jednofazowym. Rozważać należy każdy z jej składników.

Składowe  $f_{\alpha\beta}(g) - \{g_i, V_i, \varpi_i; i=1, I\}$  i  $\{g_j, V_j, \Phi_j; j=1, J\}$  generują  $1 + (I+J)(I+J-1)$  składowych  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$ . W położeniu  $\Delta g = e$  nakładają się piki indukowane przez każdą ze składowych  $f_{\alpha\beta}(g)$  o udziałach  $(V_i^\alpha)^2$ ,  $(V_j^\beta)^2$  oraz o szerokościach rozmycia  $\sqrt{2}\varpi_i$ ,  $\sqrt{2}\varpi_j$ . Natomiast w położeniach  $\Delta g_{ii'} = g_i g_{i'}^{-1}$  ( $i, i' = 1, I; i \neq i'$ ) i  $\Delta g_{jj'} = g_j g_{j'}^{-1}$  ( $j, j' = 1, J; j \neq j'$ ) funkcja  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$  posiada lokalne maksima indukowane przez składowe tej samej fazy. Takich składowych jest  $I(I-1) + J(J-1)$  z udziałami  $V_i V_{i'}$ ,  $V_j V_{j'}$  oraz o szerokościach rozmycia  $\sqrt{\Phi_i^2 + \Phi_{i'}^2}$ ,  $\sqrt{\Phi_j^2 + \Phi_{j'}^2}$ . Składowe  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$ :  $\Delta g_{ij} = g_i g_j^{-1}$  ( $i = 1, I; j = 1, J$ ) oraz  $\Delta g_{ji} = g_j g_i^{-1}$  ( $i = 1, I; j = 1, J$ ) - indukowane przez składowe  $f_{\alpha\beta}(g)$  z różnych faz - występują w  $2 \cdot I \cdot J$  położeniach, z udziałami objętościowymi  $V_j V_i$  oraz szerokościami rozmycia  $\sqrt{\varpi_i^2 + \varpi_j^2}$ .

Analogicznie jak w przypadku materiału jednofazowego parametry rozmycia wokół lokalnych maksimum  $F_{\alpha\beta}(\Delta g)$  są większe od rozmyć wokół maksimum  $f_{\alpha\beta}(g)$ :  $(\varpi_i, \varpi_i < \sqrt{\varpi_i^2 + \varpi_i^2})$ ,  $(\varpi_j, \varpi_j < \sqrt{\varpi_j^2 + \varpi_j^2})$ ,  $(\varpi_i, \varpi_j < \sqrt{\varpi_i^2 + \varpi_j^2})$ , natomiast objętościowe udziały są mniejsze:  $V_i^\alpha > (V_i^\alpha)^2$ ,  $V_j^\beta > (V_j^\beta)^2$ ,  $V_i^\alpha, V_j^\beta > V_i^\alpha V_j^\beta$  (dla  $(V < 1)$ ).

Dla przykładu rozważmy teraz najprostszyp przypadk dwu składowych należących do różnych faz  $g_1^\alpha, g_1^\beta$  (schematycznie przedstawiony na rys.30a).

Założmy, że parametry składowych są jak poniżej:

$$g_1^\alpha = \{107.5, 35.5, 111.5\}, \quad V^\alpha = 0.7, \quad \varpi^\alpha = 10^\circ,$$

$$g_1^\beta = \{107, 26.5, 42\}, \quad V^\beta = 0.3, \quad \varpi^\beta = 5^\circ$$

gdzie  $g = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ ,  $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$  - kąty Eulera.

Różnice orientacji  $\Delta g_{ij}^{\alpha\beta} \equiv (\omega, \vartheta, \psi)$  pomiędzy składowymi można określić w parametrach osi  $(\vartheta, \psi)$  i kąta obrotu  $\omega$ :

$$\Delta g_{11}^{\alpha\beta} = \{22, 24.3, 59.9\} \quad V^{\alpha\beta} = 0.21; \quad \varpi = 11.18^\circ$$

$$\Delta g_{11}^{\beta\alpha} = \{22, 24.3, 30.1\} \quad V^{\beta\alpha} = 0.21; \quad \varpi = 11.18^\circ$$

$$\Delta g_{11}^{\alpha\alpha} = \{0, 0, 0\} \quad V^{\alpha\alpha} = 0.49; \quad \varpi = 14.14^\circ$$

$$\Delta g_{11}^{\beta\beta} = \{0, 0, 0\} \quad V^{\beta\beta} = 0.09; \quad \varpi = 7.07^\circ$$

Na rys.30b przestawiono przekrój FRRO\_O dla  $(\omega = 22^\circ)$ , a na rys.30c zamieszczono profile pików.

Kolejny przykład dotyczy przypadku, gdy fazy  $\alpha$  oraz  $\beta$  zawierają po dwie składowe (rys. 31a) o wartościach parametrów jak poniżej:

$$g_1^\alpha = (107.5, 35.5, 111.5), \quad V_1^\alpha = 0.4, \quad \varpi_1^\alpha = 10^\circ$$

$$g_2^\alpha = (55, 14, 0), \quad V_2^\alpha = 0.2, \quad \varpi_2^\alpha = 8^\circ$$

$$g_1^\beta = (107, 26.5, 42), \quad V_1^\beta = 0.2, \quad \varpi_1^\beta = 5^\circ$$

$$g_2^\beta = (62, 42, 12), \quad V_2^\beta = 0.2, \quad \varpi_2^\beta = 8^\circ$$

Różnice orientacji są wówczas jak następuje:

$$\Delta g_{11}^{\alpha\beta} = \{22, 24.3, 59.9\} \quad V_{11}^{\alpha\beta} = 0.21, \quad \varpi = 11.18^\circ \quad \Delta g_{12}^{\alpha\alpha} = \{34.7, 34.1, 78.3\} \quad V_{12}^{\alpha\alpha} = 0.12, \quad \varpi = 12.8^\circ$$

$$\Delta g_{11}^{\beta\alpha} = \{22, 24.3, 30.1\} \quad V_{11}^{\beta\alpha} = 0.21, \quad \varpi = 11.18^\circ \quad \Delta g_{21}^{\alpha\alpha} = \{34.7, 34.1, 11.7\} \quad V_{21}^{\alpha\alpha} = 0.12, \quad \varpi = 12.8^\circ$$

$$\Delta g_{12}^{\alpha\beta} = \{52.3, 34.2, 40.4\} \quad V_{12}^{\alpha\beta} = 0.08, \quad \varpi = 12.8^\circ \quad \Delta g_{12}^{\beta\beta} = \{36, 53.3, 47.9\} \quad V_{12}^{\beta\beta} = 0.06, \quad \varpi = 9.43^\circ$$

$$\Delta g_{21}^{\beta\alpha} = \{52.3, 34.2, 49.6\} \quad V_{21}^{\beta\alpha} = 0.08, \quad \varpi = 12.8^\circ \quad \Delta g_{21}^{\beta\beta} = \{36, 53.3, 42.1\} \quad V_{21}^{\beta\beta} = 0.06, \quad \varpi = 9.43^\circ$$

