



Characteristics of materials structure by the X-ray diffraction IV **Crystallographic TEXTURE**



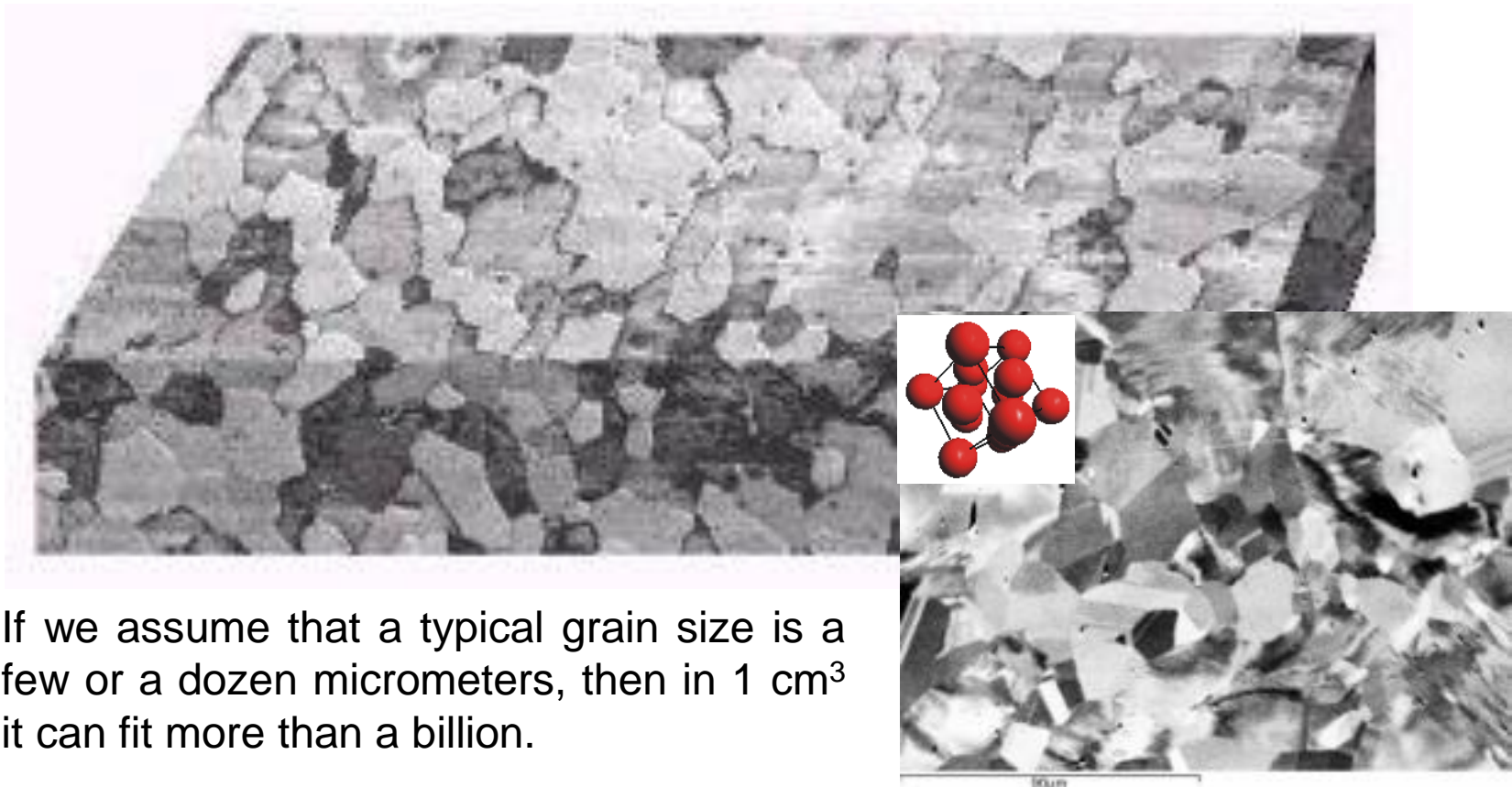
term: Texture

- printing (drukarska)
- **crystallographic (krystalograficzna)**
- metallographic (metalograficzna, morfologiczna)
- topographic (topograficzna, powierzchniowa)

Crystallographic orientation

In the world around us we find a variety of materials that are as natural as they are artificially manufactured. The vast majority of them are solid polycrystals, generally composed of a very large number of crystals called grains or crystallites. What distinguishes one grain from another (apart from their morphological characteristics) is its crystallographic orientation (hereinafter referred as orientation). The transition area between adjacent grains, where the distribution of atoms is much less pronounced than that of the crystal itself, is called the grain boundary. The grains (crystallites) of a polycrystalline material themselves may be treated as monocrystals with different orientation of the crystalline lattice in relation to an assumed external reference system, which we will call the sample reference system.

Crystallographic orientation



If we assume that a typical grain size is a few or a dozen micrometers, then in 1 cm^3 it can fit more than a billion.

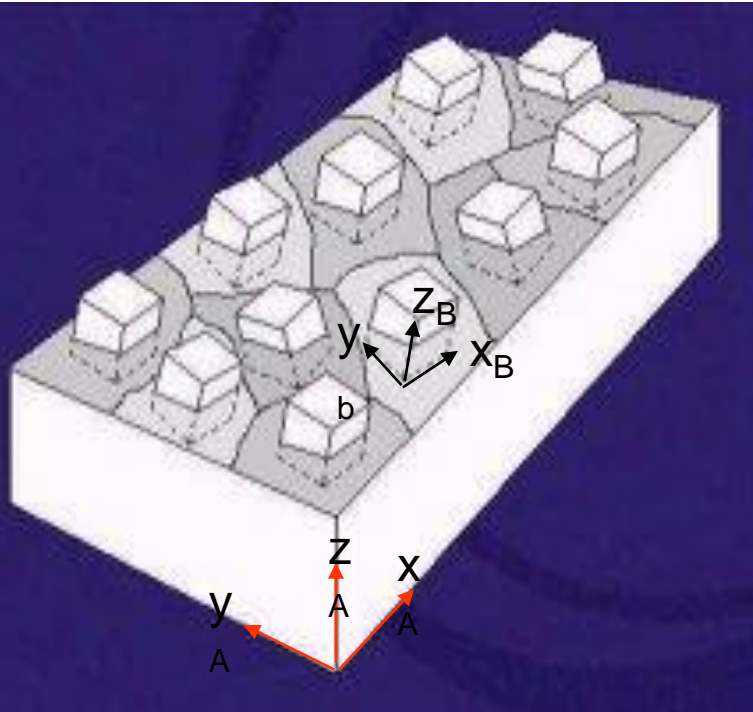
polycrystals \rightarrow polycrystalline aggregates.



Crystallographic orientation

Geometric model of the polycrystalline aggregate with marked K_A -sample reference system and K_B -sample reference system.

K. Sztwiertnia: *Orientacja krystalograficzna w badaniach mikrostruktury materiałów*, Polska Akademia Nauk, Instytut Metalurgii i Inżynierii materiałowej, ISBN 978-83-607 68 02 0, Kraków 2009, 1-98.



By crystallographic orientation at a point with coordinates x, y , we will understand a rotation or a set of rotations transforming the K_A sample reference system at the centre (x, y, z) to the K_B grain reference system.

$$K_B = g \cdot K_A$$

We assume that both reference systems have a common origin and are orthogonal and clockwise.



The natural parameters characterizing the orientation of one system in relation to another are directional cosines a_{ij} and the angle between the i-th axis of system B and the j-th axis of system A. The matrix containing directional cosines of system a_{ij} is a so-called orientation matrix g .

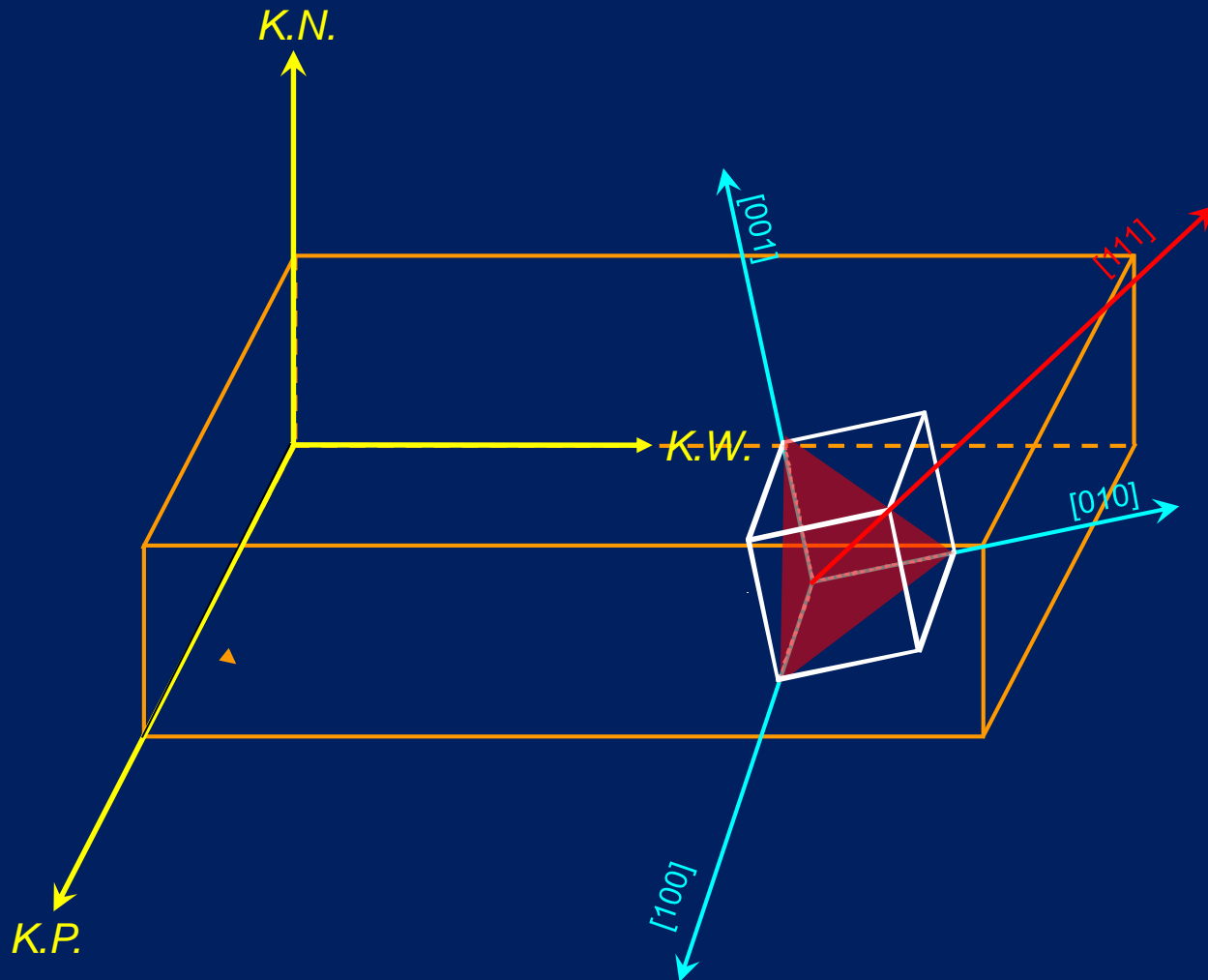
$$g = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

By means of the matrix g , any vector K from system B can be transformed into system A according to the formula:

