



HUMAN CAPITAL
NATIONAL COHESION STRATEGY

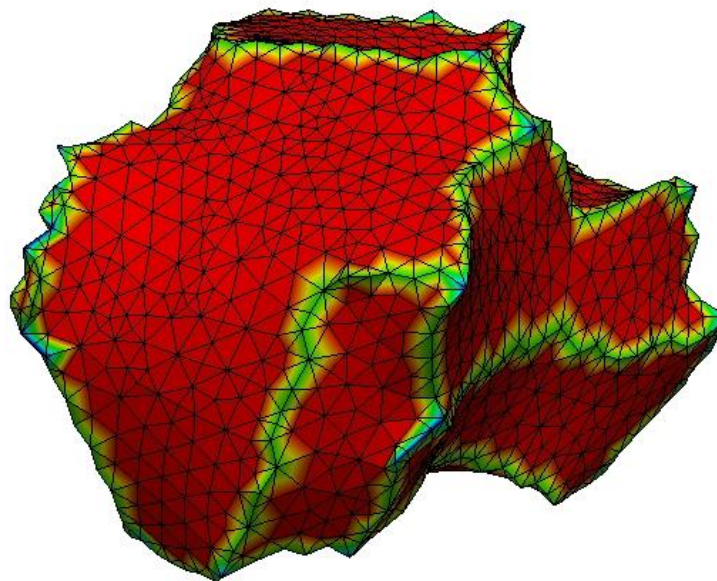


INSTITUTE OF METALLURGY
AND MATERIALS SCIENCE
Polish Academy of Sciences

EUROPEAN
UNION



Narzędzia do geometrycznej charakteryzacji granic ziaren



K. Głowiński

—• Interdisciplinary PhD Studies in Materials Engineering with English as the language of instruction •—

Institute of Metallurgy and Materials Science

Polish Academy of Sciences

Reymonta 25, 30-059 Krakow, tel. +48 12 295 28 00, fax +48 12 295 28 04

www.imim-phd.edu.pl

Project is co-financed by European Union within European Social Fund



Plan prezentacji

Wprowadzenie do granic ziaren

Cel badań

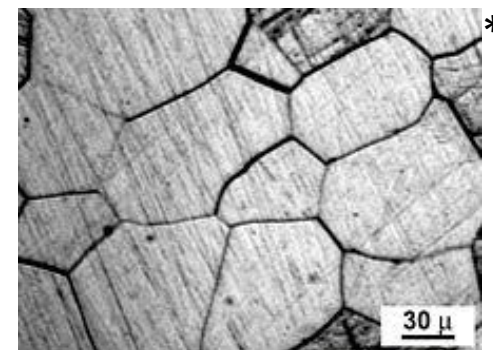
Przykłady zastosowania rozwijanych metod i narzędzi:

- Rozkłady granic i ich interpretacja
- Częstości występowania granic o specjalnej geometrii

Podsumowanie

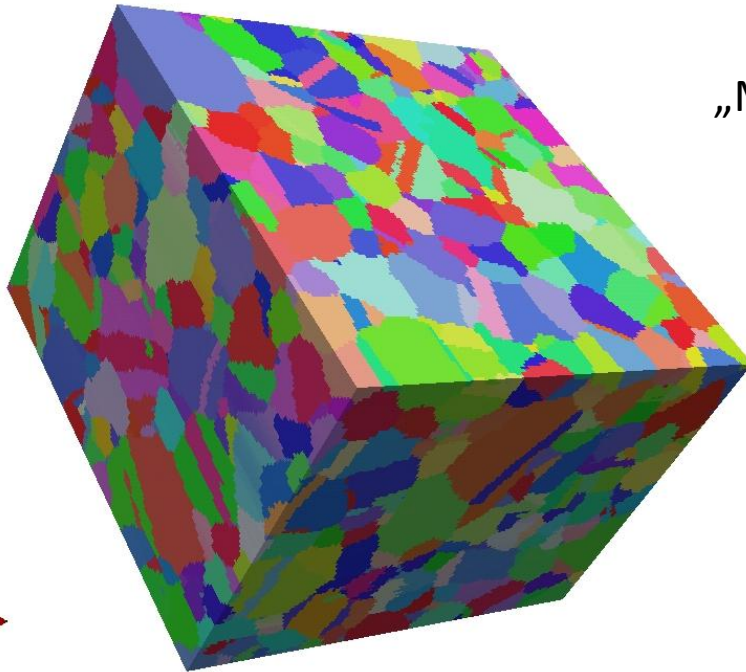
Znaczenie granic ziaren

- Granice ziaren mają wpływ na szereg właściwości materiałów polikrystalicznych:
 - Zjawiska związane z ruchem granic: migracja, poślizg, rekrytalizacja, wzrost ziaren, pełzanie
 - Zjawiska transportu: segregacja, korozja
 - Właściwości chemiczne: wydzielania, przejścia fazowe
 - Właściwości mechaniczne, elektryczne i magnetyczne
- Można wyróżnić granice specjalnych typów: granice bliźniacze, symetryczne, niskiego kąta, miejsc koincydentnych, itp.
- „Inżynieria granic ziaren”



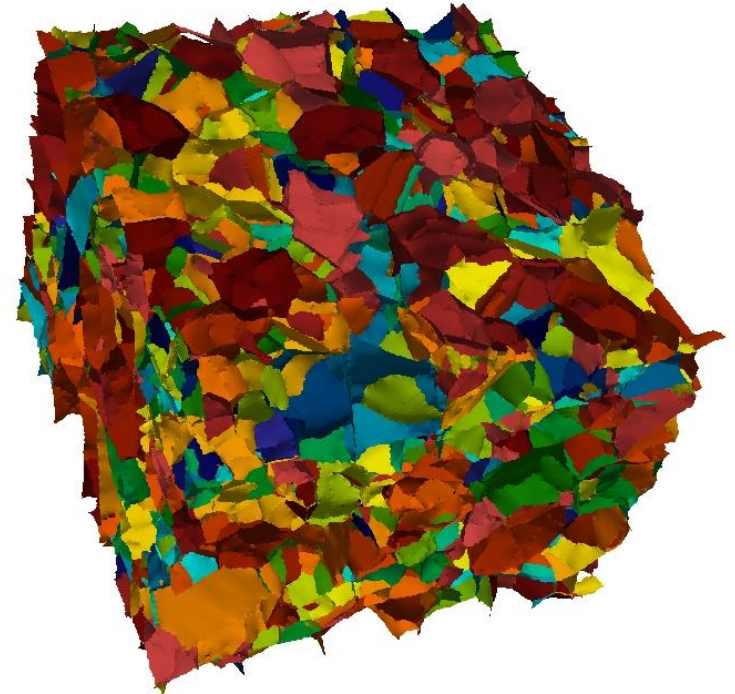
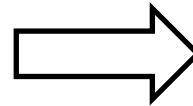
Trójwymiarowe mapy orientacji