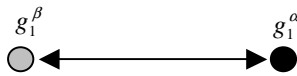
$$\Delta g_{21}^{\alpha\beta} = \{20.9, 9.6, 66\} \quad V_{21}^{\alpha\beta} = 0.09, \quad \varpi = 9.43^\circ \quad \Delta g_{11}^{\alpha\alpha} = \{0, 0, 0\} \quad V_{11}^{\alpha\alpha} = 0.16; \quad \varpi = 14.14^\circ$$

$$\Delta g_{12}^{\beta\alpha} = \{20.9, 9.6, 24\} \quad V_{12}^{\beta\alpha} = 0.09, \quad \varpi = 9.43^\circ \quad \Delta g_{11}^{\beta\beta} = \{0, 0, 0\} \quad V_{11}^{\beta\beta} = 0.09; \quad \varpi = 7.07^\circ$$

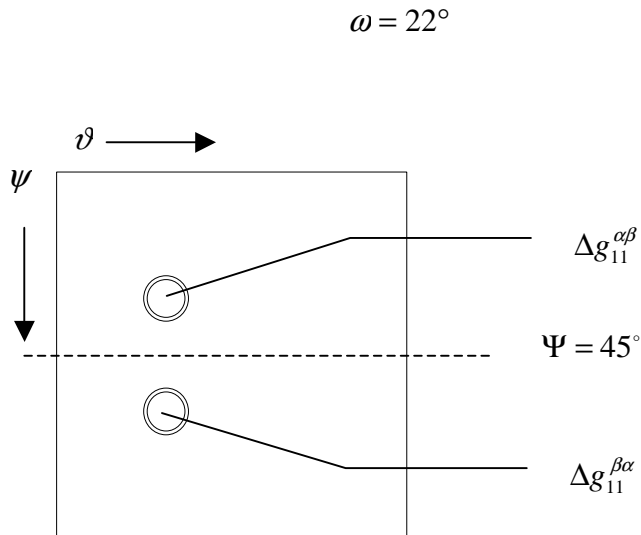
$$\Delta g_{22}^{\alpha\beta} = \{33.5, 32.5, 88.8\} \quad V_{22}^{\alpha\beta} = 0.6, \quad \varpi = 9.43^\circ \quad \Delta g_{22}^{\alpha\alpha} = \{0, 0, 0\} \quad V_{22}^{\alpha\alpha} = 0.09; \quad \varpi = 11.31^\circ$$

$$\Delta g_{22}^{\beta\alpha} = \{33.5, 32.5, 1.2\} \quad V_{22}^{\beta\alpha} = 0.6, \quad \varpi = 9.43^\circ \quad \Delta g_{22}^{\beta\beta} = \{0, 0, 0\} \quad V_{22}^{\beta\beta} = 0.04; \quad \varpi = 11.31^\circ$$

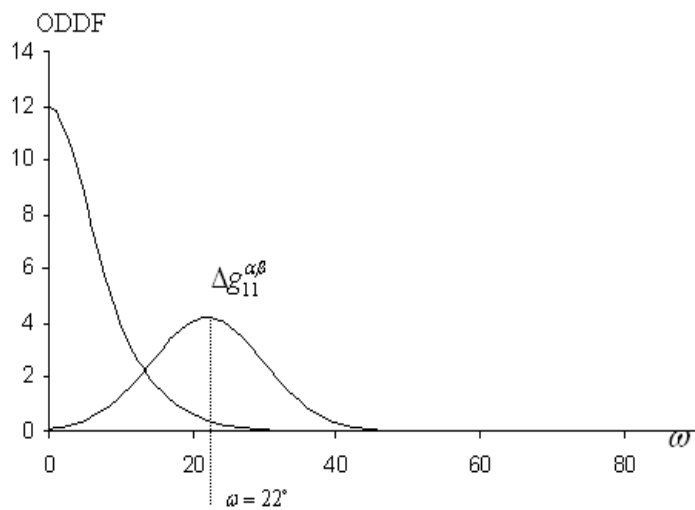
Rysunek 31b przedstawia FRRO\_O jako superpozycję przekrojów  $\omega = const.$ , w których znajdują się lokalne maksima gęstości różnic orientacji, a rysunek 30c zawiera profile pików.



Rys. 30a Schematyczne przedstawienie dwu składowych należących do różnych faz  $g_1^\alpha, g_1^\beta$ , [77].

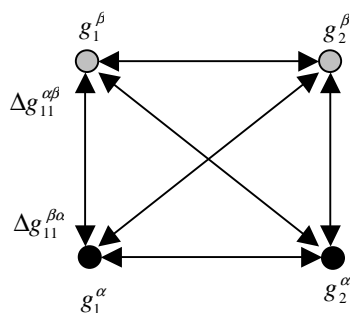


Rys. 30b Przekrój modelowej FRRO\_O dla  $\omega = 22^\circ$ , [77].