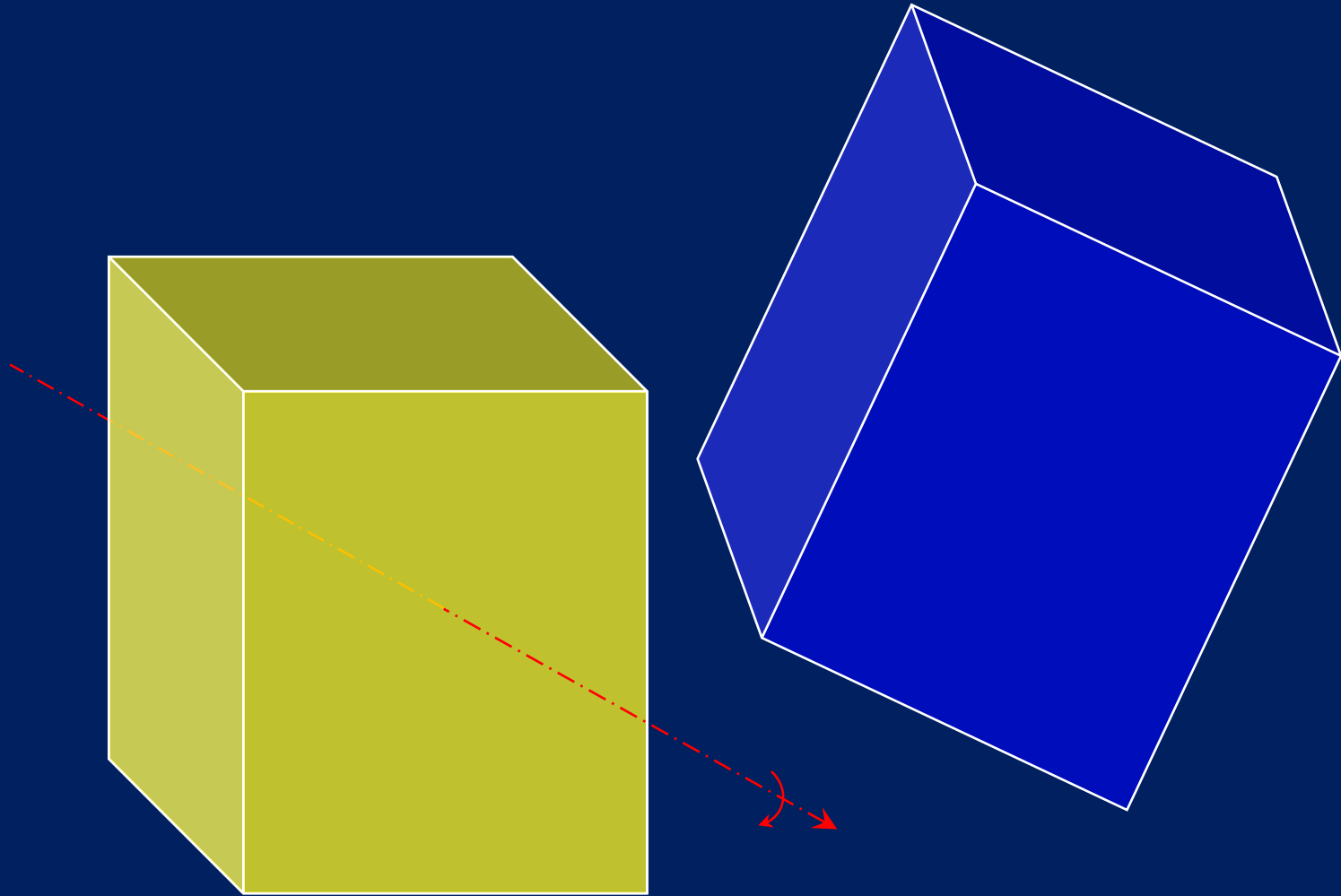
$$K_B = g \cdot K_A$$

where g must be the proper rotation.

The texture definition is based on a simple geometric model in which the sample and the crystal lattice are represented by rectangular reference systems, S and C, with a common origin, and the crystal orientation $g(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ is based on the position of the crystal lattice reference system C relative to that of sample S as described by the rotations of system S to be covered with arrangement C, according to the definition of Euler angles.

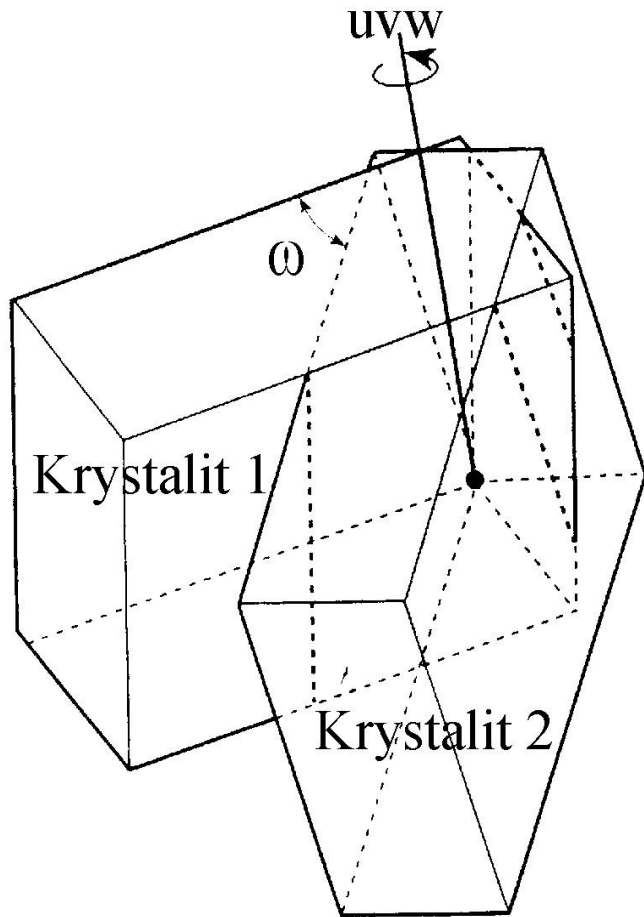


Orientation and misorientation





Orientation and misorientation



Disorientation between two crystals, i.e. the orientation of one crystal in relation to the other.

The crystal direction uvw (with the directional vector $\mathbf{r}(\theta, \psi)$ chosen in such a way that a rotation of ω in relation to it leads to a full alignment of the lattices can always be found in the reference system of one of the crystals.

Representation of the orientation

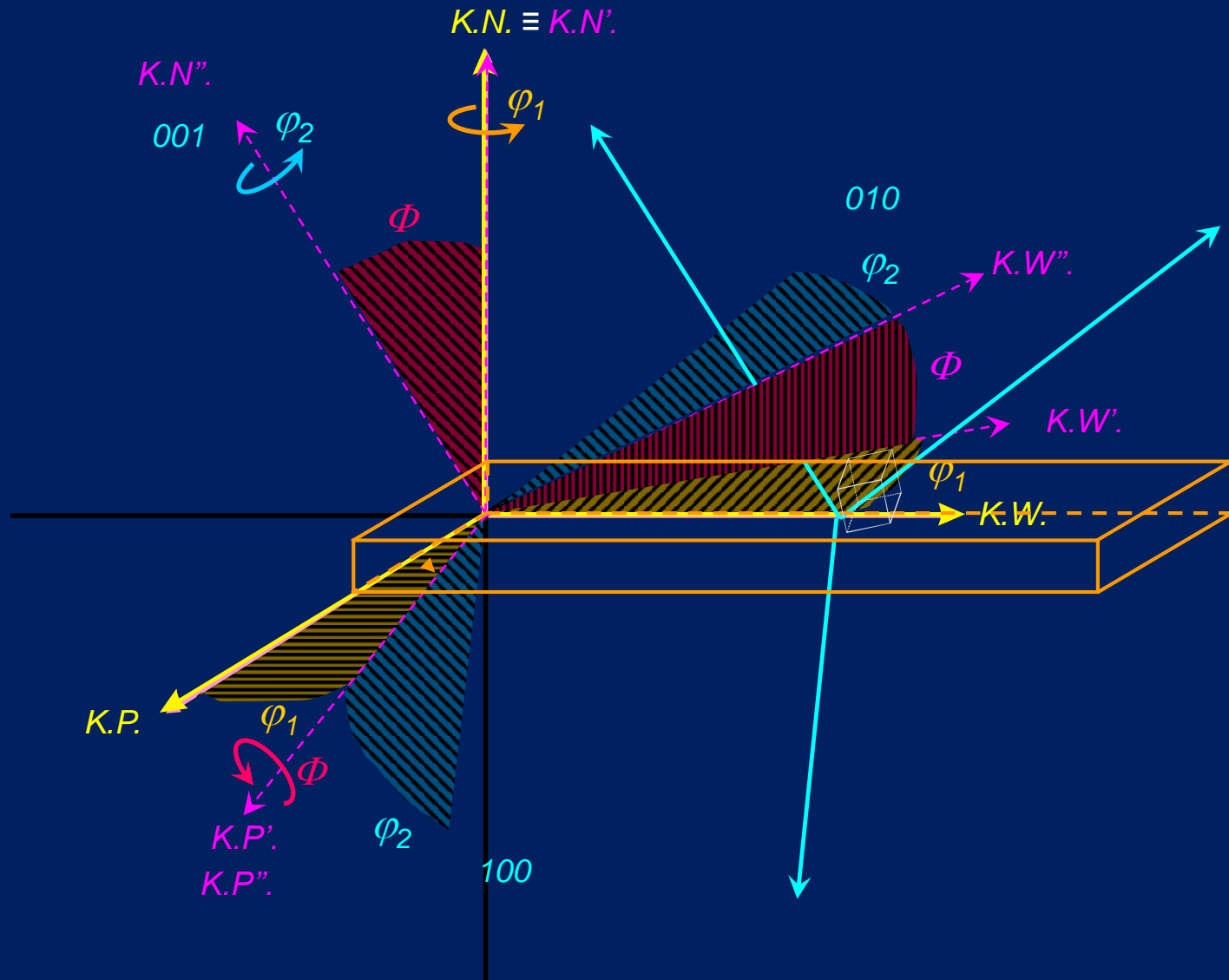
The parameters of the orientation description can be selected in many ways. For example, these can be: **parameters of axes and angles of rotation, Euler angles, Rodrigues parameters or quaternions.**

In order to present the texture of the material, i.e. the distribution of the orientation of polycrystalline grains, Euler angles φ_1 , Φ , φ_2 are traditionally used. There are several conventions of presenting these angles: according to Bunge, Roe, Canova or Kocks. We adopt the orientations in Euler's angles in the Bunge convention.

In order to present the texture of the material, i.e. the (not random) distribution of the orientations of the polycrystal, Euler angles φ_1 , Φ , φ_2 are traditionally used.

Now let's use Euler angles to describe the orientation of a cubic metal crystal lattice relative to the external reference system of the rolled sample. The vectors that define the crystal B system in this case are the three vectors of translation parallel to the edge of the unit cell [100], [010] and [001]. Sample reference system A is usually determined by the symmetry of the material formation process, and the vectors defining the sample system are parallel to the symmetry axis of the sample. For rolled materials the following are taken into account: X = RD - rolling direction, Y = TD - transverse direction, Z = ND - normal direction. Euler angles (according to Bunge's convention) define three successive rotations of φ_1 , Φ , φ_2 , which reduce the sample arrangement defined by the three axes RD, TD, ND to the crystal arrangement defined by the three lattice vectors [100], [010] and [001],

Definition of Euler angles $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$





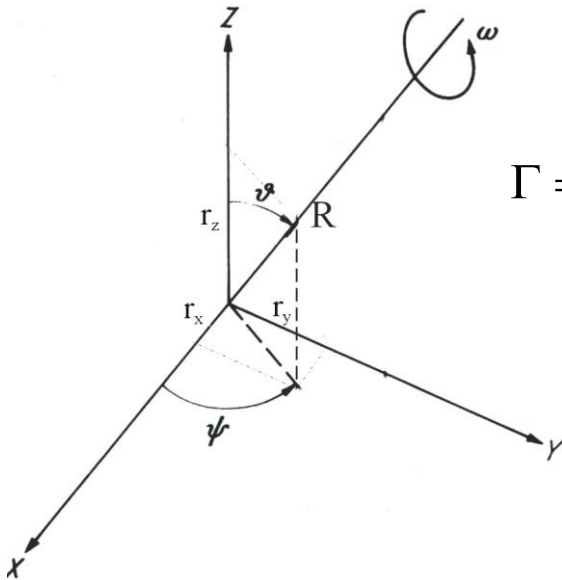
With the crystalline orientation in the form of Euler angles φ_1 , Φ , φ_2 , the orientation matrix g can be determined:

$$g = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi & \sin \varphi_2 \sin \phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi & \cos \varphi_2 \sin \phi \\ \sin \varphi_1 \sin \phi & -\cos \varphi_1 \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$

The elements of the matrix $g=[a_{ij}]$ are of course directional cosines connecting the crystalline system with that of the sample.



Poprzez obrót wokół osi \mathbf{r} o kąt ω układ odniesienia jednego krystalitu jest transformowany do układu drugiego krystalitu. Oś obrotu może być przedstawiona, jako wektor jednostkowy o składowych r_x, r_y, r_z lub poprzez sferyczne współrzędne biegunowe ϑ, ψ . Macierzowa reprezentacja różnicy orientacji $\Gamma(\omega, \mathbf{r})$ (lub $\Gamma(\omega, \vartheta, \psi)$) jest następująca:



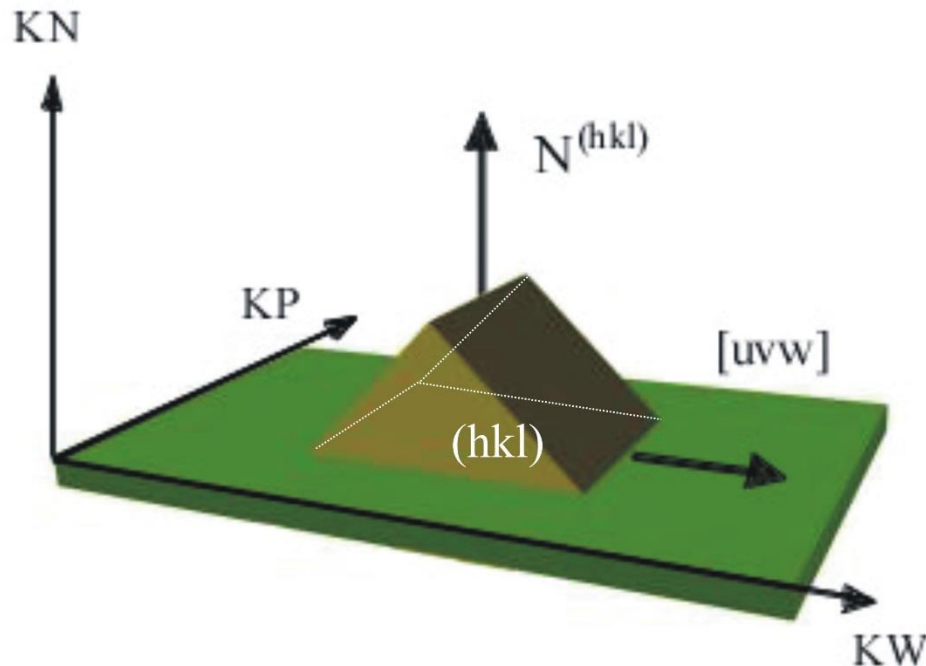
$$\Gamma = \begin{pmatrix} (1 - r_x^2) \cdot \cos \omega + r_x^2 & r_x \cdot r_y \cdot c + r_z \cdot \sin \omega & r_x \cdot r_z \cdot c - r_y \cdot \sin \omega \\ r_x \cdot r_y \cdot c - r_z \cdot \sin \omega & (1 - r_y^2) \cdot \cos \omega + r_y^2 & r_y \cdot r_z \cdot c + r_x \cdot \sin \omega \\ r_x \cdot r_z \cdot c + r_y \cdot \sin \omega & r_y \cdot r_z \cdot c - r_x \cdot \sin \omega & (1 - r_z^2) \cdot \cos \omega + r_z^2 \end{pmatrix}$$

gdzie: $r_x = \cos \psi \cdot \sin \vartheta$, $r_y = \sin \psi \cdot \sin \vartheta$, $r_z = \cos \vartheta$, $c = 1 - \cos \omega$.

