

Исследование структуры и свойств Structure and properties research

**Физические методы
исследования и контроля**

**Physical methods
of research and monitoring**

DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2019-85-5-28-32>

ФУНКЦИЯ ВЗАИМНЫХ РАЗОРИЕНТИРОВОК ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

© **Александра Сергеевна Колянова^{1*}, Валерий Николаевич Яльцев²**

¹ Институт металлургии и материаловедения имени А. А. Байкова РАН, Россия, 119334, Москва, Ленинский пр., 49;
*e-mail: sasha-kolianova@yandex.ru

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, 115409, Москва, Каширское ш., 31.

*Статья поступила 4 октября 2018 г. Поступила после доработки 18 марта 2019 г.
Принята к публикации 20 марта 2019 г.*

Представлен упрощенный (по сравнению с методом гармоник) метод расчета функции распределения взаимных разориентировок для образцов кристаллов кубической сингонии, который применим для оценки наличия или отсутствия специальных границ в материалах. Исследовали образцы сплава системы Al – Mg – Si после механической и термической обработок (прокатки и рекристаллизационного отжига). Результаты расчета для каждого образца представлены в эйлеровском и угол – ось пространствах. Новизна метода заключается в возможности получения информации о границах зерен по данным рентгеновского текстурного анализа материала без использования электронной микроскопии. Расчет, включающий лишь математические операции над матрицами, проводили на основе полученной восстановлением из неполных полюсных фигур функции распределения ориентировок. Установили, что в деформированном образце специальные границы отсутствовали, в рекристаллизованном сплаве специальные границы были зафиксированы при $\Sigma = 23, 13$ и 17. К недостатку предлагаемого метода можно отнести отсутствие точных данных о границах зерен, поскольку при расчетах функции взаимных разориентировок необходимо учитывать все возможные ориентировки в поликристалле.

Ключевые слова: функция распределения ориентировок; функция взаимных разориентировок; рентгеновский анализ; решетки совпадения; кубическая сингония; алюминиевый сплав.

MISORIENTATION DISTRIBUTION FUNCTION FOR CUBIC CRYSTALS

© **Aleksandra S. Kolyanova^{1*}, Valerij N. Yaltsev²**

¹ Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science, RAS, Leninsky pr. 49, Moscow, 119334, Russia;
*e-mail: sasha-kolianova@yandex.ru

² National Research Nuclear University MEPhI, Kashirskoe sh. 31, Moscow, 115409, Russia.

Received October 4, 2018. Revised March 18, 2019. Accepted March 20, 2019.

A calculation method for obtaining the misorientation distribution function (MDF) for cubic crystals which can be used to estimate the presence or absence of special boundaries in the materials is presented. The calculation was carried out for two samples of Al-Mg-Si alloy subjected to various mechanical and thermal treatments: the first sample is subjected to rolling; the second sample is subjected to recrystallization annealing. MDF is calculated for each sample; the results are presented in the Euler space and in the angle-axis space. The novelty of the method consists in the possibility of gaining data on the grain boundaries from X-ray texture analysis without using electron microscopy. A calculation involving only mathematical operations on matrices was performed on the basis of the orientation distribution function restored from incomplete pole figures. It is shown that no special boundaries are observed in the deformed sample, whereas in the recrystallized alloy, special boundaries are detected at $\Sigma = 23, 13$, and

17. The shortcoming of the proposed method can be attributed to the lack of accurate data on grain boundaries, since all possible orientation in the polycrystal should be taken into account in MDF calculation.

Keywords: orientation distribution function; misorientation distribution function; x-ray analysis; cubic crystal system; aluminum alloy.

Введение

При исследовании поликристаллических материалов помимо изучения текстуры — распределения ориентировок зерен относительно внешней системы координат — представляет интерес изучение так называемой текстуры взаимных разориентировок, т.е. распределения ориентировок зерен относительно друг друга. Такой анализ позволяет оценить наличие или отсутствие решеток совпадающих узлов и, соответственно, специальных границ, имеющих особую структуру и свойства [1].

Данные о взаимных разориентировках соседних зерен в настоящее время получают экспериментально с помощью дифракции обратно рассеянных электронов, но качественная оценка по специальным границам возможна на основе результатов рентгеновского текстурного анализа.

Цель работы — разработка метода получения функции распределения взаимных разориентировок (ФВР) для кубических образцов и его использование для оценки наличия или отсутствия специальных границ в материалах.

Методика исследования

Теоретические предпосылки, на которых основана предлагаемая методика [2–6], заключаются в возможности описания разориентировок между двумя зернами в кристалле с помощью матрицы взаимной разориентировки, определяемой следующим образом:

$$\Delta \mathbf{g} = \mathbf{g}_B \mathbf{g}_A^{-1}, \quad (1)$$

где $\mathbf{g}_A$ и $\mathbf{g}_B$ — ориентационные матрицы для зерен A и B ; отметим, что $\mathbf{g}_A^{-1} = \mathbf{g}_A^T$.

Для описания текстуры взаимных разориентировок используют ФВР, аналогичную функции распределения ориентировок (ФРО) в текстурном анализе и обозначаемую $f(\Delta \mathbf{g})$.