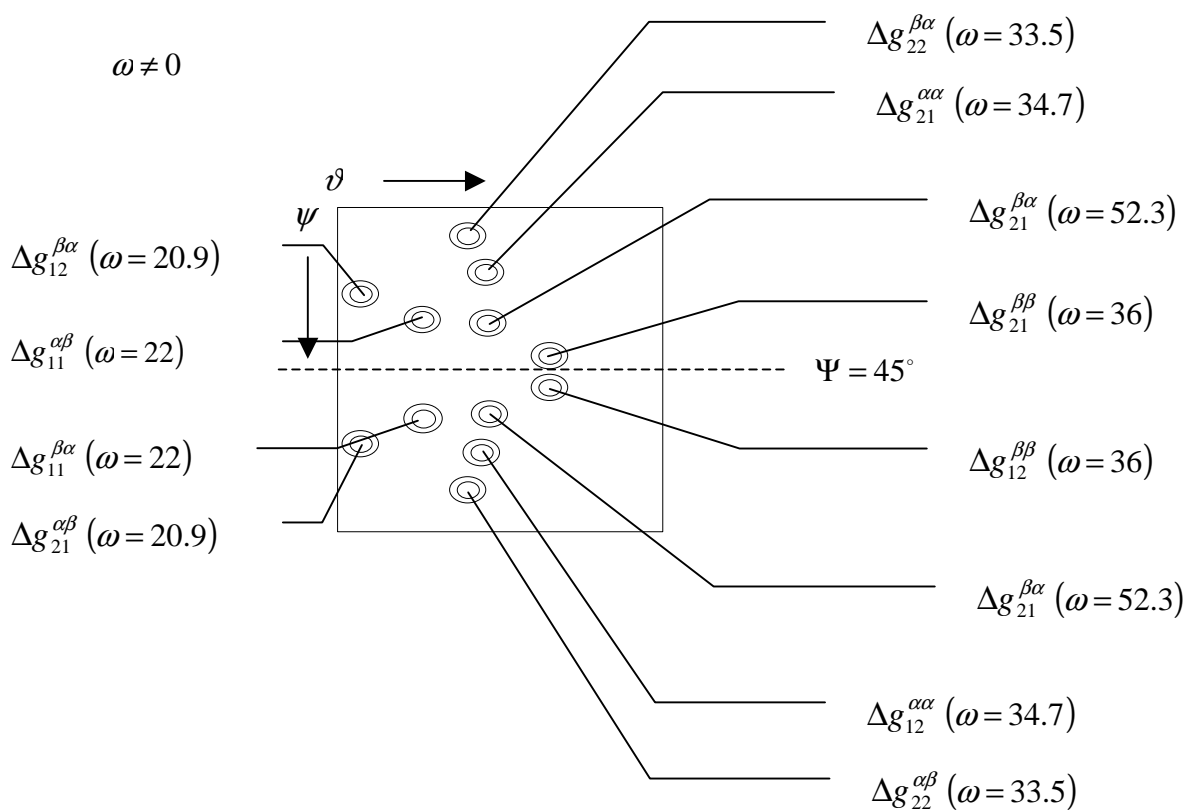


Rys. 30c Profile pików modelowej FRRO\_O ( ODDF ) dla ( $\omega = 22^\circ$ ), [77] .

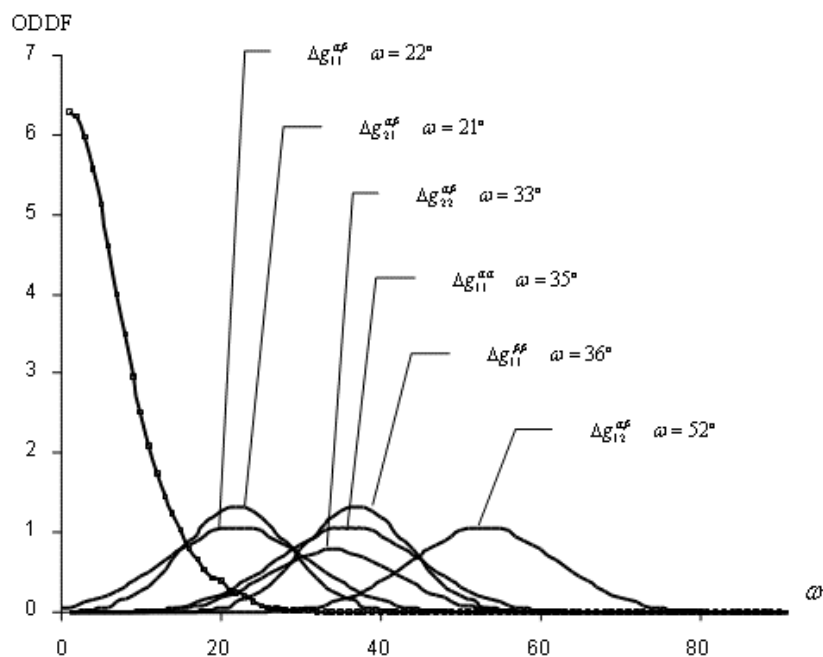
Na rysunku 31b przedstawiono FRRO\_O jako superpozycję przekrojów  $\omega = const.$ , w których znajdują się lokalne maksima gęstości różnic orientacji. Natomiast rysunek 31c zawiera profile pików.



Rys. 31a Schematyczne przedstawienie składowych należących do różnych faz  $g_1^\alpha, g_1^\beta$ ; [77]



Rys. 31b Superpozycja przekrojów FRRO\_O dla  $\hat{\omega}$ , w których znajdują się lokalne maksima gęstości różnic orientacji, [77].



Rys. 31c Profile pików modelowej FRRO\_O ( ODDF ) zawierającej po dwie składowe w fazach  $g_1^\alpha, g_1^\beta$ ; [77].

## 9. Rozkład potrójnych połączeń granic ziaren

Linie wzdłuż których łączą się granice trzech ziaren stanowią ważny element mikrostruktury materiału polikrystalicznego.

Na podstawie zmierzonych orientacji można wyznaczyć funkcję rozkładu orientacji oraz funkcję rozkładu różnic orientacji sąsiadujących ziaren (FRRO\_S) w badanym obszarze materiału. Na podstawie tzw. mapy orientacji można również zlokalizować potrójne połączenia granic ziarn, których wpływ na własności materiałów polikrystalicznych (zwłaszcza drobnoziarnistych) jest istotny.

Obok rozkładów orientacji oraz różnic orientacji w materiale polikrystalicznym analizowane są potrójne połączenia czyli linie, wzdłuż których przecinają się powierzchnie granic trzech sąsiadujących ziarn. Rozkład i charakter linii połączeń potrójnych (typ U lub I) ma wpływ na właściwości materiału - na przykład jego odporność na korozję. Model geometryczny linii potrójnej zaproponował Bollmann [78]. W modelu tym granice ziaren przy linii potrójnej można zinter-

pretować za pomocą układów dyslokacji. Układy te są wyrażone przez tzw. relację najbliższych sąsiadów. Z każdą taką relacją jest związana transformacja unimodularna.

## 9.1 Analiza typu potrójnych połączeń

Układy dyslokacji trzech granic ziaren przy linii potrójnej albo zachowują ciągłość, w takim przypadku jest to linia typu I; albo występuje nieciągłość i wówczas taką linię określamy jako typ U. Matematyczne określenie typu linii potrójnej polega na wyznaczeniu iloczynu trzech macierzy. Jeśli jest on równy macierzy jednostkowej wówczas linia połączenia jest typu I, w przeciwnym razie jest to linia typu U. Typ połączeń potrójnych ma wpływ na właściwości materiału; na przykład obecność linii typu U sprzyja procesom korozji.