W przypadku materiału bez symetrii krystalograficznej wszystkie fizycznie rozróżnialne różnice orientacji można opisać w domenie asymetrycznej pełnej przestrzeni osi i kąta obrotu zdefiniowanej przez $0 \leq \omega \leq \pi$, $0 \leq \vartheta \leq \pi$, $0 \leq \psi \leq 2\pi$.



There is an old method, traditionally used to determine crystalline orientation, consisting in giving Miller indices of crystallographic plane (hkl) parallel to the plane X, Y of the arrangement of the sample (which is very often the plane of the plate RD, TD) and indices of crystallographic direction $[uvw]$ parallel to the direction X (or RD).



$$\operatorname{tg} \phi \cos \phi_2 = \frac{k}{l}$$

$$\operatorname{tg} \phi_2 = \frac{h}{k}$$

$$\cos \phi \operatorname{tg} \phi_1 = \frac{lw}{ku - hv}$$

Definition of crystallographic orientation with Miller $(hkl)[uvw]$ indices, relations between indices and Euler angles for crystals with cubic symmetry were also shown.

Crystallographic indicators

$g = \{hkl\}\langle uvw \rangle$
 (6 parameters)

Orientation matrix

$g = [g_{ij}]$
 (9 parameters)

Axis and angle of rotation

$g = n(\nu, \psi), \omega$
 (3 Parameters)

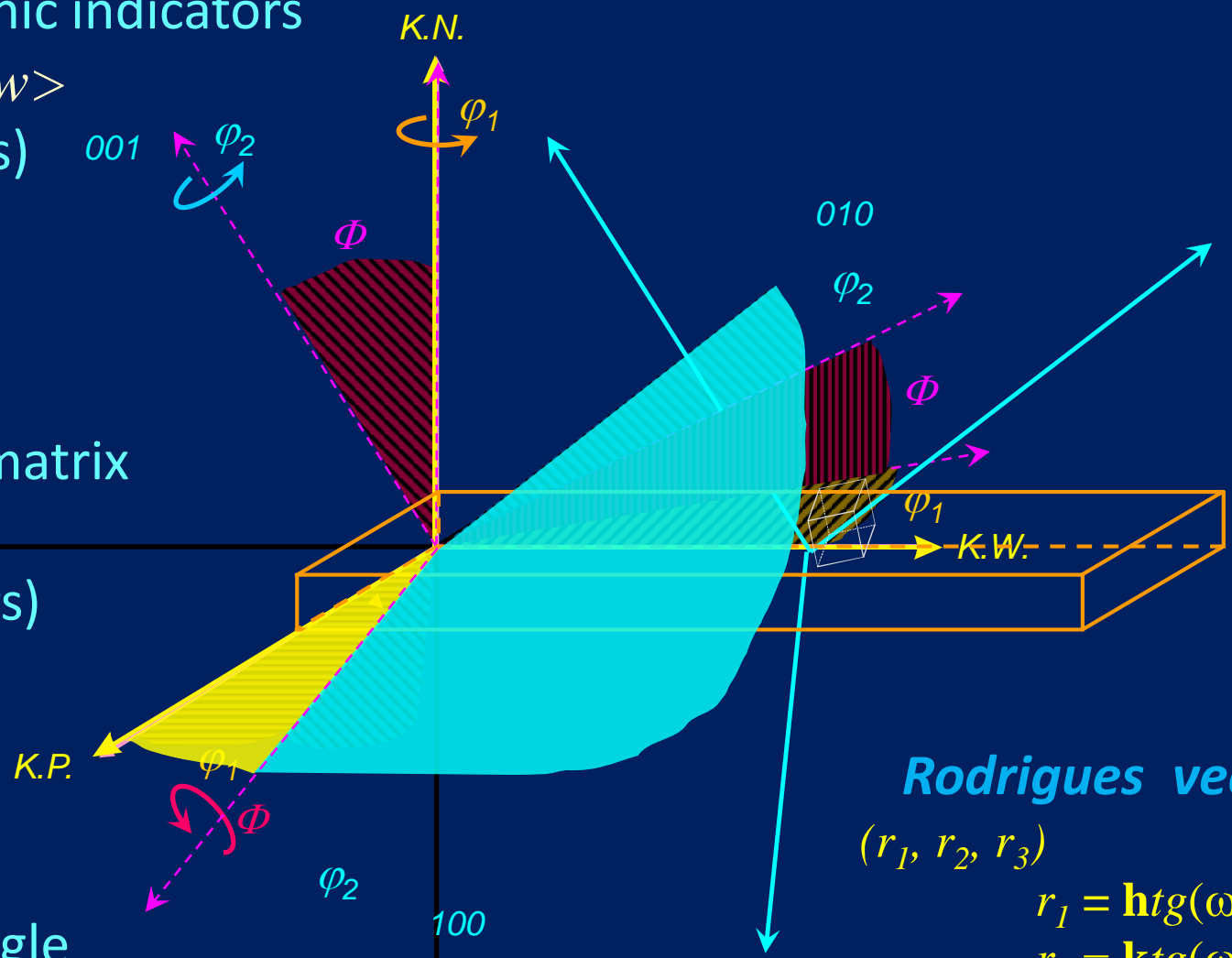
Euler angles $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$

(Non-linear, has a peculiar point
 - for $\Phi = 0$ only the sum $\varphi_1 + \varphi_2$ is known - irregular asymmetric domains
 (3 Parameters)

Rodrigues vectors

(r_1, r_2, r_3)
 $r_1 = \mathbf{h}tg(\omega/2)$
 $r_2 = \mathbf{k}tg(\omega/2)$
 $r_3 = \mathbf{l}tg(\omega/2)$

Non-linear, asymmetric domains with smooth walls
 (3 Parameters)



Rozkład orientacji krystalograficznych - tekstura krystalograficzna.

Z orientacją krystalograficzną wiąże się pojęcie tekstury krystalograficznej, która jest jedną z ważniejszych charakterystyk mikrostruktury materiału polikrystalicznego. Jeśli rozkład orientacji krystalograficznych poszczególnych ziarn w przestrzeni orientacji dla określonego materiału nie jest przypadkowy mówimy, że posiada on teksturę krystalograficzną (dalej w skrócie teksturę). W większości przypadków orientacje ziarn mają tendencję do grupowania się wokół charakterystycznych, typowych dla materiału i procesu przetwarzania, położeń w przestrzeni orientacji, które nazywamy składowymi tekstury. W przypadkach (trudnych do zrealizowania, a przez to dość rzadkich), kiedy rozkład orientacji sieci (miliardów) ziarn jest zupełnie przypadkowy mówimy, że materiał tekstury nie ma.

Pełną informacja o teksturze jest zawarta w tzw. funkcji rozkładu orientacji $f(g)$, która definiujemy następująco:

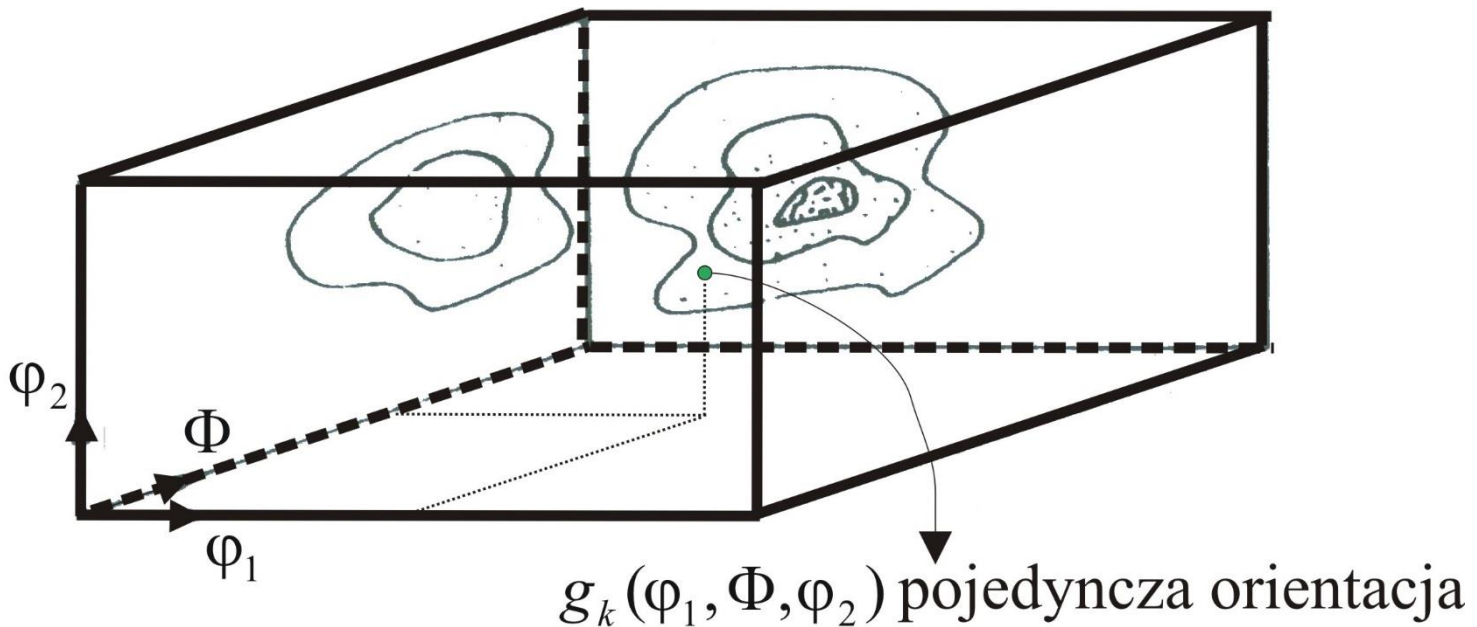
$$\frac{dV}{V} = f(g)dg$$

gdzie $\frac{dV}{V}$ jest udziałem objętościowym ziarn, których orientacje zawierają się w przedziale $(g, g + dg)$.