Postęp w rozwoju trójwymiarowych metod eksperymentalnych pozwolił na przestrzenne obrazowanie mikrostruktur



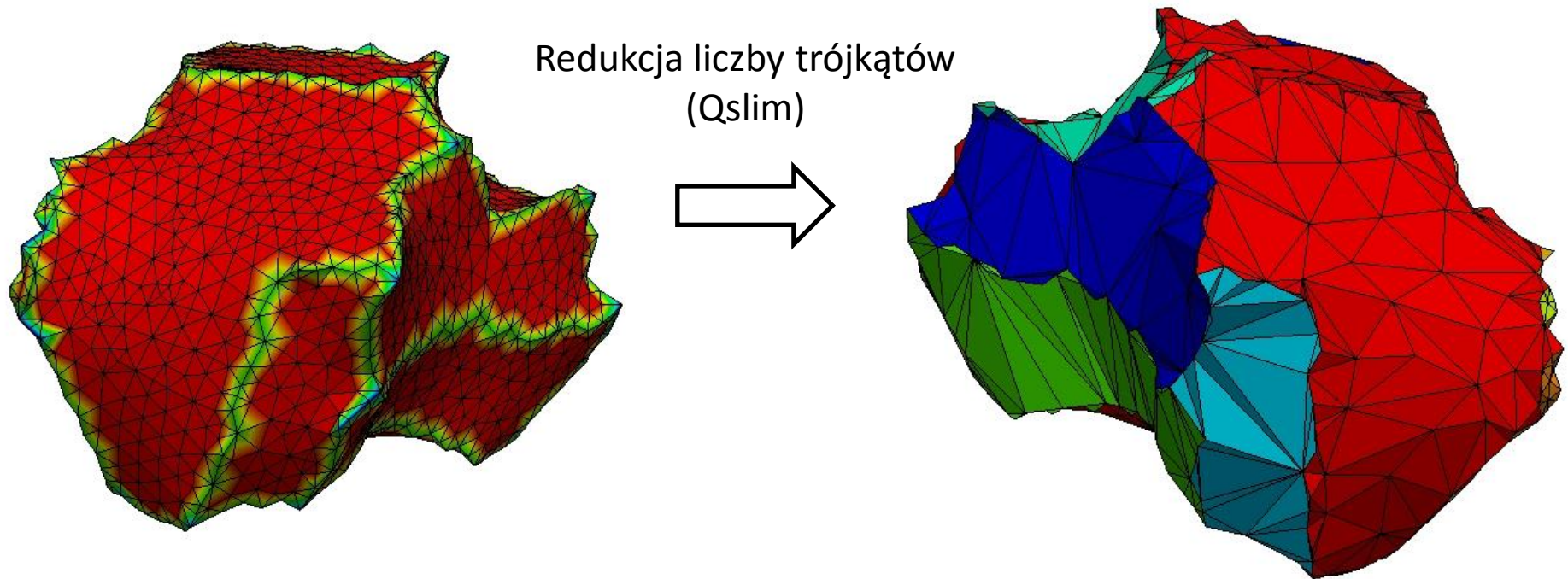
Mikrostruktura stopu na bazie niklu
~40 x 40 x 30 μm

„Marching Cubes”
+
wygładzanie
(DREAM.3D)



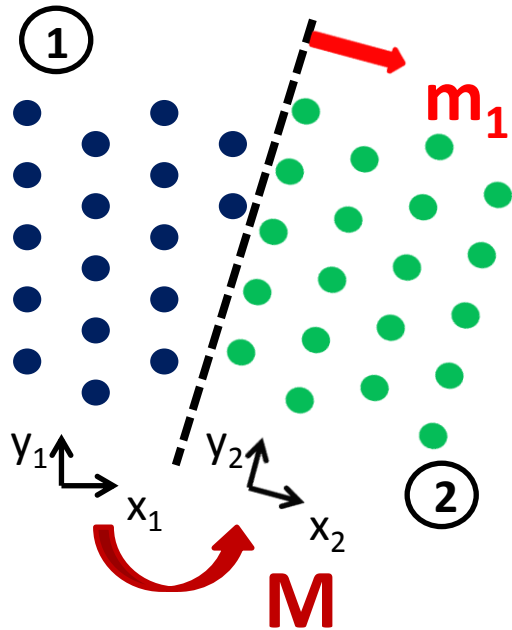
Sieć granic ziaren

Rekonstrukcja granic



Do uzyskania informacji ilościowych o danej sieci granic
niezbędna jest odpowiednia parametryzacja granic

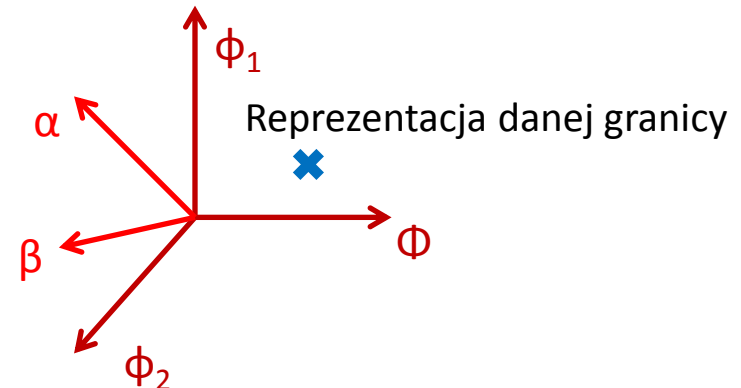
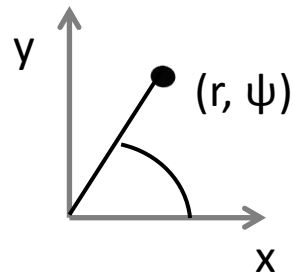
Pięć „makroskopowych” parametrów granicy