Według W. Bollmanna [78-81], aby określić typ linii potrójnego połączenia należy:

- 1) Określić macierz struktury  $\mathbf{S}$  dla sieci krystalograficznej badanego materiału, na przykład

dla sieci RSC	dla sieci RPC	dla sieci heksagonalnej
$\mathbf{S}_{RSC} = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 & 0.0 \\ 0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 0.0 & 0.0 & 0.5 \end{pmatrix}$	$\mathbf{S}_{RPC} = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 & 0.0 \\ 0.5 & 0.5 & 0.0 \\ 0.5 & 0.5 & 1.0 \end{pmatrix}$	$\mathbf{S}_H = \begin{pmatrix} a & -a/2 & 0 \\ 0 & a\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$

- 2) Określić dezorientacje  $\mathbf{R}_i : \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3$  pomiędzy ziarnami, których granice przecinają się wzdłuż badanej linii potrójnej.

- 3) Wyznaczyć iloczyny

$$\mathbf{R}_i' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{R}_i \mathbf{S} .$$

- 4) Rozłożyć  $\mathbf{R}_i'$  na części całkowitą  $\mathbf{M}_{iE}$  oraz ułamkową  $\mathbf{M}_{iI}$

$$\mathbf{R}_i' = \mathbf{M}_{iE} + \mathbf{M}_{iI} .$$

- 5) Obliczyć tensor metryki  $\mathbf{G}$

$$\mathbf{G} = \mathbf{S}^T \mathbf{S} .$$

- 6) Wyznaczyć odległości  $d_i$  ( $i=1, \dots, 8$ ) pomiędzy wierzchołkami komórek: określonej przez macierz  $\mathbf{S}$  o dezorientacji  $\mathbf{R}_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) oraz podstawowej

$$d_i^2 = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_c)^T \mathbf{G} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_c) ,$$

gdzie

$\mathbf{x}_i$  - współrzędne wektora kolumnowego macierzy  $\mathbf{M}_{iI}$

$\mathbf{x}_c$  - współrzędne wierzchołków komórki podstawowej:

000, 001, 010, 001, 101, 110, 011, 111.

7) Przeanalizować wartości  $d_i^2$  :

- dla każdego wektora  $x_i$  znajdujemy najmniejszą wartość  $d_i^2$  i odpowiadającą jej wektor  $x_c$
- macierz utworzoną z wektorów kolumnowych  $x_c$  odpowiadających najmniejszym wartościom  $d_i^2$  dodajemy do macierzy  $\mathbf{M}_{iE}$  otrzymując w ten sposób macierz  $\mathbf{M}_i$  .

8) Sprawdzić czy macierz  $\mathbf{M}_i$  jest unimodularna:  $\det \mathbf{M}_i = +1$ .

Jeśli  $\det \mathbf{M}_i = 0$  lub  $2$  bierzemy pod uwagę wektor  $x_c$  odpowiadający nieco większej wartości  $d_i^2$  .

9) Transformacja unimodularna  $\mathbf{U}_i$  dla dezorientacji  $\mathbf{R}_i$  odpowiadająca relacji najbliższych sąsiadów jest równa

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{M}_i^{-1} .$$

10) Sprawdzić typ linii potrójnej obliczając iloczyn  $\mathbf{U}_3\mathbf{U}_2\mathbf{U}_1$  :

jeśli  $\mathbf{U}_3\mathbf{U}_2\mathbf{U}_1 = \mathbf{E}$  linia potrójna jest typu I,

jeśli  $\mathbf{U}_3\mathbf{U}_2\mathbf{U}_1 \neq \mathbf{E}$  linia potrójna jest typu U.

Ciekawy przypadek jest analizowany w pracy ] Zuo L., Esling C., Muller J., Bouzy E. [82].

Dotyczy on typu linii potrójnej utworzonej przez trzy ziarna o znanych różnicach orientacji - zadanych jak poprzednio w parametrach kąta obrotu  $\omega$  wokół osi o współrzędnych ( $v_x, v_y, v_z$ ).

Według modelu sieci miejsc koincydentnych odpowiadają one granicom  $\Sigma 3, \Sigma 3, \Sigma 9$  :

$\mathbf{R}_i$	$\omega$	$v_x$	$v_y$	$v_z$	$\Sigma$
$\mathbf{R}_1$	70.5	0.707	0.000	0.707	3
$\mathbf{R}_2$	70.5	0.707	0.000	0.707	3
$\mathbf{R}_3$	218.9	0.707	0.000	0.707	9

Możliwe są wówczas dwie sekwencje macierzy  $\mathbf{U}$  :

a)

$$\mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 \\ \mathbf{U}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

b)

$$\mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 \\ \mathbf{U}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

W obu przypadkach (a) oraz (b) iloczyn macierzy  $U_3U_2U_1$  jest równy  $E$ , a zatem linia potrójna powstała w wyniku przecięcia granic  $\Sigma_3-\Sigma_3-\Sigma_9$  jest typu I.

## 9.2 Potrójna funkcja rozkładu różnic orientacji

Potrójne połączenia granic ziarn stanowią istotny element mikrostruktury materiału polikrystalicznego. Tekstura, czyli rozkład orientacji (FRO), ma wpływ na rozkład potrójnych połączeń. Analiza nieskorelowanej, potrójnej funkcji rozkładu różnic orientacji (PFRRO\_O) wyznaczonej na podstawie modelowej funkcji rozkładu orientacji umożliwia poznanie ogólnych właściwości rozkładów połączeń potrójnych. Podobnie jak w przypadku modelowych rozkładów orientacji oraz różnic orientacji uzyskane w ten sposób informacje są pomocne podczas opracowywania rozkładów określonych na podstawie danych doświadczalnych.

Jeśli rozpatrujemy zbiór orientacji  $(g_i; i = 1, N)$  o liczności  $N$ , wówczas zbiór możliwych różnic orientacji  $(\Delta g_{ji}; i, j = 1, N)$  ma licznosc  $N(N-1)/2$ , natomiast zbiór połączeń potrójnych  $(\Delta g_{ji}, \Delta g_{ik}, \Delta g_{jk}; i, j, k = 1, N)$  to zbiór o liczności  $N(N-1)(N-2)/6$ .

Z definicji połączenia potrójnego wynika, że tylko dwie z trzech różnic orientacji są niezależne, ponieważ jeżeli

$$g_{ij} = g_j \cdot g_i^{-1}, \quad \Delta g_{ki} = g_k \cdot g_i^{-1}, \quad \Delta g_{jk} = g_j \cdot g_k^{-1}, \quad (9.1)$$

to zachodzi

$$\Delta g_{jk} = g_{ik} \cdot g_{ij}^{-1}. \quad (9.2)$$

Zatem połączenie potrójne może być opisane za pomocą dwóch różnic orientacji.