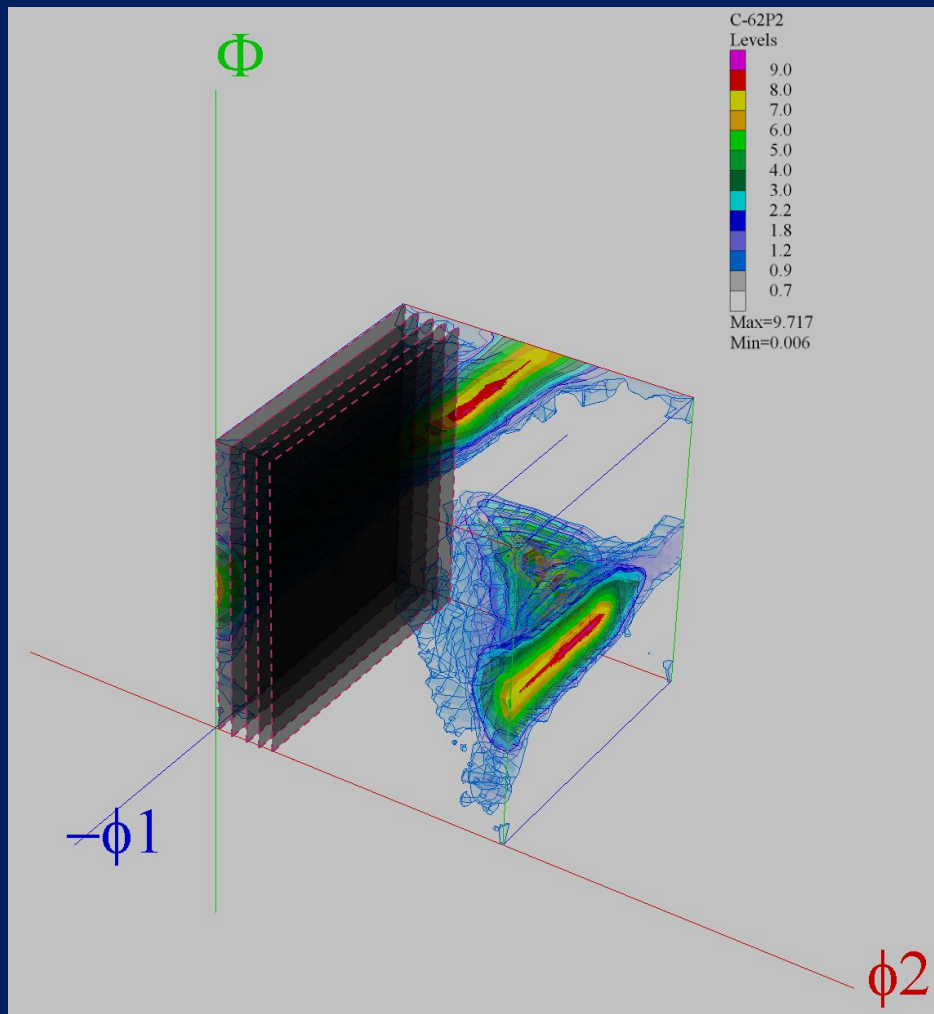
Jeśli założymy, że typowy rozmiar ziarna to kilka lub kilkanaście mikrometrów to w 1 cm^3 może się ich mieścić ponad miliard.



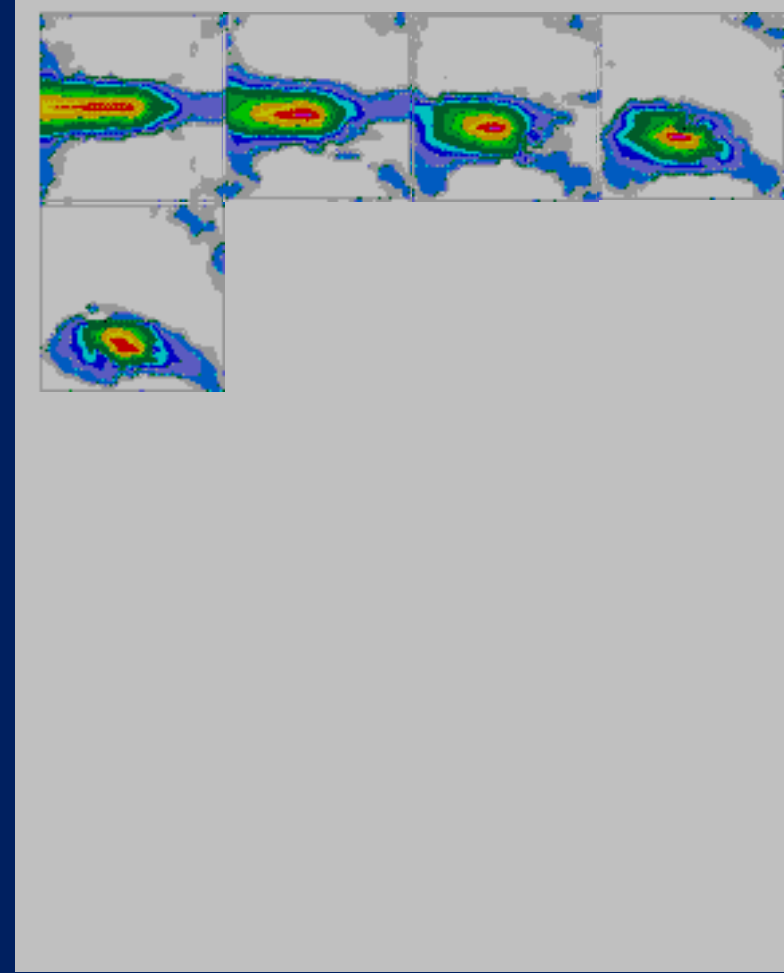
Dowolną orientację krystalitu można przedstawić jako punkt w trójwymiarowej przestrzeni orientacji np. kątów Eulera (lub innych parametrów określających orientację), przy czym w ogólnym przypadku należy uwzględnić pełny zakres ich zmienności, który dla kątów Eulera wynosi: $0 \leq \varphi_1 < 2\pi, 0 \leq \Phi \leq \pi, 0 \leq \varphi_2 < 2\pi$



Schematyczne przedstawienie przestrzeni kątów Euler'a jako przestrzeni orientacji.



3-D ODFs for cold rolled Cu-sheet to 62%



2-D sections of the ODFs for cold rolled Cu-sheet to 62%

Crystallographic texture is a **deformation-sensitive** characteristics of polycrystalline material



Crystallographic texture

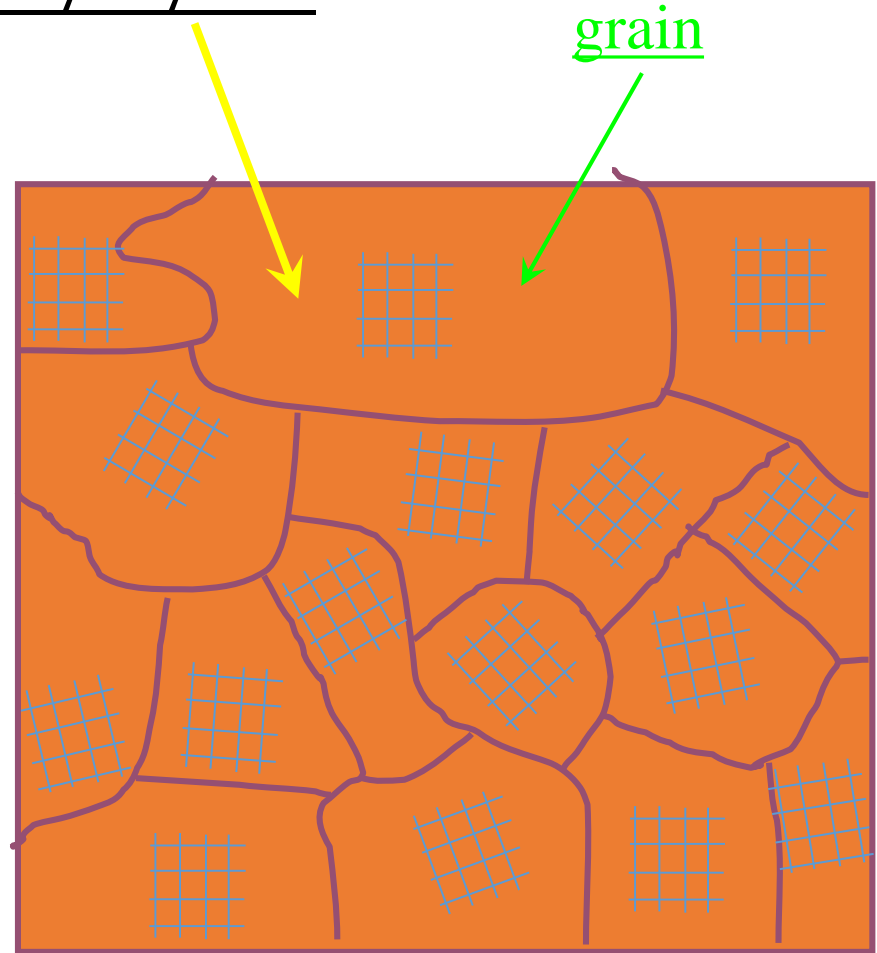
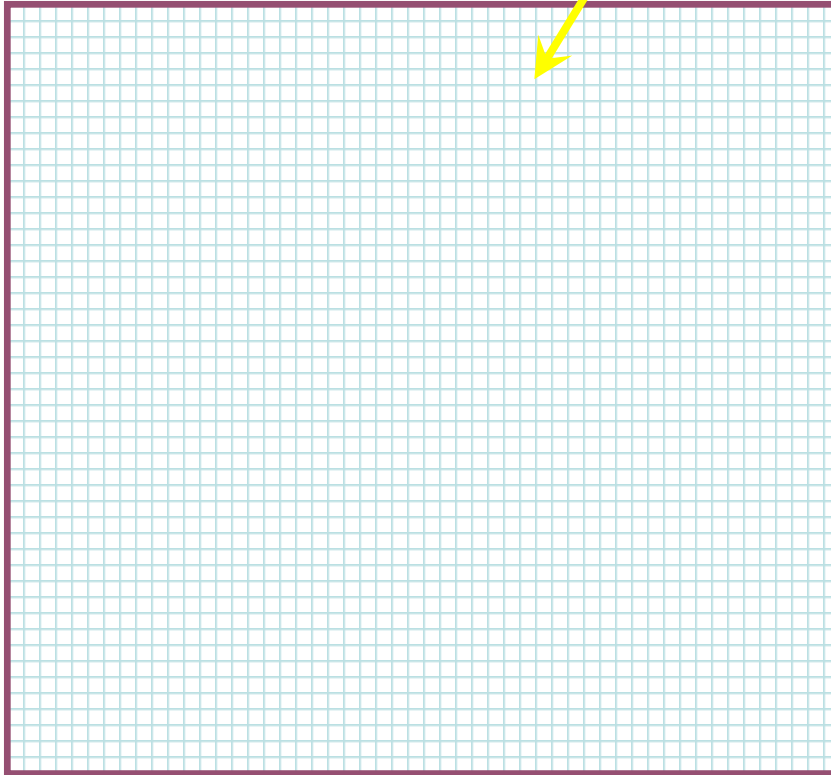
it is a statistical feature of a crystalline material, manifested by the ordering of spatial orientation of individual crystals (grains, sub-areas, particles).

The monocrystals show the highest degree of such order, while the lowest one can be attributed to an unformed powders.

In practice, it is difficult to identify polycrystalline material that does not exhibit texture, i.e. is characterised by random distribution of orientation.

The crystallographic texture defined in such a way corresponds to the word "**texture**" used in the further part of the lecture.

Singlecrystal polycrystal



Typical sizes of grains found in polycrystalline metals and alloys are between 0,1 and 100 μm .

Examples of textures (Distinguished orientation):

- Cold-drawn wire - individual grains are oriented in such a way that the same crystallographic direction is parallel, or almost parallel, to the wire axis in most grains.
- Cold rolled sheet - most of the grains have a certain plane parallel to the sheet metal surface and a certain direction is parallel to the direction of rolling.



Texture can also be present in:

- Castings,
- Coatings and surface layers applied by various techniques: (electrochemical, laser, chemical, etc.)
- Rocks,
- Artificial or natural fibres,
- Bones.

The effect of texture is **the anisotropy** of the macroscopic properties of the materials!

The texture can be

- **Unwanted**, e.g. for deep drawing of sheet metal, where metal should flow evenly in all directions, but this is counteracted by anisotropy of plasticity.
- **Desirable**, e.g. in transformer sheets subject to repeated cycles of magnetization and demagnetization during operation, which requires a small magnetic coercivity field of the material in the direction of the applied field.