M (dezorientacja) – **trzy** stopnie swobody

m₁ (normalna do płaszczyzny granicy) – **dwa** parametry

Pięciowymiarowa przestrzeń parametrów granicy:





Cel badań

Ilościowa analiza sieci granic ziaren, m.in. rozkłady granic

Analizy statystyczne, dot. m.in. częstości występowania granic o specjalnej geometrii

Rozwój narzędzi komputerowych do analizy zarówno pojedynczych bikryształów, jak i dużych zbiorów danych

Granice o szczególnych cechach geometrycznych

Granice niskiego kąta

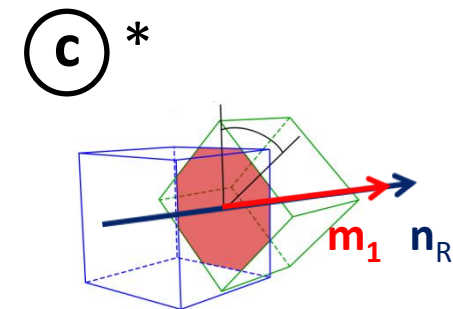
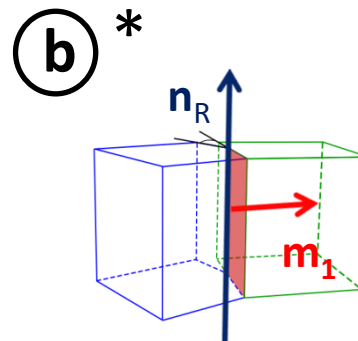
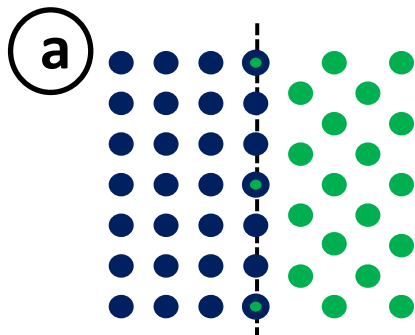
Granice miejsc koincydentnych (CSL) – sieci krystaliczne obu ziaren mają wspólne węzły (a)

Skręcone - n_R równoległe do m_1 (c)

Nachylone - n_R prostopadłe do m_1 (b)

Symetryczne – struktury krystalitów są odbiciem lustrzanym względem płaszczyzny granicy

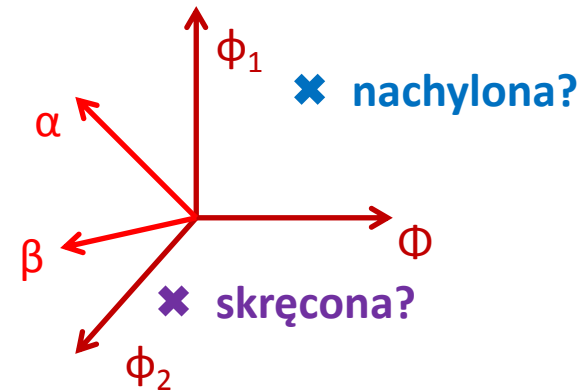
Quasi-symetryczne – wskaźniki płaszczyzny granicy wyrażone w układzie współrzędnych pierwszego ziarna są permutacją wskaźników tej płaszczyzny w drugim ziarnie





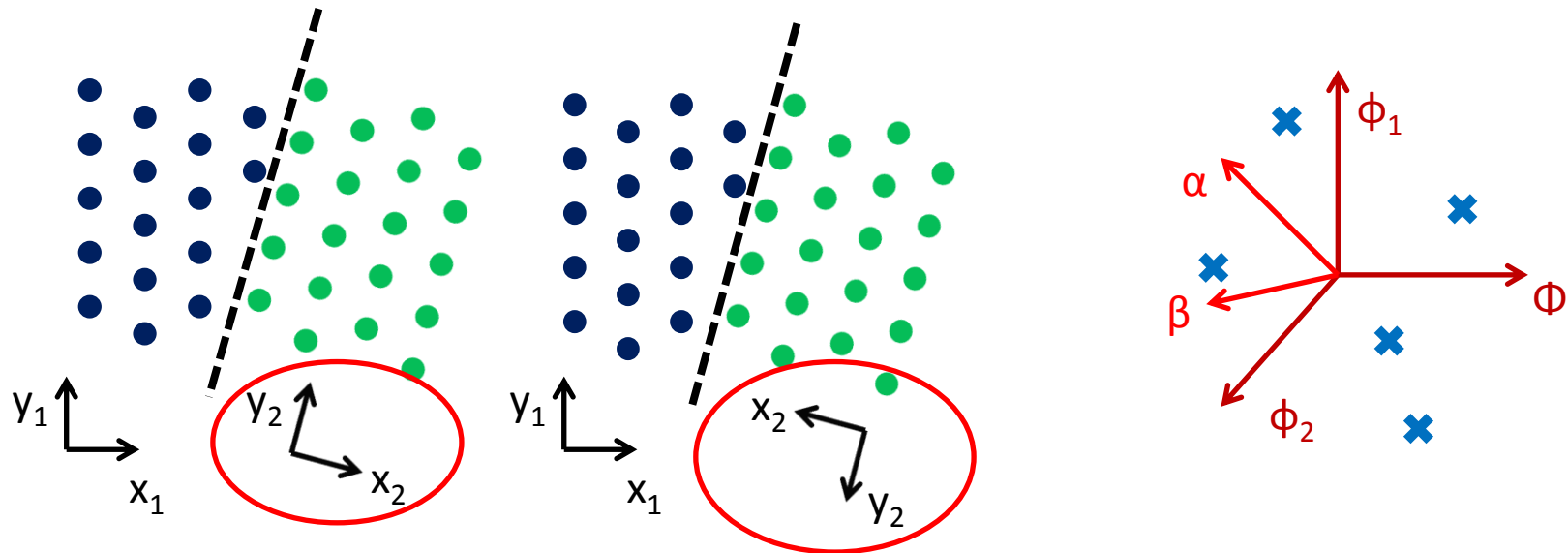
Pytania

Geometrycznie charakterystyczne granice:
nachylone, skręcone, symetryczne, itp.