Ze zbioru pojedynczych orientacji można wyznaczyć FRO -  $f(g)$ , ze zbioru różnic orientacji określamy funkcję rozkładu różnic orientacji FRRO\_O -  $F(\Delta g)$ , a ze zbioru połączeń potrójnych potrójną funkcję rozkładu różnic orientacji PFRRO\_O -  $F_t(\Delta g_{12}, \Delta g_{13})$ .

Potrójna nieskorelowana funkcja rozkładu różnic orientacji opisująca rozkład linii połączeń potrójnych jest funkcją dwu różnic orientacji, a więc 6 zmiennych niezależnych.

Z definicji PFRRO\_O równa się [83]

$$M(\Delta g_{12}, \Delta g_{13}) = \oint f(\Delta g_{12} \cdot g_1) f(\Delta g_{13} \cdot g_1) f(g_1) dg_1. \quad (9.3)$$

Można ją zapisać w postaci szeregu uogólnionych funkcji kulistych [83]

$$M(\Delta g_{12}, \Delta g_{13}) = \sum_{l_1}^{\infty} \sum_{\mu_1}^{M(l_1)} \sum_{n=-l_1}^{+l_1} \sum_{l_2}^{\infty} \sum_{\mu_2}^{M(l_2)} \sum_{n_2=-l_2}^{+l_2} D_{l_1 l_2}^{\mu_1 n_1 \mu_2 n_2} \ddot{T}_{l_1}^{\mu_1 n_1}(\Delta g_{12}) \ddot{T}_{l_2}^{\mu_2 n_2}(\Delta g_{13}) \quad (9.4)$$

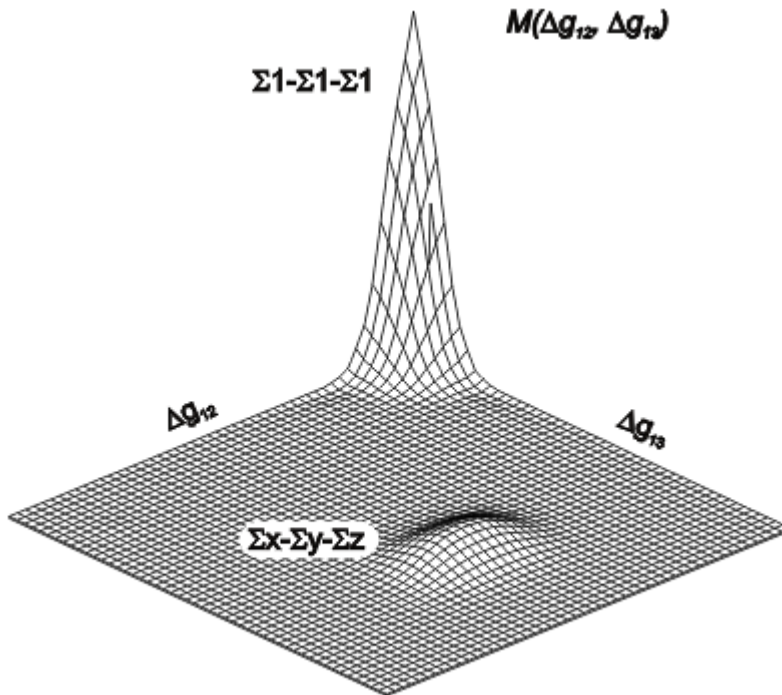
gdzie

$$D_{l_1 l_2}^{\mu_1 n_1 \mu_2 n_2} = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \frac{\ddot{A}_l^{n_1+n_2 \mu}}{2l+1} (l_1 l_2 n_1 n_2 / l n_1 + n_2) \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{+l_2} (l_1 l_2 m_1 m_2 / l m_1 + m_2) C_{l_1}^{\mu_1 m_1} C_{l_2}^{\mu_2 m_2} C_l^{* \mu m_1 + m_2},$$

$\ddot{A}_l^{n_1+n_2 \mu}$  są współczynnikami symetrii sieci krystalicznej [4,5],

$\ddot{T}_l^{\mu n}(\Delta g)$  uogólniona funkcja kulista spełniająca warunki symetrii sieci krystalicznej [4,5],

$(l_1 l_2 n_1 n_2 / l n_1 + n_2)$  oznacza współczynnik Clebscha-Gordana.



Rys.33 Schematyczne przedstawienie funkcji  $M(\Delta g_{12}, \Delta g_{13})$  odpowiadającej składowym  $g_1, g_2, g_3$  w obszarze wokół lokalnych maksimum  $\Sigma 1 \Sigma 1 \Sigma 1$  oraz  $\Sigma x \Sigma y \Sigma z$ .

Analityczne rozważania relacji (9.4) opisującej  $M(\Delta g_{12}, \Delta g_{13})$  nie umożliwiają - jak w przypadku nieskorelowanego rozkładu różnic orientacji - prostego oszacowania udziałów oraz rozmieszczenia pików zlokalizowanych w położeniach  $(e, e)$  oraz  $(\Delta g_{12}, \Delta g_{13})$  w zależności od paramet-

trów składowych FRO. Podobnie jak dla funkcji  $M(\Delta g)$  - pik w położeniu  $(e, e)$  będzie znacznie wyższy aniżeli pik w położeniu  $(\Delta g_{12}, \Delta g_{13})$  (rys 33).

Na podstawie funkcji  $M(\Delta g_{12}, \Delta g_{13})$  można obliczyć udział F [82,83] określonego typu połączenia potrójnego (x-y-z), np. dla granic koincencyjnych

$$F_{\Sigma x \rightarrow \Sigma y \rightarrow \Sigma z} = \int_{\tau} M(\Delta g_{12}, \Delta g_{13}) d\Delta g_{12} d\Delta g_{13} . \quad (9.5)$$

Obszar całkowania  $\tau$  w relacji (9.5) dla potrójnych połączeń granic koincencyjnych można określić na podstawie kryterium Brandona.

## Podsumowanie

Metody ilościowej analizy charakterystyk orientacji w materiałach krystalicznych są od kilkadziesiąt już lat rutynowo stosowane do opisu formowania się i rozwoju ich tekstury podczas różnych procesów technologicznych. Sprzyja im zarówno rozwój technik obliczeniowych i wzrost możliwości komputerów osobistych jak i rozwój metod doświadczalnych, szczególnie tzw. mikroskopii orientacji .