Unfortunately, the orientation distribution function (ODF) cannot be determined directly from experimental data. A traditional and, in a sense, natural way of measuring and presenting texture is by means of polar figures, which are its two-dimensional projections. Polar figures can be determined experimentally by measuring the distribution of intensity of X-rays (or neutrons) reflections from specific crystallographic planes. **It should be remembered that while any polar figure can be unambiguously reproduced from the texture, the measured polar figures, as two-dimensional distributions, must not contain full information about the three-dimensional orientation distribution.**

Searching for grain orientation distribution in textured material

Texture measurement

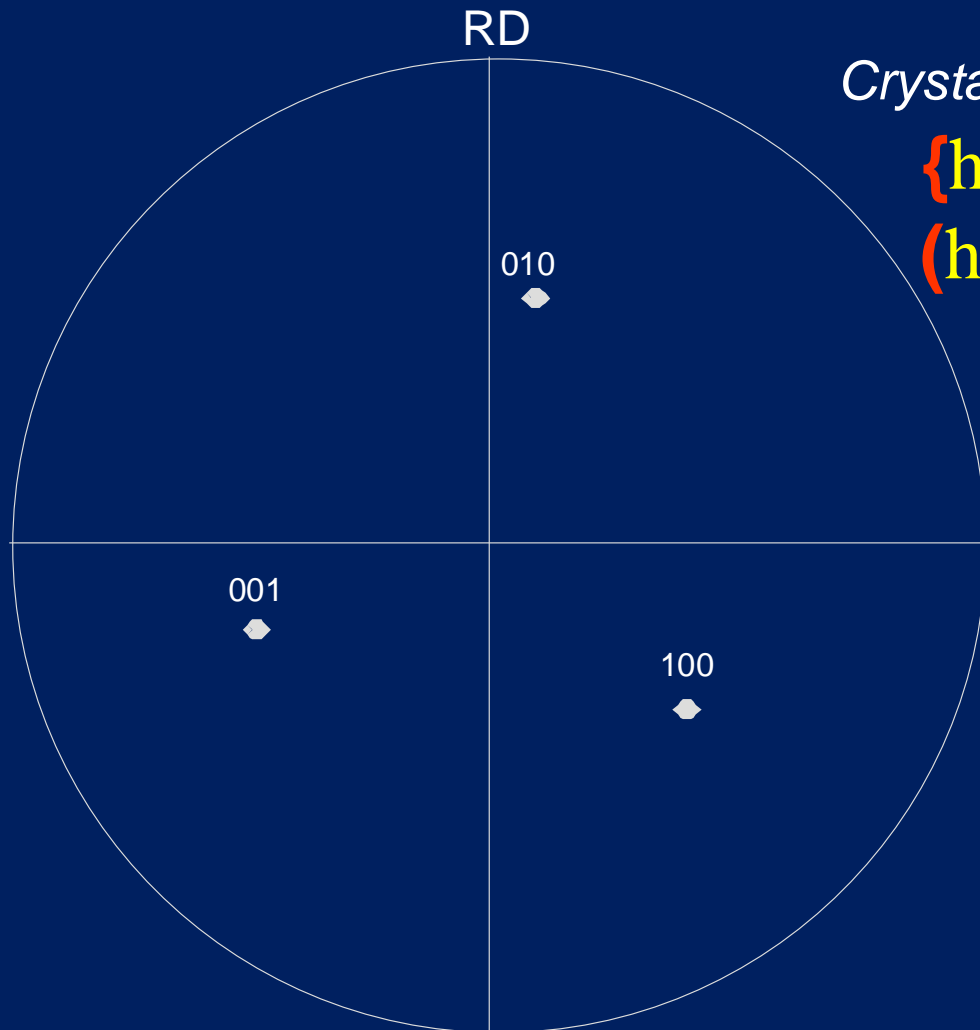
Searching for an orientation distribution of a specific lattice plane family {hkl} selected with Bragg's law

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Pole figure {hkl}

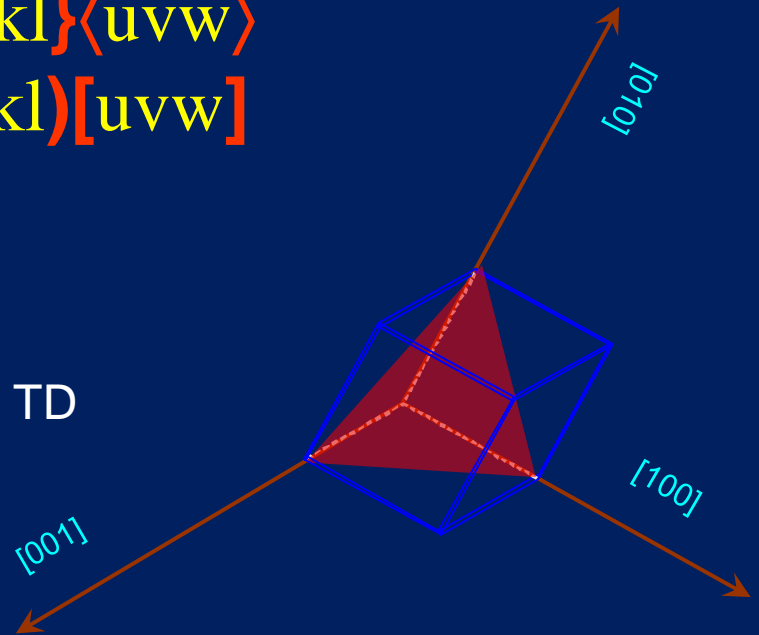
distribution of plane pole density {hkl} in the plane of stereographic projection (of the sample surface)

The model on which the texture definition is based has its experimental equivalent. The results of texture measurements are usually presented on a pole figure. The pole figure of the selected lattice planes $\{hkl\}$ of the sample (system S) shows their poles in a stereographic projection, which determine the position of the crystal reference system C in relation to the reference system of sample S.

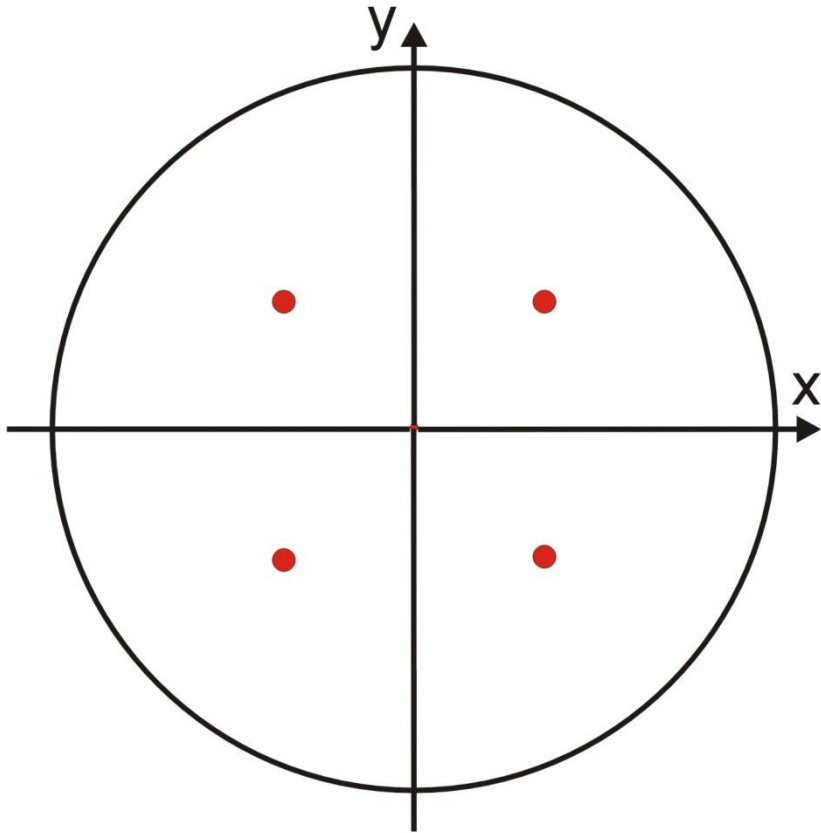


Crystallographic orientation determination:

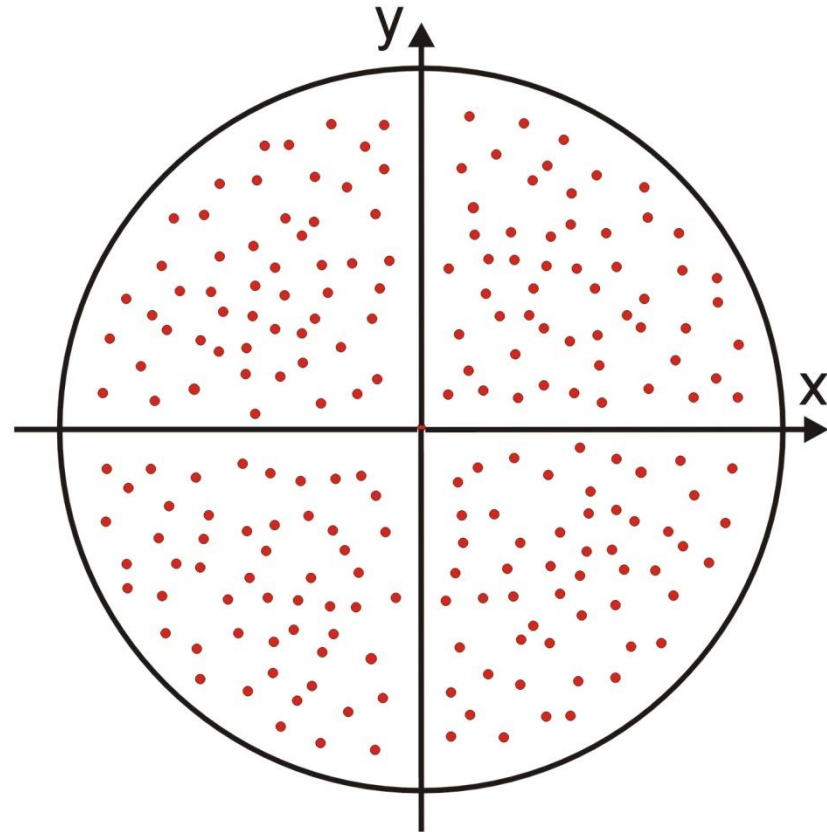
$$\{hkl\}\langle uvw \rangle$$
$$(hkl)[uvw]$$