1. **Jak znaleźć te granice w przestrzeni parametrów?**
2. **Jak zidentyfikować płaszczyzny, które odpowiadają tym specjalnym granicom jeżeli dezorientacja jest ustalona?**
3. **Ile granic każdego z typów jest w danej próbce?**

Wpływ symetrii krystalicznej





- Różne zestawy parametrów („punkty w przestrzeni”) odpowiadają tej samej sytuacji fizycznej (tej samej granicy)
- Wszystkie równoważne reprezentacje muszą być analizowane

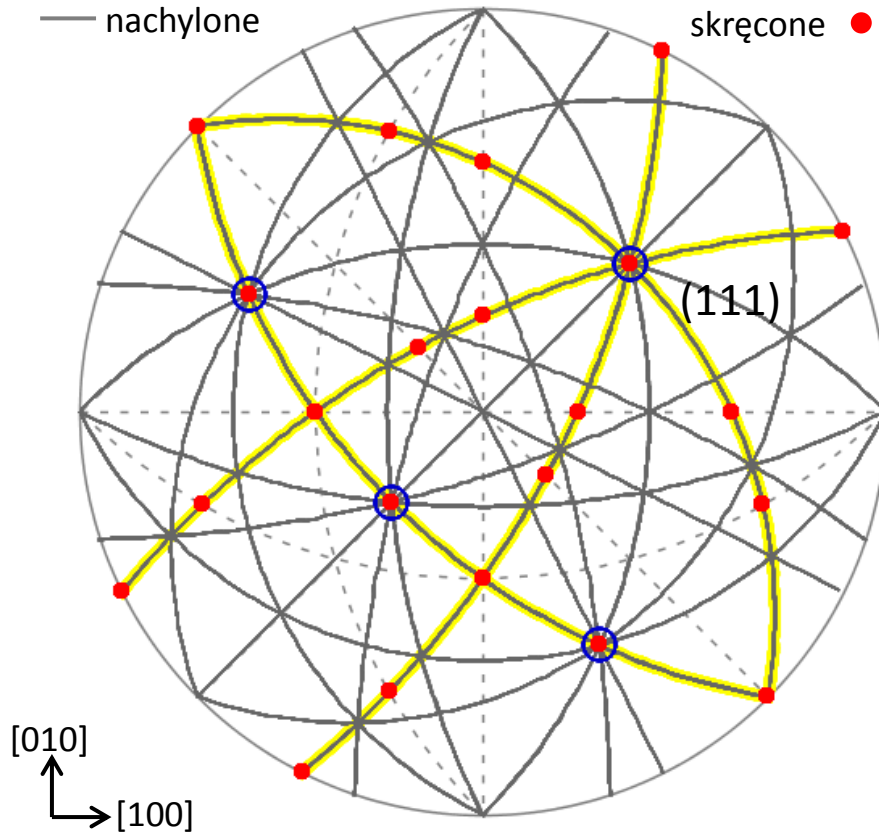
Listy granic o specjalnej geometrii

Bieguny płaszczyzn (rzut stereograficzny) granic o specjalnej geometrii dla ustalonej dezorientacji $\Sigma 3$ (60° ; $[111]$)