Wyznaczanie trójwymiarowej funkcji rozkładu orientacji z różnego typu danych doświadczalnych (figur biegunowych, zbiorów pojedynczych orientacji) stało się rutynowym zadaniem dzięki powszechnie dostępnym, efektywnym programom komputerowym. Również analiza FRO – jej składowych - jest obecnie w dużej mierze sformalizowana.

Rozwijająca się w ostatnich latach „inżynieria granic ziaren” przesunęła centrum zainteresowań w kierunku wyznaczania i analizy rozkładów różnic orientacji czy też linii połączeń potrójnych. .Możliwość ich wyznaczania uzyskano dzięki rozwojowi mikroskopii orientacji.

Wytwarzanie nowych „zaawansowanych materiałów” stymuluje rozwój formalizmów opisu ich mikrostruktury, od której zależą właściwości użytkowe. Interesującą grupę stanowią materiały wielofazowe z fazami o różnych symetriach sieci krystalicznej.

Możliwość różnych zastosowań dla funkcji modelowych opisujących składowe charakterystyk orientacji czyni z nich sprawne narzędzie analizy, które od lat jest z powodzeniem wykorzystywane.

Celem niniejszego opracowania było przedstawienie zarówno klasycznych sposobów wykorzystania modeli rozkładów, takich jak: określanie ewolucji składowych tekstury podczas poddawania materiału procesom technologicznym, czy analiza efektywności numerycznych metod wyznaczania FRO. Zaprezentowana została także analiza rozkładu różnic orientacji w materiale jedno i dwufazowym oraz w zarysie cechy linii połączeń potrójnych i ich rozkładów.

## LITERATURA

- [1] Wiglin A. S. A Quantitative Measure of the Texture of a Polycrystalline Material. Texture Function, Soviet Phys. Solid State **1** (1960), 229-233.
- [2] Roe R. J. Description of Crystalline Orientation in Polycrystalline Materials. (III) General Solution to Pole Figure Inversion, J. Appl. Phys. **36** (1965), 2024-2031.
- [3] Williams R. Analytical Methods for Representing Complex Textures by Biaxial Pole Figures, J. Appl. Phys. **39** (1968), 4329-4335.
- [4] Bunge H. J. Mathematische Methoden der Texturanalyse, Akademie-Verlag, Berlin 1969.
- [5] Bunge H. J. Texture Analysis in Materials Sciences, Butterworths, London 1982.
- [6] Kocks U.F., Tomé, C.N., Wenk H.-R. Texture and Anisotropy, Cambridge University Press, Cambridge 1998
- [7] Matthies S. On the Reproducibility of the Orientation Distribution Function of the Texture Samples from Pole Figures (Ghost Phenomena), Phys. Stat. Sol. (b) **92** (1979), K135-k138.
- [8] Bunge H.J., Esling C. Determination of the ODD Part of the Texture Function, J. Physique Letters **40** (1979) L627-L628.
- [9] Pospiech J., Lücke K., Jura J. Reproduction of the True ODF from Pole Figures and Single Orientation Measurements by Application of Gauss Type Scattering Models, Proc. Int. Conf. ICOTOM 6, Tokio (1981), 1390-1401.
- [10] van Houtte P. The use of a Quadratic Form for the Determination of Nonnegative Texture Functions, Textures and Microstructures, **6** (1982), 73-86.
- [11] Ruer D. Méthode Vectorielle d'Analyse de la Texture, Thesis, Metz University 1976.
- [12] Vadon A. Généralisation et Optimisation de la Méthode Vectorielle d'Analyse de la Texture, Thesis, Metz University 1981.
- [13] Pospiech J., Lücke K., Jura J., Reproduction of the true ODF from Pole Figures and Single Orientation Measurements by Application of Gauss Type Scattering Models, Proc. Int. Conf. ICOTOM 6 Tokio 1981, 1390-1401.
- [14] Imhof J. Determination of the Orientation Distribution Function from Pole Figures, Textures and Microstructures, **6** (1982), 73-86.
- [15] Imhof J. Texture Analysis by Iteration, (I) General Solution of the Fundamental Problem, Phys. Stat. Sol. (b) **119** (1983), 693-701.
- [16] Matthies S., Vinel G. W. On the Reproduction of the Orientation Distribution Function of Texturized Samples from Reproduced Pole Figures Using the Conception of a Conditional Ghost Correction, Phys. Stat. Sol. (b) **112** (1982), K115-K120.

- [17] Matthies S., Vinel G.W. An Example Demonstrating a New Reproduction Method of the ODF Texturized Samples from Reduced Pole Figures, *Phys. Stat. Sol. (b)* **112** (1982), K115-K120.
- [18] Pawlik K., Jura J., Pospiech J. On the Reproduction of the Orientation Distribution Function from One Pole Figure Using Imhof's Concept, *Proc. Int. Conf. ICOTOM 7*, Noordwijkerhout The Netherlands 1984, 811-816.
- [19] Pawlik K. Determination of the Orientation Distribution Function from Pole Figures in Arbitrarily Defined Cells, *Phys. Stat. Sol. (b)* **134** (1986), 477-483.
- [20] Pawlik K., Pospiech J., Lücke K. The Development of a New Direct Method of ODF Reproduction from Pole Figures and its Testing with the Help of Model Functions, *Proc. Int. Conf. ICOTOM 8*, Santa Fe, USA 1987, 105-110.
- [21] Dahms M. Series Expansion and Positivity, *Proc. Int. Conf. ICOTOM 10*, Clausthal, Germany, 1993, *Material Science Forum* Vol. **157-162**, pp. 341-348.
- [22] Lücke K., Pospiech J., Virnich, K.H., Jura J. On the Problem of the Reproduction of True Orientation Distribution Function from Pole Figures, *Acta Met.* **29** (1980), 167-182.
- [23] Jura J., Lücke K., Pospiech J. On the Ghost Structure of Orientation Distributions Derived from Pole Figures, *Z. Metallkde.* **71** (1980), 714-727.
- [24] Jura J., Lücke K., Pospiech J. Considerations on the Ghost Structure of Orientation Distributions Derived from Pole Figures, *Proc. Int. Conf. ICOTOM 6* Tokio 1981, 1402-1415.
- [25] Truszkowski W., Pospiech J., Jura J., Major B. A Quantitative Approach to the Texture in Silver Submitted to Cold Rolling, *Proc 3<sup>e</sup> Colloque Européen sur les Textures de Déformation et de Recristallisation de Métaux et leur Applications Industrielles*, Pont a Mousson 1973, 235-257.
- [26] Truszkowski W., Pospiech J., Jura J., Major B. Mechanizm formowania się tekstury walcowniczej srebra w pełnoilościowym ujęciu, *Arch. Hut.* **19** (1974), 3-29.
- [27] Pospiech J., Truszkowski W., Jura J., Król J. The Development of Rolling Texture in Polycrystalline Silver within a Wide Range of Deformation, *Proc. 4<sup>th</sup> European Conference on Textures in Metals*, Cambridge 1975, 23-33.
- [28] Pospiech J., Lücke K. The Rolling Textures of Copper and alpha-Brasses Discussed in Terms of the Orientation Distribution Function, *Acta Met.* **2** (1975), 997-1007.
- [29] Virnich K.H., Pospiech J., Flemmer A., Lücke K. On the Analysis of Orientation Distribution Functions by Superposition of Gauss Type Scattering Functions, *Proc. Int. Conf. ICOTOM 5* Aachen RFN 1978, 129-136.
- [30] Matthies S., Vinel G. W., Helming K. Standard Distribution in Texture Analysis, *Akademie-Verlag Berlin*: (a) vol. 1, 1987, (b) vol. 2 1988, (c), vol. 3 1991.