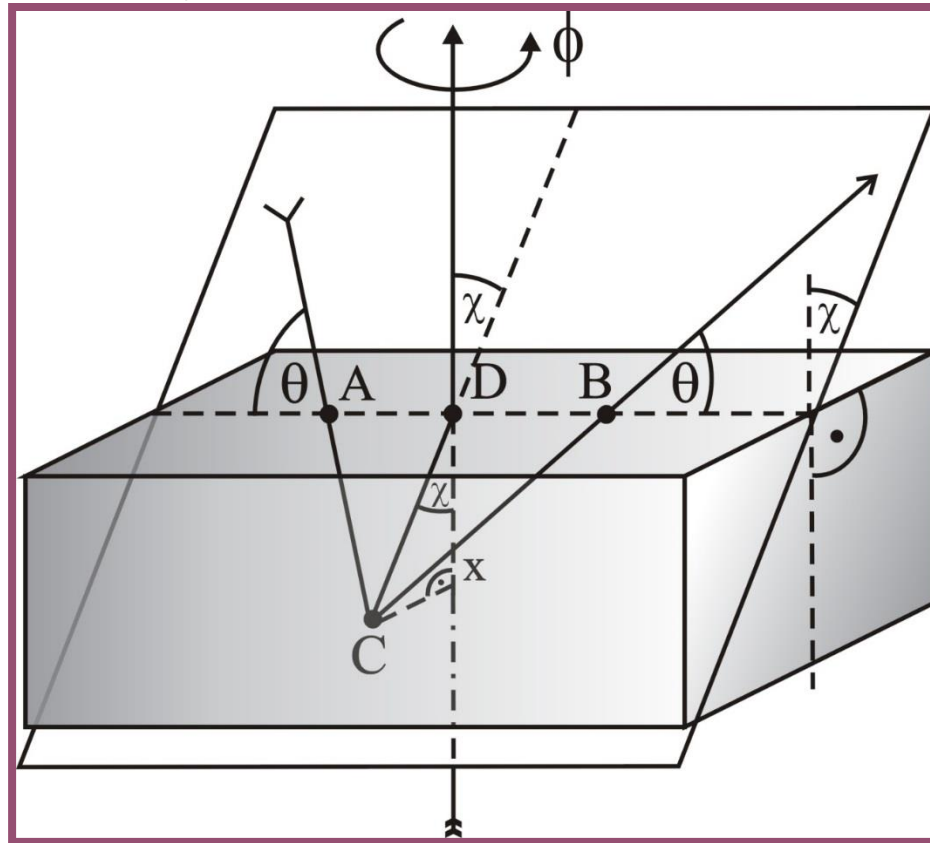
polycrystal

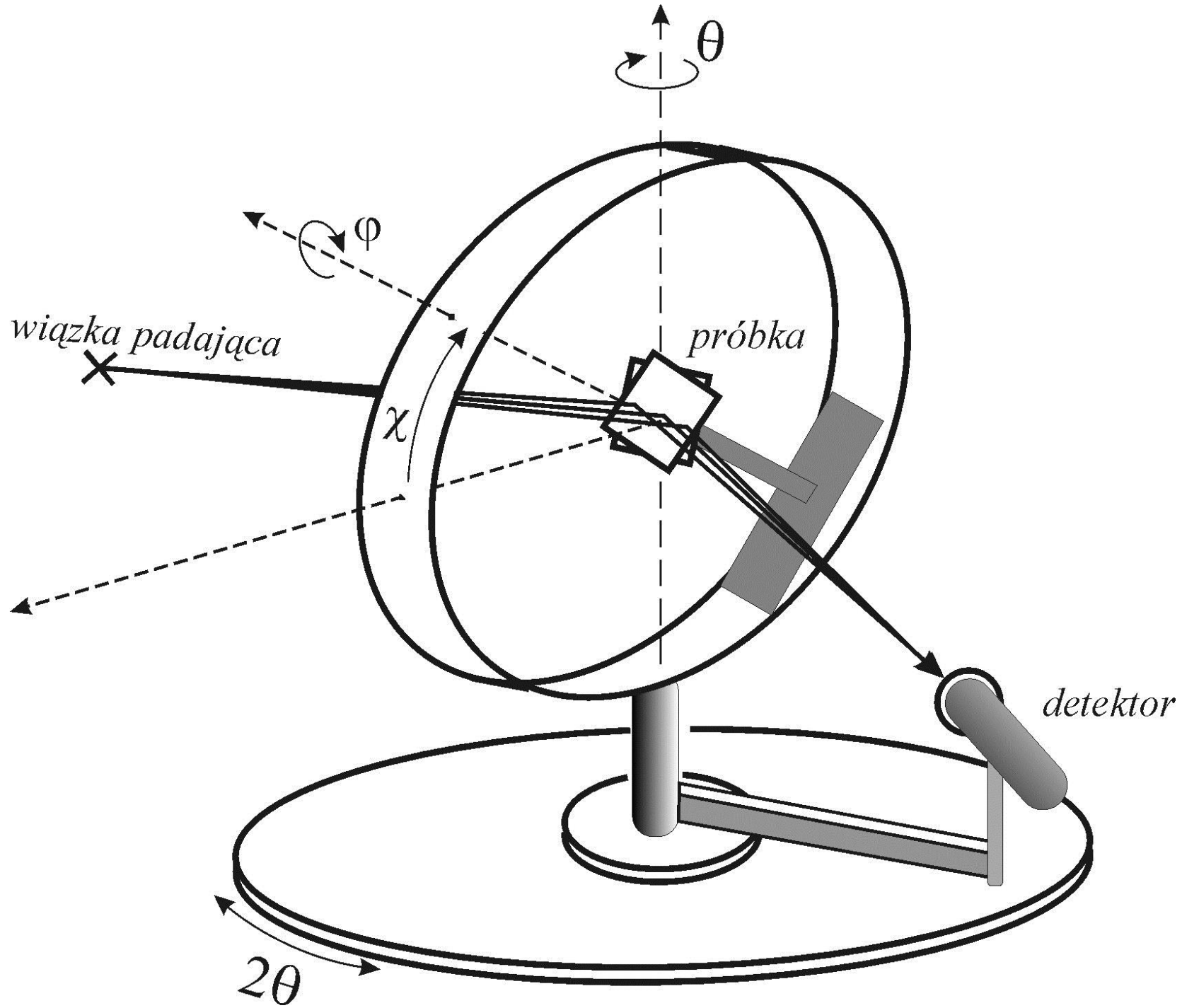


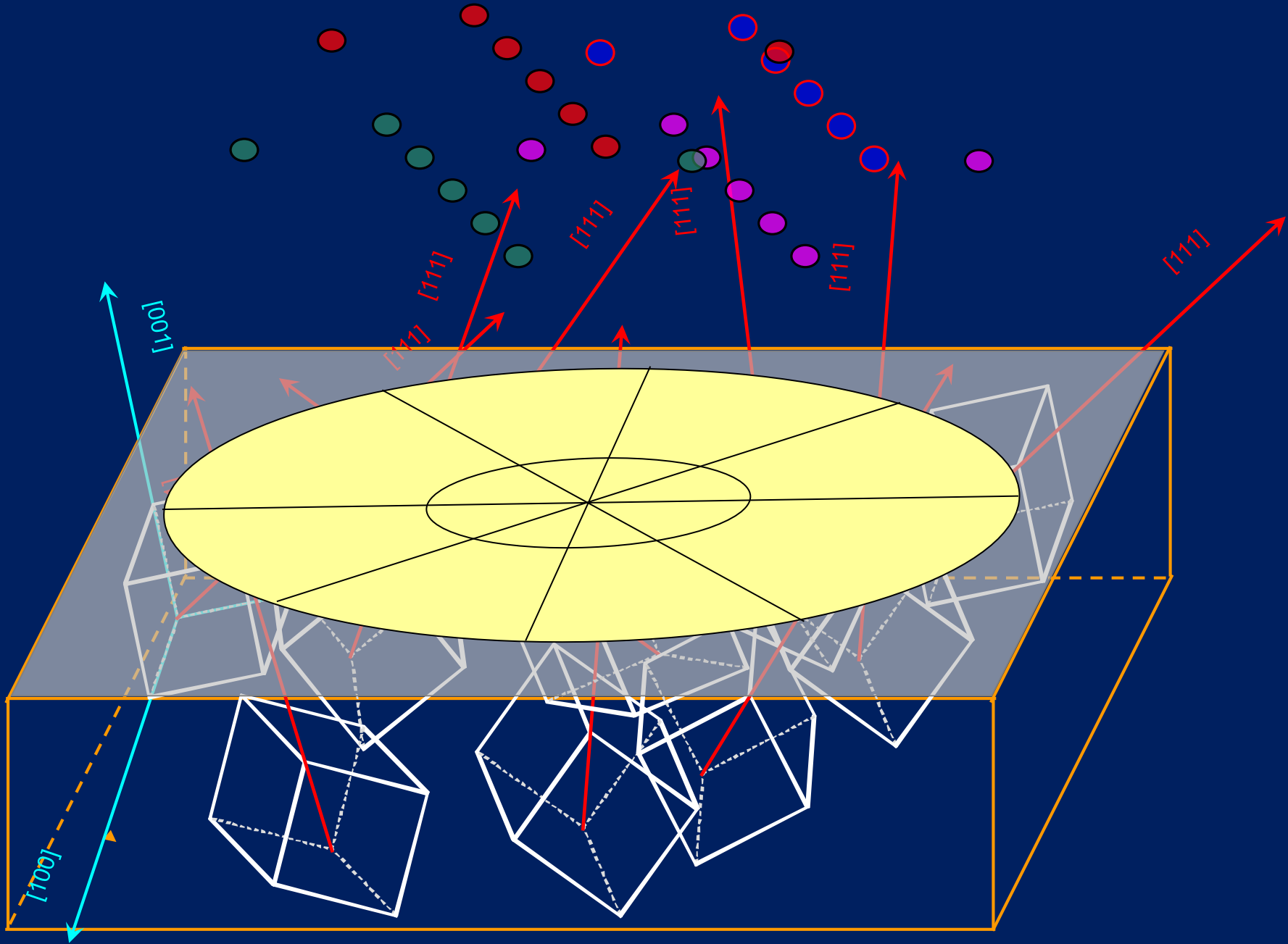
monocrystal

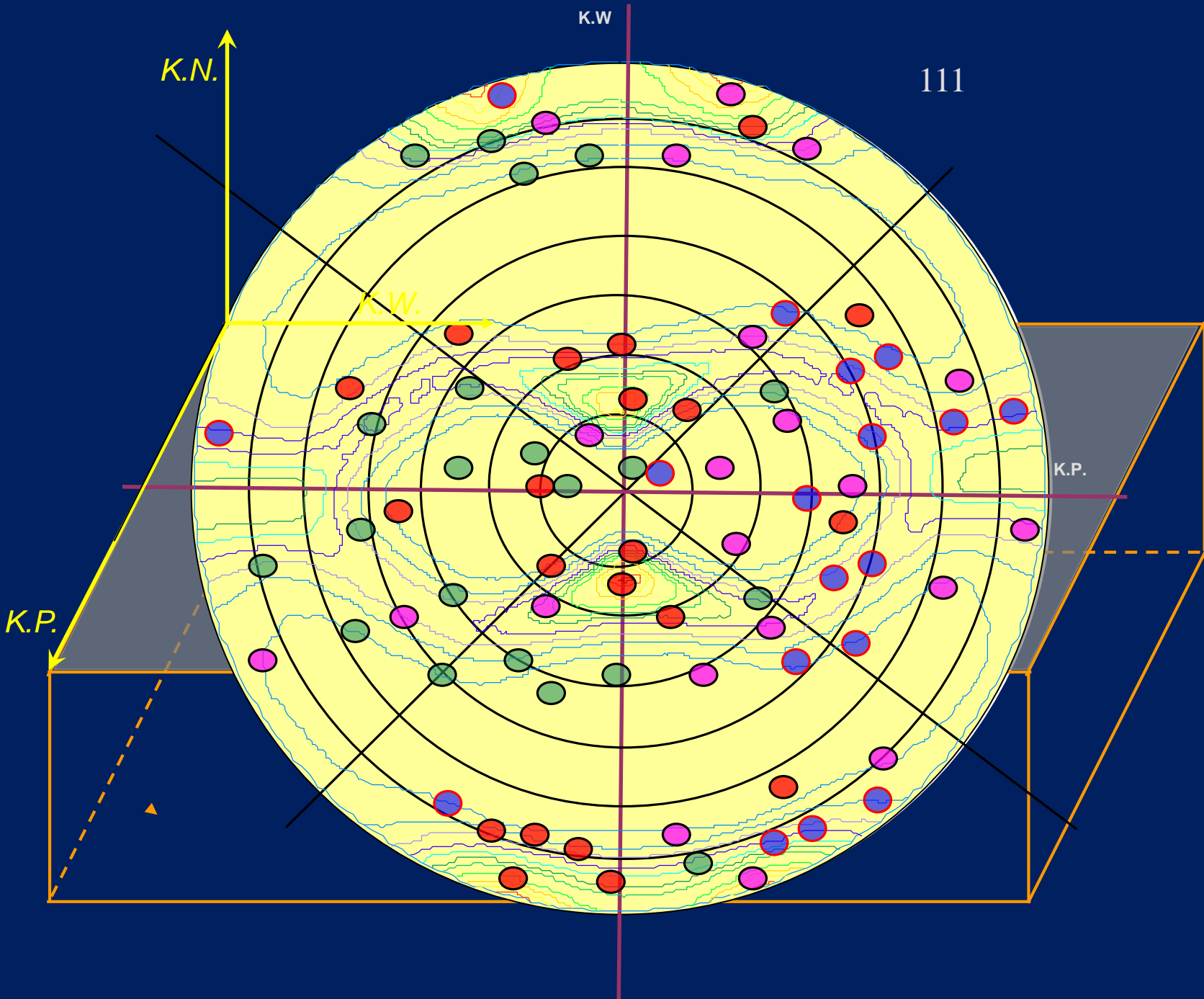


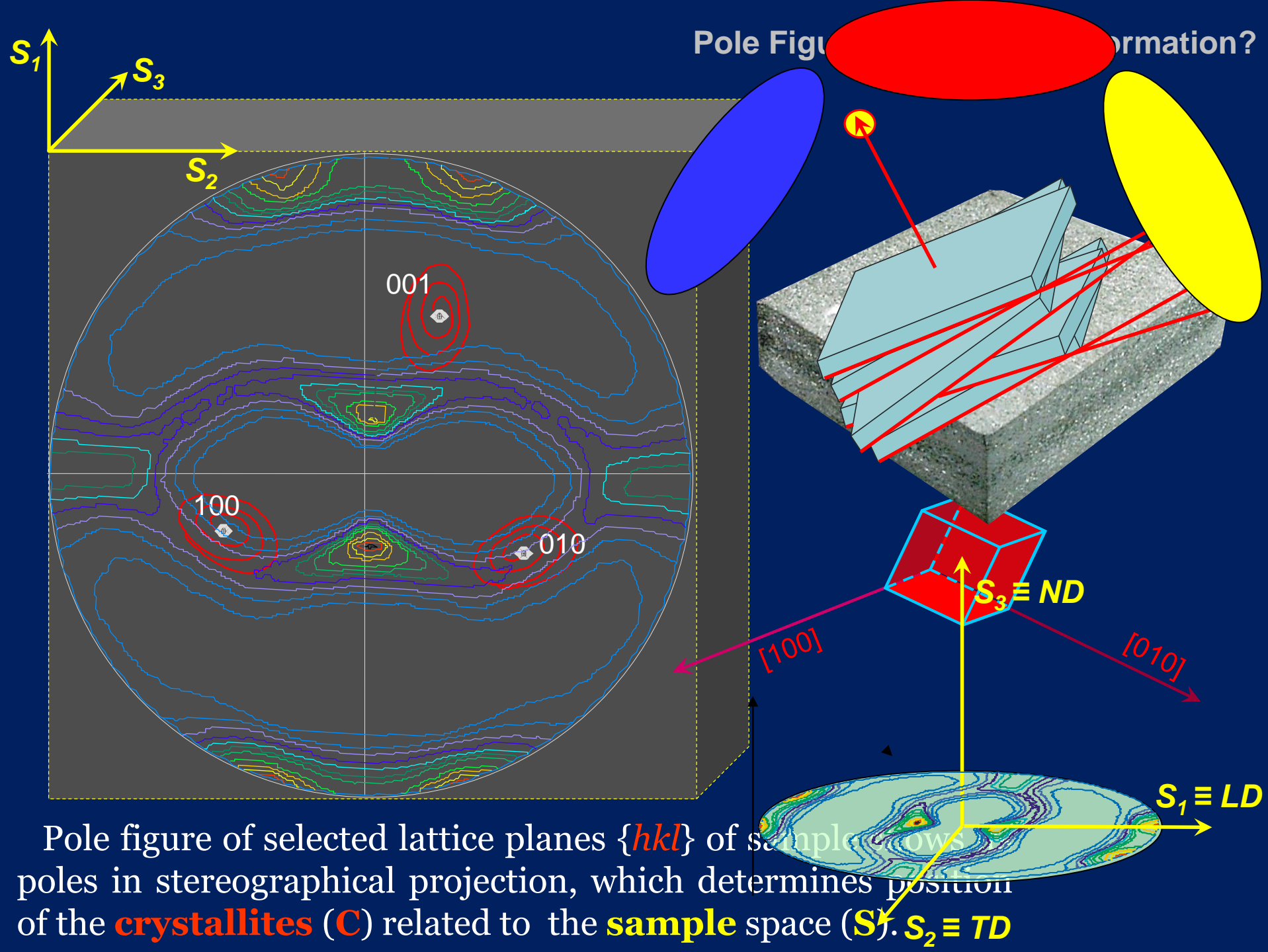
After setting the angle θ for a specific plane family $\{hkl\}$, we manoeuvre the goniometric angles χ , φ so as to enable the diffraction of the primary beam from these planes in as many grains as possible (crystallites).