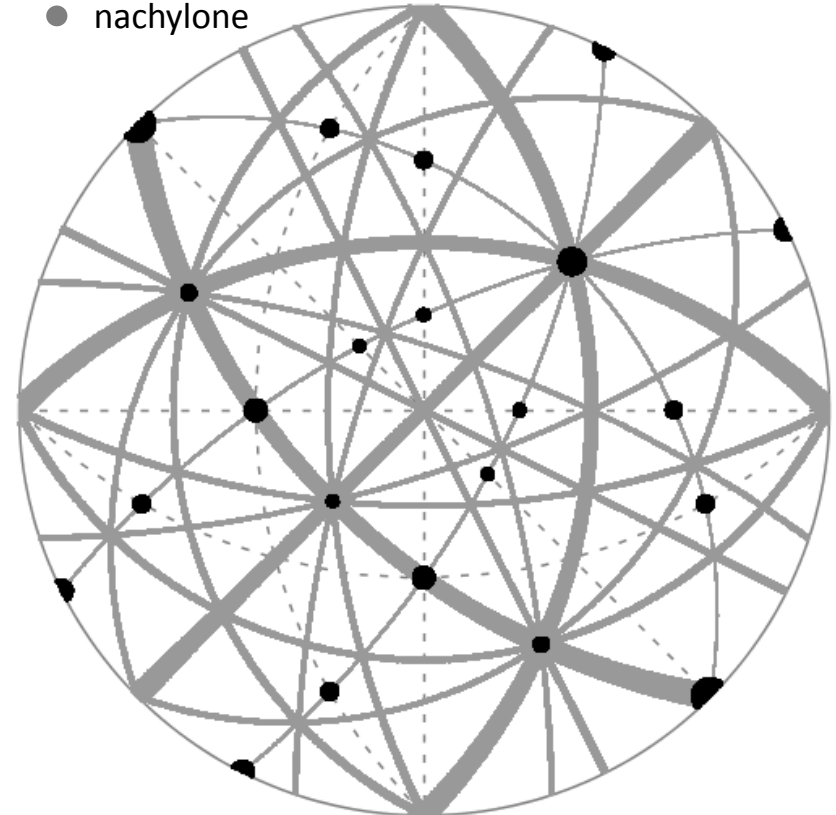
— nachylone (180°)
— nachylone

symetryczne 
skręcone 

● skręcone
● nachylone

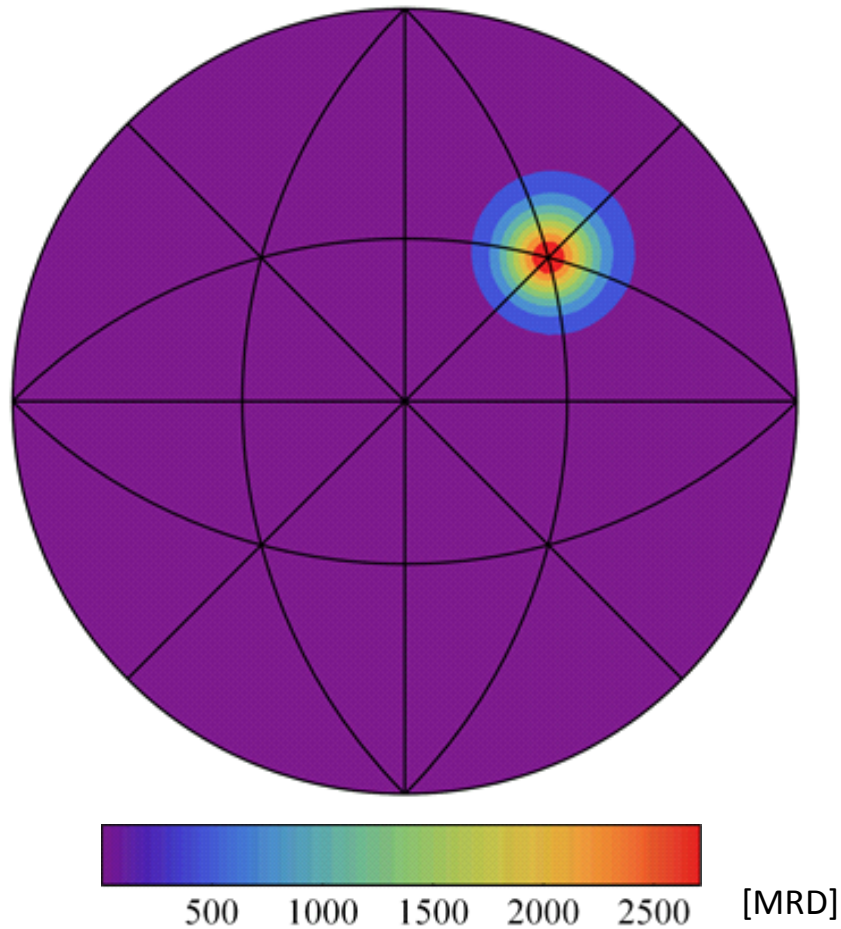


Wynik analityczny



Przeszukiwanie numeryczne (rozkład Fortesà)

Rozkłady granic

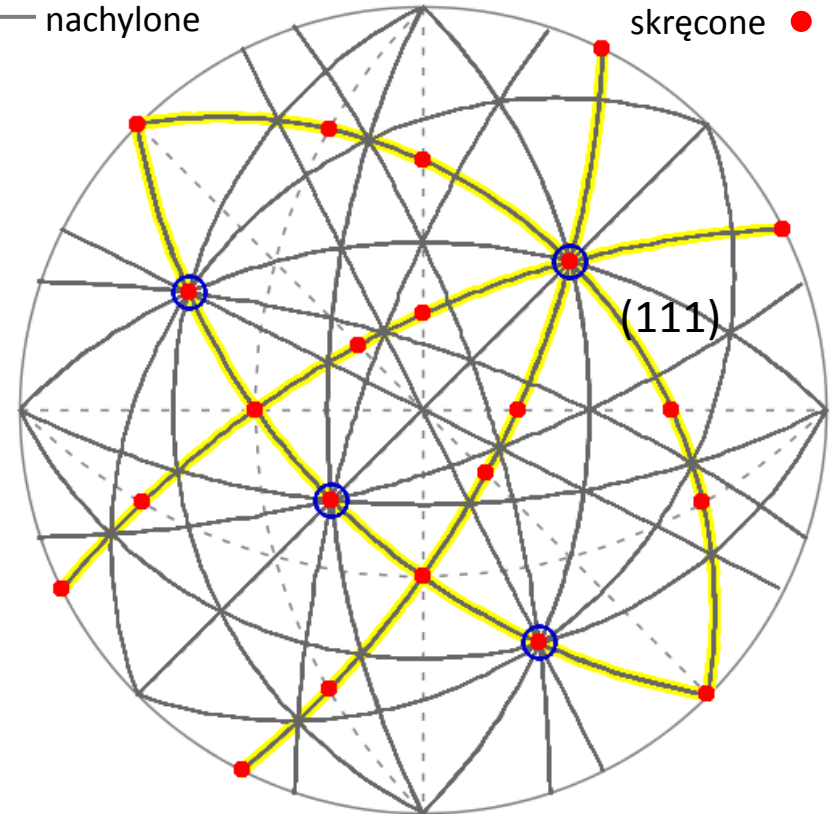


— nachylone (180°)