- [31] Virnich K.H. Orientierungsverteilungen in gewalzten und primär rekristallisierten Blechen aus Kupfer und binären Kupferlegierungen, Thesis, RWTH Aachen 1980.
- [32] Lücke K., Pospiech J., Jura J., Hirsch J. On the Presentation of the Orientation Distribution Functions (ODF's) by Model Functions, *Z.Metallkde.* **77** (1986) 312-321
- [33] M.Blicharski, J.Jura, T.Baudin, R.Penelle, J.Bonarski, M.Kowalski, Development of the the orientation relationship between ferritic and austenitic phases during long time annealing of duplex stainless steel, *Materiały Konferencji SOTAMA, Kraków, październik 2004, Archives of Metallurgy and Materials* **50**, 2005495-502.
- [34] Pospiech J., Jura J. The Orientation Distribution Function in Space of Rotation, *Proc. Int. Seminar Quantitative Analysis of Textures, Kraków 1971*, 73-85.
- [35] Pospiech J., Jura J. Analiza tekstury przy użyciu parametrów osi i kąta obrotu, *Hutnik* **11** (1972) 539-545.
- [36] Hansen J., Pospiech J., Lücke K. *Tables for Texture Analysis of Cubic Crystals*, Springer – Verlag, Berlin ◦ Heidelberg ◦ New York 1978.
- [37] Grabski M.W., *Struktura granic ziaren w metalach*, Katowice 1969.
- [38] Adams B. L., Rohrer G.S., Saylor D.M., Rollet A.D., Wynblatt P., El-Dasher Bassem, The distribution of Internal Interfaces in Polycrystals, *Z. Metallkde* **95** (2004) 4, 197-214. również w Brigham Youn University, Harold B.Lee Library, Institutional Repository, submitted to repository 2006-02-23. <https://dspace.byu.edu/handle/1877/101>.
- [39] Morawiec A., *Orientations and Rotations, Computations in Crystallographical Textures* Springer – Verlag, Berlin ◦ Heidelberg ◦ New York 2004.
- [40] Frank F.C. Orientation Mapping, *Metallurgical Transactions A* vol. **19A**, March 1988, 403-408.
- [41] Rodrigues O., *J.des Mathématiques Pures et Appliquées ( also called J.de Mathématique et de Physique, or Liouville's Journal )* 1840, vol **5**, 380-440.
- [42] J.Jura, Th.Baudin, M.H.Mathon, W.Świątnicki, R.Penelle; Microtexture and Texture Analysis in a Cold-Rolled Austenitic-Ferritic Steel with Duplex Structure, *Materials Science Forum Vols. 408- 412* , pp. 1359-1364, *Proc. of the Int. Conf. on Textures of Materials, ICOTOM 13, Seul, Korea, August 2002.*
- [43] Pospiech J., Lücke K., Sztwiertnia K., Orientation Distribution and Orientation Correlation Functions for Description of Microstructure, *Acta metall. Mater.*, **41**, 1 (1993), 305-321.
- [44] Pospiech J., Sztwiertnia K., Haessner F., The Misorientation Distribution Function , *Textures and Microstructures* vol. **6**, 3 (1986), 201-215.
- [45] Sztwiertnia, K., Jura J., Faryna M., *Badania rozkładu dezorientacji ferryt / austenit w stali dwufazowej*, 2004, raport do sprawozdania z projektu badawczego 7 T08A 003 20, Wpływ wodoru na strukturę granic międzyfazowych  $\alpha / \beta$  oraz na właściwości mecha-

niczne stali austenityczno-ferrytycznej , kierownik projektu Świątnicki W.

- [46] Pospiech J., Gnatek A., Fichtner K., Symmetry in the Space of Euler Angles, *Kristall u. Technik* **9** (1974), 729-742.
- [47] Pospiech J., The Approximation of the ODF from Pole Figures through Discretization, *Proc.Int. Conf. ICOTOM 8 1987, Santa Fe USA*, 93-104.
- [48] Matthies S., Pospiech J. Demonstration of the Ghost Effect in the Presentation of the Orientation Distribution Function of the Texturized Materials, *Phys. Stat. Sol. (b)* **97** (1980), 547-556.
- [49] Pospiech J. The Reproduction of the Orientation Distribution Function (ODF) of a Polycrystalline Material from Pole Figures, *Kristall u. Technik* **15** 12 (1980) 1481-1487.
- [50] Pospiech J. Computational Principles for the Analysis of ODF Reproducibility from Pole Figures, *Z.Metallkde* **74** (1983) H4 221-225.
- [51] Matthies K., Helming K. General Considerations of the Loss of Information on the Orientation Distribution Function of Texturized Samples in Pole Figure Measurements, *Phys. Stat. Sol. (b)* **113** (1982), 569-582.
- [52] Lücke K., Pospiech J., Virnich K.H., Flemmer A., Nüssler D. cytowane w. [22], Flemmer A., Thesis RWTH Aachen 1976, Virnich K.H., Master Thesis RWTH Aachen 1976, Nüssler D., Master Thesis RWTH Aachen 1977.
- [53] Jura J., Lücke K., Schlippenbach v. U. Estimating of the Parameters of Fibre-type Texture Components in BCC Metals, *Proc. Int. Conf. ICOTOM 8, Santa Fe USA 1987*, 123-128
- [54] Jura J. Model Representation of Fibre-type Texture Components in a BCC Metal, *Bull. Pol. Ac.: Tech*; **36** (1988), 183-189
- [55] Jura J., Zastosowanie funkcji modelowych w ilościowej analizie tekstur metali o sieci regularnej, *Scientific Bulletins of University of Mining and Metallurgy No.1530, Metallurgy and Foundry Practice, Bulletin 148, Kraków Poland 1993*.
- [56] Flowers J. W. Volume Fractions of Texture Components of Cubic Materials, *Textures and Microstructures*, **5** (1983) 205-218.
- [57] Helming K., Eschner Th. A New Approach to Texture Analysis of Multiphase Materials Using a Texture Component Model, *Cryst. Res. Technol.* **25** (1990) , 8 K203-K208.
- [58] Eschner Th. Texture Investigation by Means of Model Functions, *Proc. Int. Conf. EPDIC Enschede The Netherlands 1992*, 139-144.
- [59] Dniprenko W. M., Divinskij S.W. New Approach to Description of the Three-dimensional Orientation Distribution Functions in Textured Materials, *Preprint 92-1 Institut of Metal Physics Acad. Sci. of Ukraine, UDC 539.4, 1992*, 1-12.