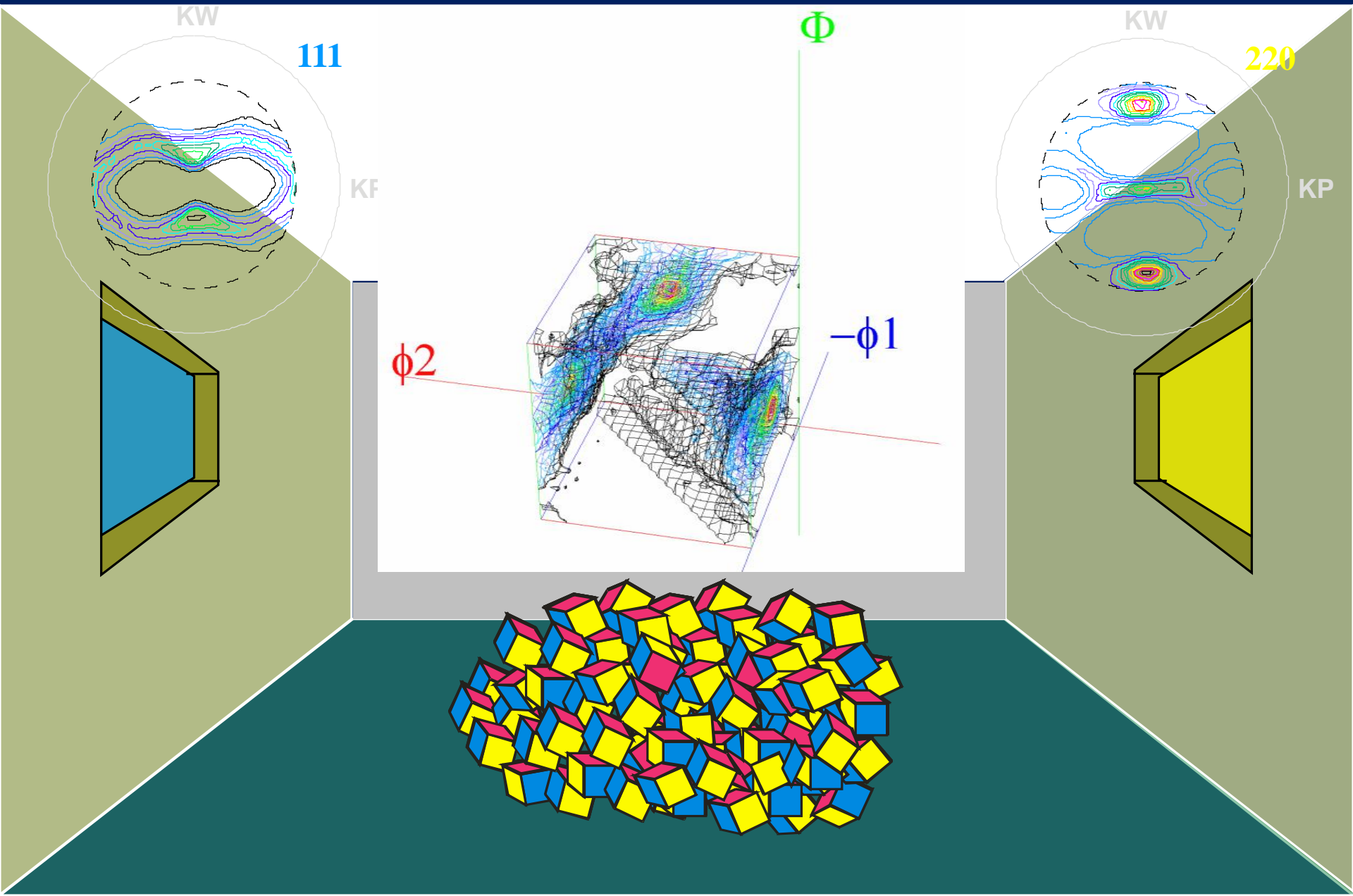




$$P_{\{hkl\}}(\alpha, \beta)$$

$$P_{\{hkl\}}(\alpha, \beta)$$

$$P_{\{hkl\}}(\alpha, \beta)$$



Odtworzenie tekstury z figur biegunowych jest złożonym problemem numerycznym i co istotne, nie jest w pełni możliwe ze względu na specyfikę ich pomiaru. W zmierzonej figurze biegunowej $P_h(y)$ nierozróżnialny pozostaje zwrot wektora h normalnego do reflektującej płaszczyzny krystalograficznej (prawo Friedel'a), a zatem:

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

gdzie $A(h, y)$ to tzw. ogólna funkcja rozkładu osi określająca gęstość prawdopodobieństwa występowania płaszczyzn krystalograficznych prostopadłe, do których mają współrzędne $h = h(\mathcal{G}, \psi)$ w układzie krystalitu K_B oraz $y = y(\alpha, \beta)$ w układzie próbki K_A .

Matthies (1979) zwrócił uwagę, że w ogólnym przypadku inwersja $h \rightarrow -h$ nie odpowiada przekształceniu orientacji g w jej położenie symetrycznie równoważne i w konsekwencji zmierzona figura biegunowa ma wyższą symetrię niż tekstura.

Nieuwzględnienie tej właściwości figur biegunowych skutkowało tym, że wyliczane FRO zawierała systematyczne błędy (nieistniejące w rzeczywistości składowe) nazywane w literaturze „duchami”. Przy stosowaniu metody rozwinięć szeregowych oprócz „duchów” pojawiają się dodatkowe, systematyczne błędy związane z przzerwaniem szeregu dla skończonej wartości rozwinięcia. **Opracowano kilka metod, które w znacznym stopniu korygują błędy i lepiej lub gorzej odtwarzających FRO z zestawu eksperymentalnych figur biegunowych.**

Problemy przestają istnieć gdy możliwe jest przeprowadzenie bezpośredniego pomiaru orientacji ziarn wykorzystując na przykład, w tej chwili już standardowe, pomiary dyfrakcji elektronów wstecznie rozproszonych w skaningowym mikroskopie elektronowym (EBSD/SEM). Poprzez zastosowanie zbioru pojedynczych orientacji do obliczenia FRO unikamy skomplikowanych procedur odtwarzania trójwymiarowego rozkładu z dwuwymiarowych przekrojów. Wystarczy przekształcić zależność $\frac{dV}{V} = f(g)dg$ definiującą FRO do postaci:

$$f(g_i) \cong \frac{\Delta V(g_i)}{V\Delta g_i} \approx \frac{\Delta N(g_i)}{N\Delta g_i}$$

gdzie $\Delta N(g_i)$ oznacza liczbę pomiarów, dla których $g \in [g_i - \frac{1}{2}\Delta g_i, g_i + \frac{1}{2}\Delta g_i]$, a następnie „uciąglić” zmierzone, dyskretne orientacje.

Warto zaznaczyć, że tak wyliczone FRO jest określone jednoznacznie i nie jest obciążone systematycznymi błędami (efektem tzw. „duchów”), które występują - zależnie od jakości procedur korygujących - we FRO wyliczonym z figur biegunowych.

Symetrie w przestrzeni orientacji.

Konkretny materiał polikrystaliczny zbudowany jest z dużych ilości jednego lub wielu rodzajów krystalitów, z których każdy ma określoną symetrię sieci krystalicznej.

Uwzględniając tę symetrię otrzymujemy $N_B > 1$ fizycznie nierozróżnialnych sposobów zdefiniowania układu współrzędnych K_B związanego z siecią krystaliczną i tym samym $N_B > 1$ symetrycznie równoważnych orientacji w przestrzeni orientacji.

$$K_{B_j} = g_{B_j} \cdot K_B$$

W wielu wypadkach uwzględniana jest też symetria próbki indukowana do rozkładu orientacji przez symetrię procesu wytwarzania:

$$K_{A_i} = g_{A_i} \cdot K_A$$

gdzie g_{A_i} - element symetrii punktowej układu próbki, $j = 1, \dots, N_A$. Przykładowo proces walcowania - powyżej pewnego gniotu - indukuje w rozkładzie orientacji krystalitów wyraźną rombowa symetrię blachy.

Symetria w układzie krystalitu ma charakter fizyczny co oznacza, że dwa symetrycznie równoważne ze względu na tę symetrię położenia w przestrzeni orientacji oznaczają tę samą fizycznie orientację krystalitu. Symetria w układzie próbki ma charakter statystyczny (tzn. jest obserwowana w wystarczająco dużych zbiorach ziarn polikryształu po określonej obróbce); **dwa symetrycznie równoważne ze względu na tę symetrię położenia w przestrzeni orientacji oznaczają dwa różne fizycznie położenia (orientacje) krystalitów.** Analizując zbiory orientacji, a zwłaszcza relacje między nimi, trzeba o tym rozróżnieniu pamiętać. Uwzględniając obie symetrie otrzymujemy:

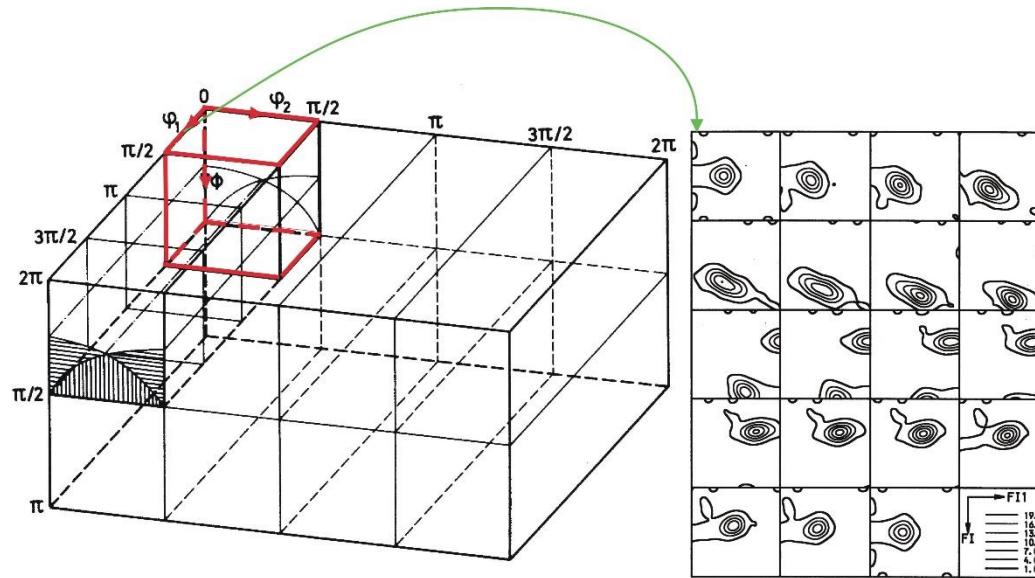
$$K_{B_{j\bar{i}}} = g_{B_j} \cdot g \cdot g_{A_i} \cdot K_A$$

iloczyn $g_{B_j} \cdot g \cdot g_{A_i}$ musi stanowić obrót właściwy.

Elementy symetrii (obroty właściwe) grupy O.

Symbol	Macierz	Symbol	Macierz	Symbol	Macierz
$S_1 = E$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$S_9 = L_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{17} = L_{0\bar{1}\bar{1}}^2$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
$S_2 = L_{010}^2$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$S_{10} = L_{1\bar{1}\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{18} = L_{\bar{1}00}^4$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$S_3 = L_{001}^2$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$S_{11} = L_{11\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{19} = L_{100}^4$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
$S_4 = L_{100}^2$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$S_{12} = L_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{20} = L_{011}^2$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$S_5 = L_{111}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{13} = L_{10\bar{1}}^2$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{21} = L_{110}^2$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$S_6 = L_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{14} = L_{101}^2$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{22} = L_{001}^4$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$S_7 = L_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{15} = L_{0\bar{1}0}^4$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{23} = L_{110}^2$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
$S_8 = L_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^3$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{16} = L_{010}^4$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$S_{24} = L_{00\bar{1}}^4$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

A zatem każda orientacja może być opisana na $N_A \cdot N_B$ symetrycznie równoważnych sposobów, rozproszonych w całej przestrzeni obrotów. Aby przeprowadzić ilościową analizę statystyk orientacji ich opis powinien być jednoznaczny. Aby to uczynić należy uwzględnić nie całą przestrzeń obrotów, ale tylko odpowiednią jej część, określoną w taki sposób, żeby każda fizycznie różna orientacja (oraz ewentualnie orientacja symetrycznie równoważna ze względu na statystyczną symetrię próbki) była w niej reprezentowana tylko jeden raz. Część przestrzeni spełniająca ten warunek nazywamy domeną asymetryczną, np. Morawiec (2004). Jak już wiemy orientację można opisać przy użyciu różnych parametrów. Ich wybór zależy często od natury rozpatrywanego problemu lub też łatwości użycia danej parametryzacji. Jak już wspomniano, FRO jest tradycyjnie przedstawiana w kątach Eulera.