— nachylone

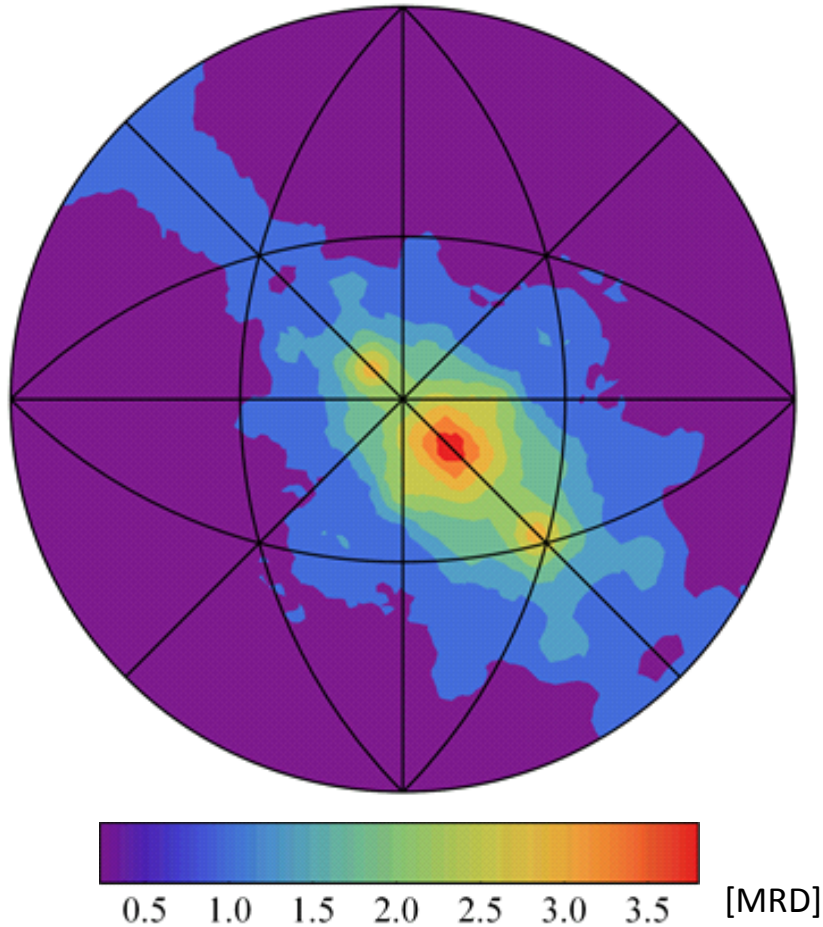
symetryczne ○

skręcone ●



Przekrój przez rozkład granic dla dezorientacji $\Sigma 3$ (60° ; [111]) dla stopu niklu
+ katalog granic o specjalnej geometrii

Rozkłady granic

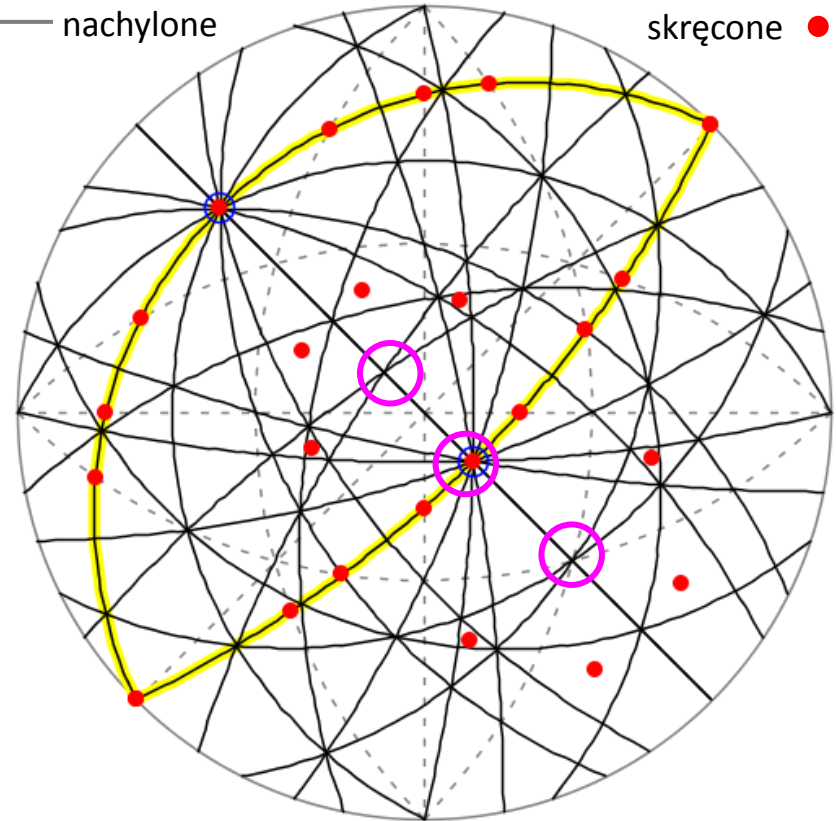


— nachylone (180°)

— nachylone

symetryczne ○

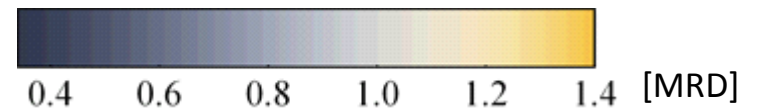
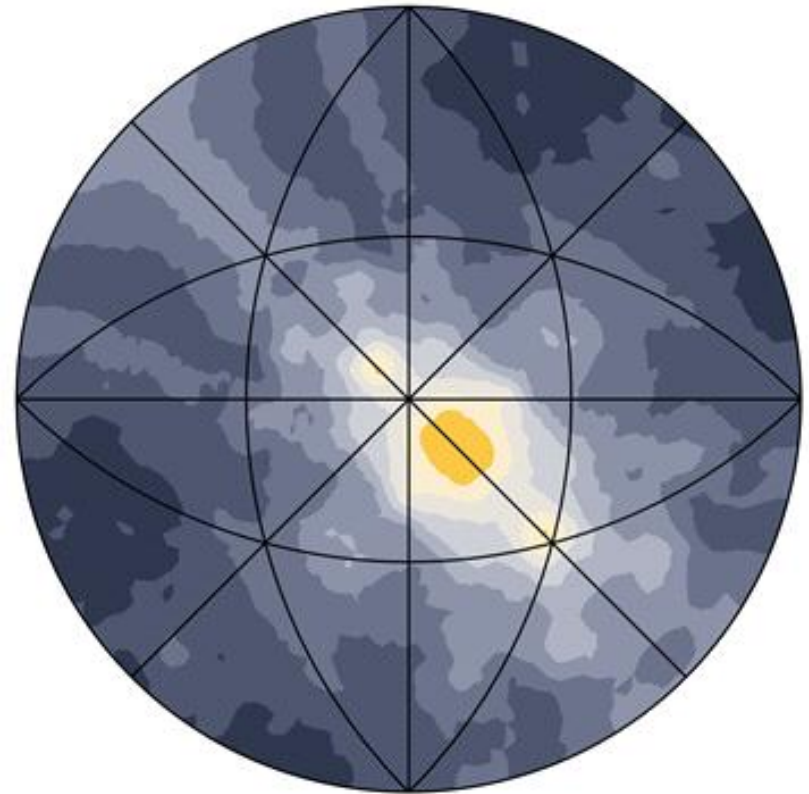
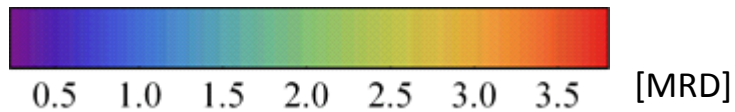
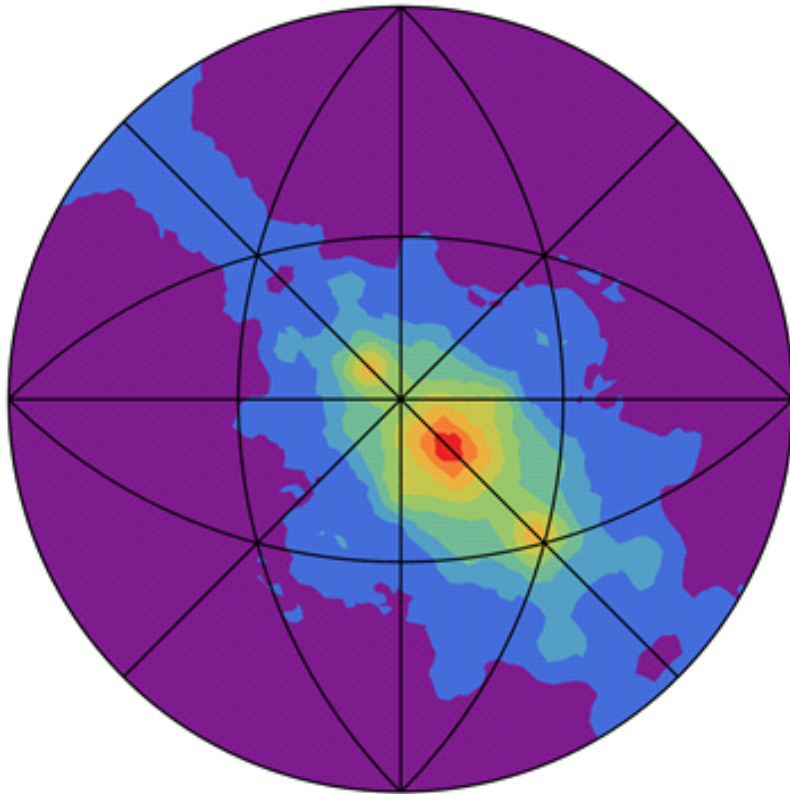
skręcone ●