- [60] Schaeben H. Parametrizations and Probability Distributions of Orientations, Textures and Microstructures **13** 1 (1990), 51-54.
- [61] Schaeben H. "Normal" Orientation Distributions, Textures and Microstructures **19** 4 (1992), 197-202.
- [62] Sawiołowa T. I. Distribution Function of Grains with Respect to Polycrystal Orientations and its Gaussian Approximation, *Zavodskaja Laboratorija*, **50** (1984), 48-52.
- [63] Matthies S., Muller J., Vinel G. W. On the Normal Distribution in the Orientation Space, Textures and Microstructures **10**, (1988), 77-96.
- [64] Nikołajew D. I., Sawiołowa T., I., Feldman K. Approximation of the Orientation Distributions of Grains in Polycrystalline Samples by Means of Gaussians, Textures and Microstructures **19** 1 (1992), 9-27.
- [65] Pospiech J., Lücke K., Jura J., Hirsch J. Applications of Models in Texture Analysis, Proc. Int. Conf. ICOTOM 7, Noordwijkerhout The Netherlands 1984, 817-820.
- [66] Jura J. Evaluation of the Parameters of Texture Components on the Basis of a Discrete Form of Orientation Distribution, Proc. Int. Conf. ICOTOM 9 Avignon, Textures and Microstructures, **14-18** (1991), 193-197.
- [67] Gryziecki J., Truszkowski W., Pospiech J., Jura J. Development of texture and Microstructure During Rolling of Copper – 8 WT PCT Germanium Alloy, Proc. Int. Conf. ICOTOM 9 Avignon, Textures and Microstructures, **14-18** (1991), 1061-1066.
- [68] Jura J. Estimation of the Texture Component Parameters in Cubic Metals, Proc. Int. Conf. EPDIC 2 Enschede The Netherlands 1992, 145-150.
- [69] Matthies S. Form Effects in the Description of the Orientation Distribution Function (ODF) of Texturized Materials by Model Components, *Phys. Stat. Sol. (b)* **112** (1982), 705-712.
- [70] Weiland H., Bunge H.J. Orientation Correlation Functions in Single and Polyphase Materials, *Advances and Applications of Quantitative Texture Analysis*, ed. Bunge H.J., Esling C., Clausthal Germany 1989, within European COMETT project, DGM Informationsgesellschaft Verlag.
- [71] Jura J., Pospiech J., Gottstein G. ODDF Analysis Using Model Functions, Liang Z., Zuo L., Chu Y. (editors). Proc. of the Eleventh Int. Conf. on Textures of Materials ICOTOM 11 September 16-20, 1996 Xi'an China, Int. Academic Publishers, Beijing, China. vol **2**, pp. 1351-1356.
- [72] Engler O., Yang P., Gottstein G., Jura J., Pospiech J. Behaviour of Statistical Texture Parameters Applied to Single Grain Orientation Measurements in Recrystallized Al-Mn, Proc. Int. Conf. On Textures of Materials ICOTOM 10 Clausthal Germany 1993, Trans Tech Publications 1994, *Materials Science Forum* vol.**157-162** (1994), pp. 933-938.

- [73] Engler O., Gottstein G., Pospiech J., Jura J. Statistics, Evaluation and Representation of Single Grain Orientation Measurements, Proc. Int. Conf. on Textures of Materials ICOTOM 10, Clausthal Germany 1993, Trans Tech Publications 1994, Materials Science Forum vol. **157-162** (1994), pp.259-274.
- [74] Pospiech J., Jura J., Gottstein G., Statistical Analysis of Single Grain Orientation Data Generated from Model Textures Proc. Int. Conf. on Textures of Materials ICOTOM 10, Clausthal Germany 1993, Trans Tech Publications 1994, Materials Science Forum vol. **157-162** (1994), pp.407-412.
- [75] Baudin T., Jura J., Penelle R., Pospiech J. Estimation of the Minimum Grain Number for the ODF Calculation from Individual Orientation Measurements on Fe<sub>3%</sub>Si and Ti<sub>4</sub>Al<sub>6</sub>V Alloys, J. Appl. Cryst. **28** (1995), 582-589.
- [76] Jura J., Pospiech J., Gottstein G. Estimation of the Number of Grain Orientations for the ODF Determination, Z.Metallkunde **87** 6 (1996), 476-480.
- [77] Litawa G., Jura J., Góral A. Analysis of the orientation difference distribution function in the two-phase material using model functions, Materiały Konferencji SOTAMA, Kraków, październik 2004, Archives of Metallurgy and Materials **50** (2005), 349-357.
- [78] Bollmann W., Crystal Lattices, Interfaces, Matrices an extension of crystallography, published by the author 1982. Printed in Switzerland by Imprimerie des Berges, Carouge, Geneva.
- [79] Bollmann W. A Branching Condition for Intercrystalline Boundaries, Phil. Mag. A vol. **44**, No. 5 (1981) 991-1003.
- [80] Bollmann W. Triple Lines in Polycrystalline aggregates as Disclinations, Phil. Mag. A, vol. **49**, No 1 (1984) 73-79.
- [81] Bollmann W. Triple-line Disclinations Representations, Continuity, and Reactions Phil. Mag. vol. **57** No. 4. (1988) 637-649.
- [82] Zuo L., Esling C., Muller J., Bouzy E. A Statistical Approach to Triple Junctions in Polycrystals, Materials Science Forum vols. **273-275** (1998) pp. 175-180.
- [83] Esling C., Zuo L., Texture-based Quantities as References of the Statistical Distributions of Grain Boundaries Proc ICOTOM-11 Xi'an, China 1996, ed. by Zhidong Liang, Liang Zuo and Youji Chou, pp. 1299-1308.