Przekroje FRO dla kąta $\phi_2 = 0, 5, \dots, 90^\circ$ materiału o regularnej symetrii kryształu i rombowej symetrii próbki. Prezentowany rozkład składa się w rzeczywistości nie z jednej, a z trzech domen asymetrycznych. Ten stan rzeczy związany jest między innymi z tym, że konstruowanie domen asymetrycznych w przestrzeni kątów Eulera (ze względu na nieliniowość przestrzeni orientacji w tej parametryzacji) jest zajęciem trudnym.

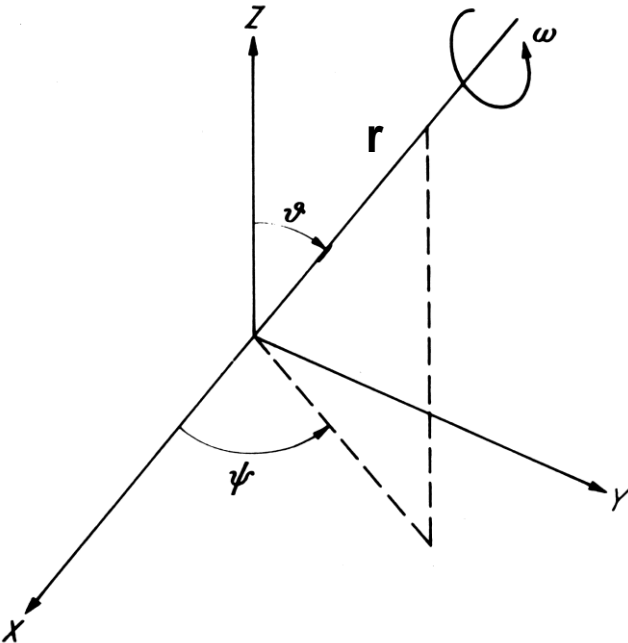
Inny może bardziej naturalnym sposobem opisu orientacji jest podanie parametrów osi (o wektorach jednostkowych x_v, y_v, z_v) i kąta obrotu ω . Niestety przestrzeń orientacji w parametrach osi i kąta obrotu jest jeszcze silniej nieliniowa.



Orientation and misorientation

(parameters of axis and rotation angle) parameters)

$$K_A = \Gamma_{AB} \cdot K_B$$



$$\Gamma_{AB}^e = S_i \cdot \Gamma_{AB} \cdot S_j$$

$(i, j = 1, \dots, 24)$

For crystals with cubic symmetry

$$\Gamma = \begin{pmatrix} (1-r_x^2) \cdot \cos \omega + r_x^2 & r_x \cdot r_y \cdot c + r_z \cdot \sin \omega & r_x \cdot r_z \cdot c - r_y \cdot \sin \omega \\ r_x \cdot r_y \cdot c - r_z \cdot \sin \omega & (1-r_y^2) \cdot \cos \omega + r_y^2 & r_y \cdot r_z \cdot c + r_x \cdot \sin \omega \\ r_x \cdot r_z \cdot c + r_y \cdot \sin \omega & r_y \cdot r_z \cdot c - r_x \cdot \sin \omega & (1-r_z^2) \cdot \cos \omega + r_z^2 \end{pmatrix}$$

$$c = 1 - \cos \omega$$

$$\omega_j = \arccos((\text{Tr}(\Gamma \cdot S_j) - 1) / 2)$$

$$\omega_d = \arccos((\text{Max}_j \text{Tr}(\Gamma \cdot S_j) - 1) / 2)$$

K. Sztwiertnia, J. Pospiech and F. Haessner, *Reduction of Misorientations between Two Cubic Crystals into the Base Domain of Axis - Angle Space*, Textures and Microstructures, **12** (1990) 233-242.

Project WND-POWR.03.02.00-00-1043/16

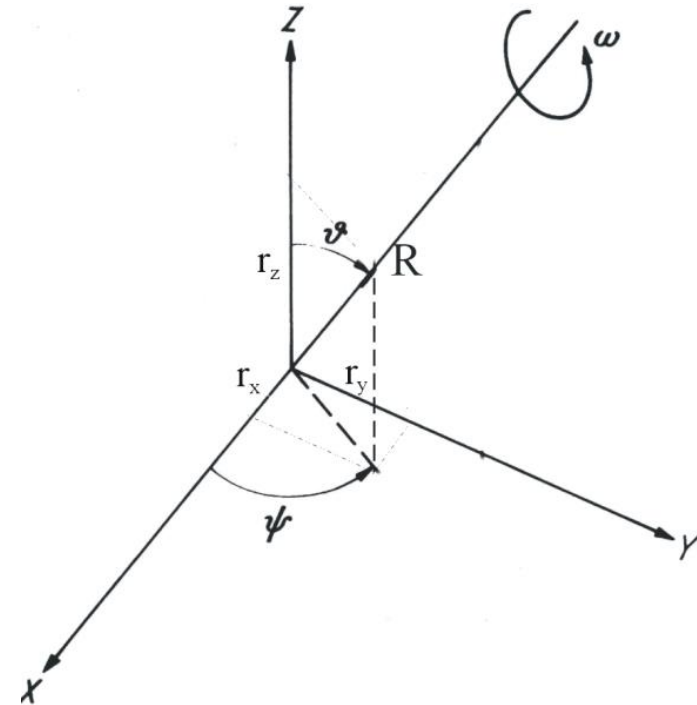
International interdisciplinary PhD Studies in Materials Science with English as the language of instruction

Project co-financed by the European Union within the European Social Funds



Rodrigues parameterization

For the description of orientation and misorientation statistics the most convenient one seems to be Rodrigues parameterization. The space described by Rodrigues parameters remains a linear for different combinations of crystal and specimen symmetry which facilitates the construction of asymmetric domains. You can select a domain that will only contain orientations (or misorientations) with the smallest possible rotation angle.



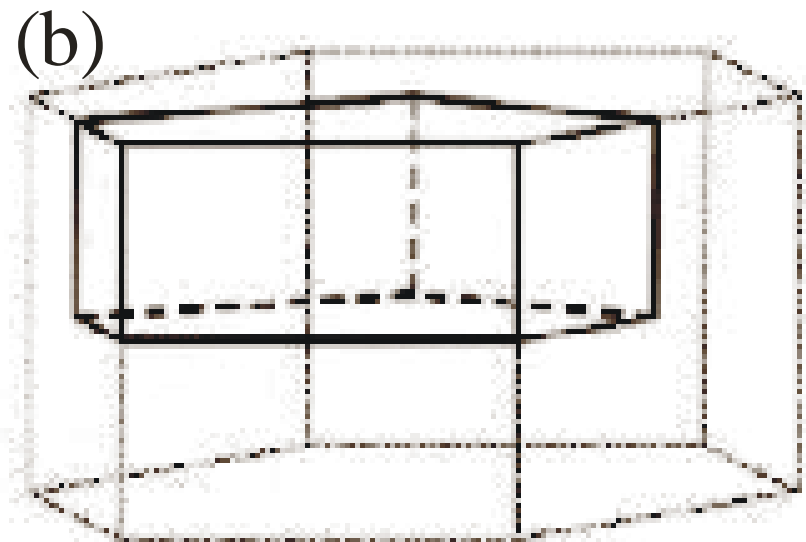
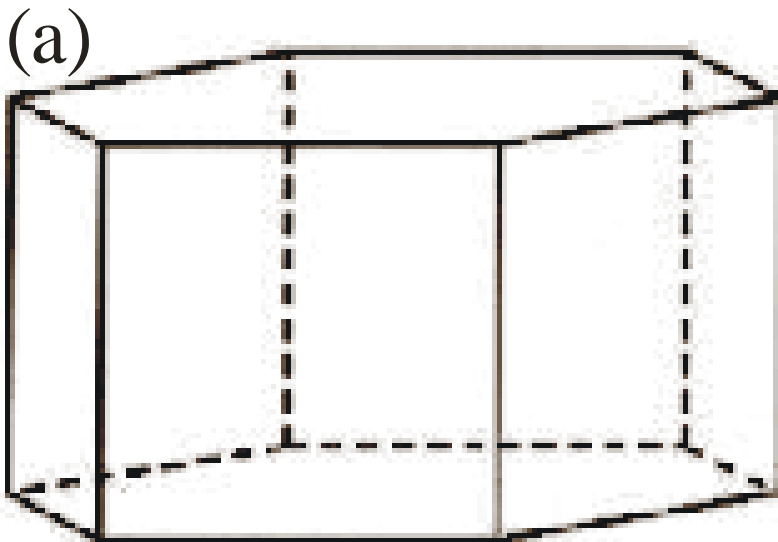
The Rodrigues' parameters:

$$r_1 = r_x \cdot \operatorname{tg}(\omega/2)$$

$$r_2 = r_y \cdot \operatorname{tg}(\omega/2)$$

$$r_3 = r_z \cdot \operatorname{tg}(\omega/2)$$

Asymmetric domains (Rodrigues parameterisation)



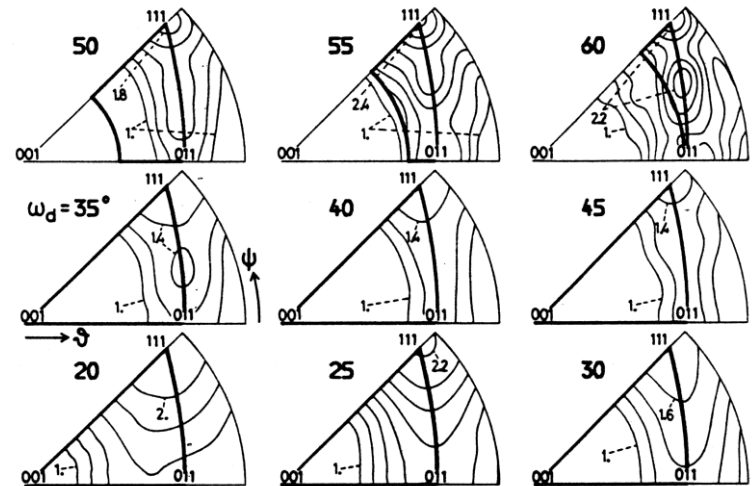
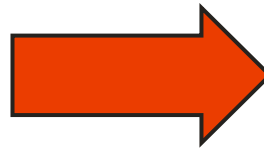
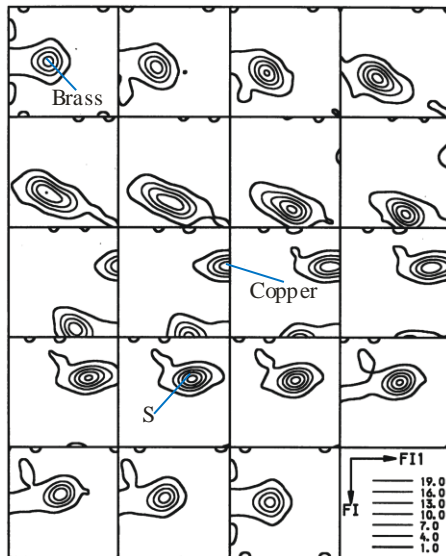
A schematic representation of asymmetric domains for symmetry (D_3, C_1) (a) and (D_3, D_3) (b) respectively.

$$r_1, r_2, r_3 \rightarrow \begin{array}{l} (h_A \ k_A \ l_A) \parallel (h_B \ k_B \ l_B) \\ [u_A \ v_A \ w_A] \parallel [u_B \ v_B \ w_B] \end{array}$$

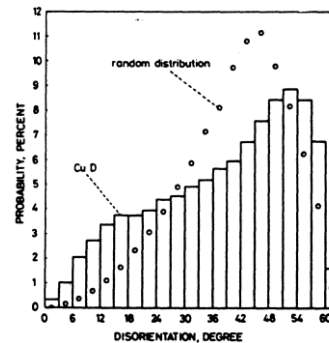
Morawiec, A. (2003) *Orientations and Rotations*, Springer Verlag, Berlin.

Distribution misorientation in polycrystalline aggregates with defined texture

(Haessner, F. and Sztwiertnia, K., Proc. of 8th International Conference on Textures of Materials, ed. by J.S. Kallend and G. Gottstein, The Metallurgical Society 1988, 163)



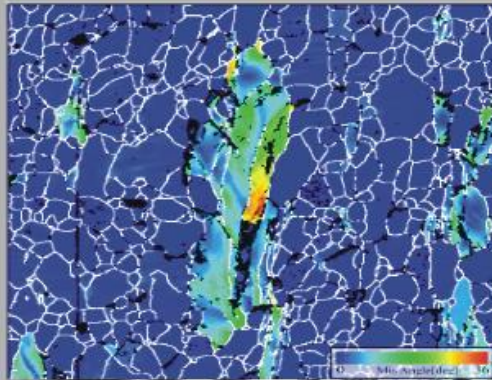
Experimental ODF of copper after cold rolling up to 95%



Misorientation Distribution Function calculated from the texture



Krzysztof Sztwiertnia



Orientacja krystalograficzna w badaniach mikrostruktury materiałów



Polska Akademia Nauk
Instytut Metalurgii I Inżynierii Materiałowej
Kraków 2009



thank you