Przekrój przez rozkład granic dla dezorientacji $\Sigma 9$ (39° ; $[110]$) dla stopu niklu
+ katalog granic o specjalnej geometrii



Analiza błędów

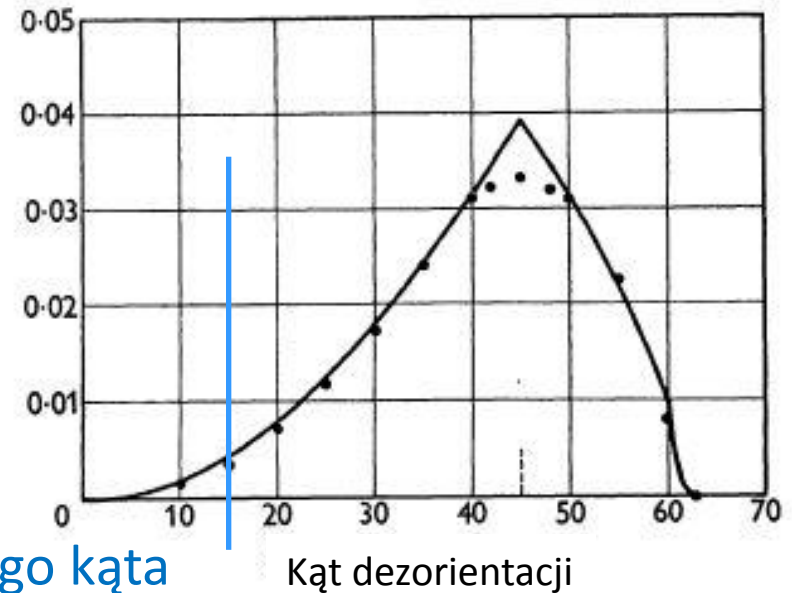


Przekrój przez rozkład granic dla dezorientacji $\Sigma 3$ (39° ; $[110]$) dla stopu niklu
+ oszacowanie błędów

Rozkład MacKenzie'go

3. Ile granic każdego z typów jest w danej próbce?

Rozkład MacKenzie'go oparty jest tylko o jeden z pięciu parametrów

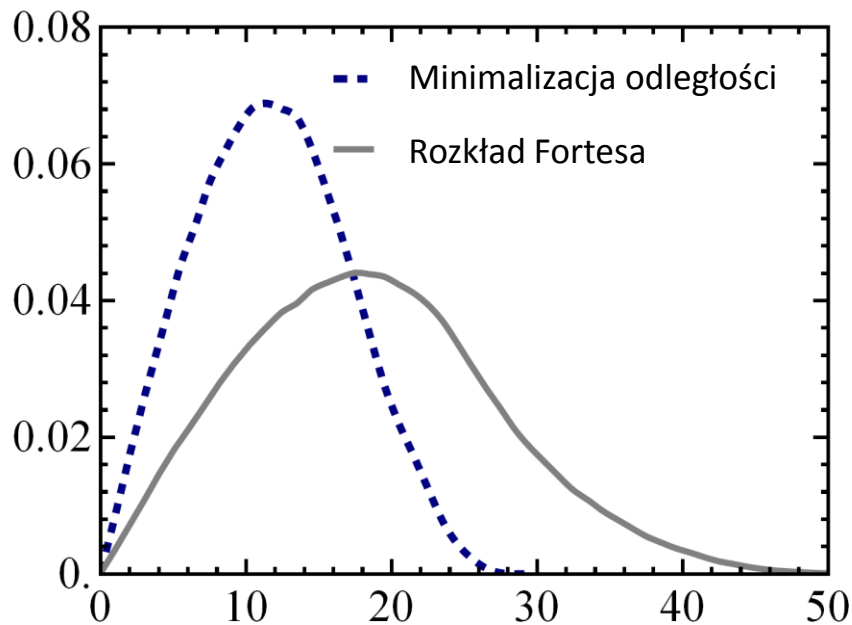


Granice niskiego kąta

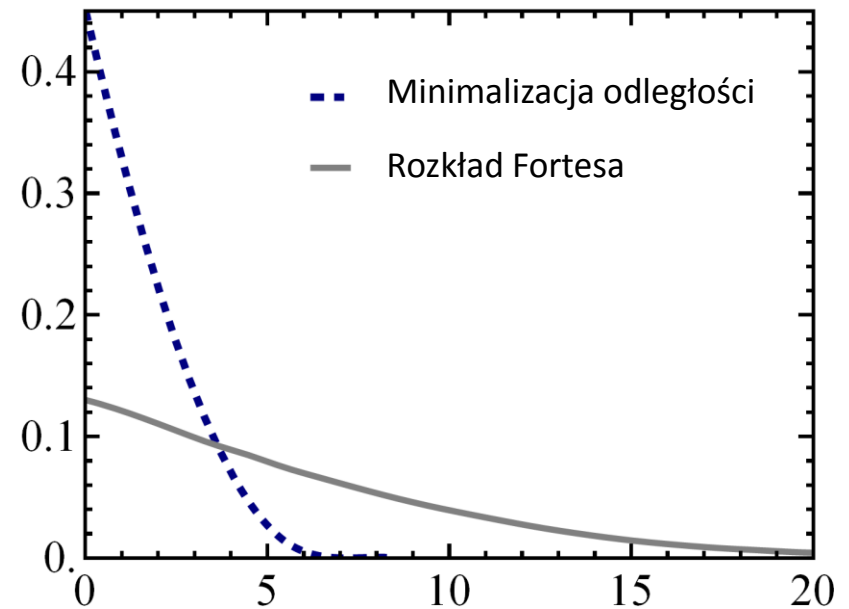
Kąt dezorientacji

Źródło: <http://www.wikipedia.org>

Rozkłady prawdopodobieństwa „odległości” do najbliższej granicy charakterystycznej



„Odległość” do granicy skrzyęconej



„Odległość” do granicy nachylonej

3. Ile granic każdego z typów jest w danej próbce?



Częstości występowania granic charakterystycznych w zbiorze losowych granic [%]

Symetria regularna

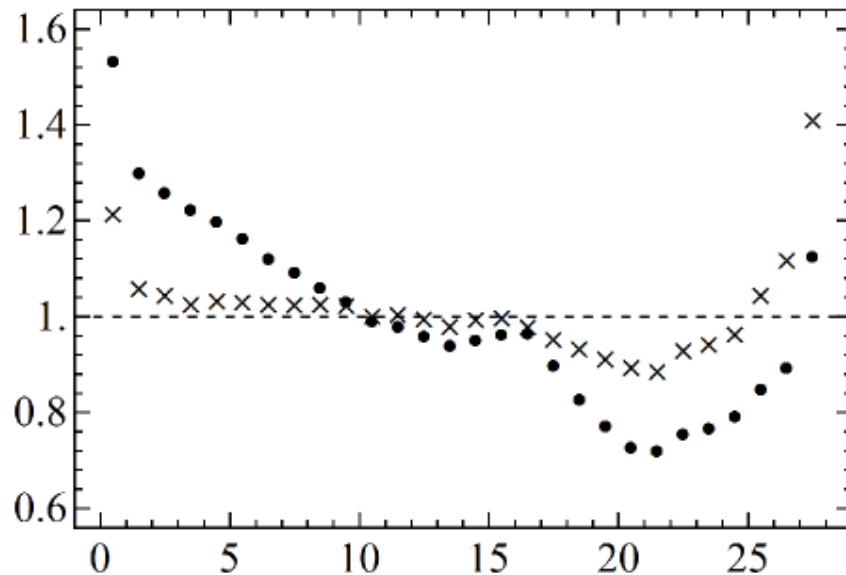
Tol.	Nachylone	Skręcone	Symetryczne	Nachylone(180°)
1°	39.2	0.4	0.002	0.3
2°	66.4	1.7	0.02	1.3
3°	84.0	3.9	0.07	2.9
5°	98.5	10.7	0.33	8.0

Symetria heksagonalna

Tol.	Nachylone	Skręcone	Symetryczne	Nachylone(180°)
1°	21.2	0.2	0.002	0.28
2°	39.2	0.9	0.01	0.7
3°	54.3	2.0	0.03	1.5
5°	76.8	5.4	0,16	4.0

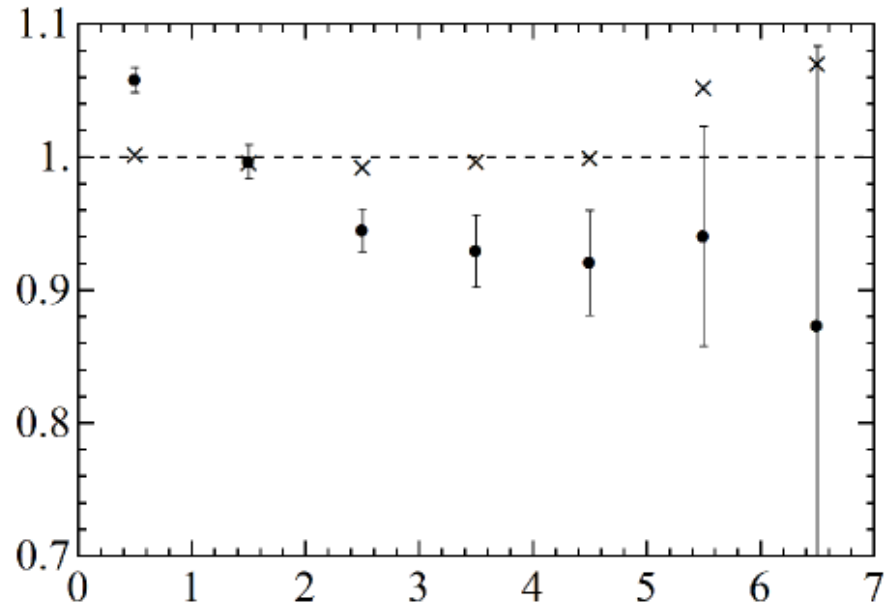
Granice skręcone i nachylone w stopie niklu

[MRD]



„Odległość” do granicy skręconej

[MRD]



„Odległość” do granicy nachylonej

Krzyżyki odpowiadają danym, z których usunięto granice bliźniacze

Podsumowanie

■ Przy użyciu rozwijanych metod można badać zawartość granic w materiałach polikrystalicznych.

■ Opracowywane metody i algorytmy są systematycznie dokładane do tworzonego programu komputerowego.

■ Mając sprawne i wydajne narzędzia do geometrycznej charakteryzacji sieci granic ziaren można badać wpływ na konkretne właściwości materiałów.