Долю площади, занимаемой разориентировками, лежащими внутри определенной области $\Delta \Omega$ ориентационного пространства, вычисляют по формуле [6]

$$\frac{\Delta A}{A} = \frac{\int_{\Delta \Omega} f(\Delta \mathbf{g}) d\Delta \mathbf{g}}{\int_{\Delta \Omega_0} f(\Delta \mathbf{g}) d\Delta \mathbf{g}}, \quad (2)$$

где ΔA , A — площади, занимаемые разориентировками внутри $\Delta \Omega$ и всеми разориентировками;

$\Delta \Omega_0$ — полный объем ориентационного пространства. Ее используют вместо объемной доли, поскольку границы зерен представляют собой плоские области в микроструктуре.

ФВР можно рассчитать с помощью известного метода гармоник [7]. Предлагаемый более простой способ получения искомой функции предполагает использование сечений ФРО, восстановленных из полюсных фигур, т.е. являющихся результатом рентгеновского текстурного анализа.

Алгоритм следующий. На каждом сечении ФРО отмечаем несколько точек с различным весом. Вес показывает плотность вероятности, с которой данная ориентировка встречается в кристалле. Целесообразно охватить весь диапазон изменения весов (выбрать точки с максимальными и минимальными значениями, а также на полувысотах). В результате получаем набор точек в пространстве Эйлера с координатами $(\varphi_{1i}, \Phi_i, \varphi_{2i})$, где φ_1 , Φ и φ_2 — углы Эйлера.

Для выбранных точек записываем ориентационные матрицы $\mathbf{g}_i$ и $\mathbf{g}_j$ (i и j соответствуют номерам рассматриваемых ориентировок). Из записанных матриц по формуле (1) вычисляем матрицу взаимных разориентировок $\Delta \mathbf{g}_{ij}$. Вес p_{ij} для такой матрицы — произведение вероятностей рассматриваемых ориентировок

$$p_{ij} = p_i p_j, \quad (3)$$

поскольку предполагаем, что ориентировки в кристалле встречаются независимо друг от друга.

Симметрия кристалла дает возможность получить набор различных, но эквивалентных описаний одного и того же разворота. Влияние симметрии учитываем следующим образом [7]:

$$f(\Delta \mathbf{g}_{ij}) = f(\mathbf{O}_{ci} \Delta \mathbf{g}_{ij} \mathbf{O}_{cj}), \quad (4)$$

где $\mathbf{O}_{ci}$ и $\mathbf{O}_{cj}$ — операторы симметрии кристалла.

Из матрицы $\Delta \mathbf{g}_{ij}$ в дальнейшем восстанавливаем значения углов Эйлера, соответствующие взаимным разориентировкам. По полученным углам Эйлера строим графическое отображение ФВР.

Помимо пространства Эйлера для описания ФВР можно использовать пространство угол — ось. В этом случае из известной матрицы взаим-

ных разориентировок угол разворота θ и компоненты оси d_1, d_2, d_3 находим по формулам [6]

$$\cos \theta = \frac{1}{2}(g_{11} + g_{22} + g_{33}), \quad (5)$$

$$\{d_1, d_2, d_3\} = \frac{\{g_{23} - g_{32}, g_{31} - g_{13}, g_{12} - g_{21}\}}{\sqrt{(g_{23} - g_{32})^2 + (g_{31} - g_{13})^2 + (g_{12} - g_{21})^2}}. \quad (6)$$

Координаты R_x и R_y направления $\mathbf{d}$ для отображения его на стереографической проекции вычисляем по формуле

$$\begin{cases} R_x = r \frac{\operatorname{tg} \frac{\gamma}{2} \cos \alpha}{\sin \gamma}; \\ R_y = r \frac{\operatorname{tg} \frac{\gamma}{2} \cos \beta}{\sin \gamma}, \end{cases} \quad (7)$$

где r — радиус основного круга проекции; α, β, γ — углы, образуемые вектором $\mathbf{d}$ с координатными осями Ox, Oy и Oz соответственно.

Результаты и обсуждение

При расчетах использовали ФРО, восстановленные из неполных полюсных фигур методом аппроксимации большим числом гауссовских нормальных распределений [8]. Для восстановления ФРО полюсные фигуры $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$ и $\{311\}$ строили методом «на отражение» на рентгеновском дифрактометре «ДРОН-7» в

СоК α -излучении (диапазоны углов наклона χ и поворотов β — 0–70 и 0–360°, шаг по χ и β — 5°). Исследовали образцы алюминиевого сплава 6016 системы Al–Mg–Si после прокатки и рекристаллизационного отжига, что позволяло сравнивать результаты, полученные для разных типов текстур. Расчеты проводили в пространстве эйлеровых углов. Результаты представляли в пространствах Эйлера и угол – ось. Представление в пространстве угол – ось необходимо для анализа решеток совпадения.

Априорно вводимое допустимое отклонение разориентировки от специальной разориентировки, определяемое критерием Брендона,

$$\Delta\Theta = \Theta_0 \sqrt{\Sigma}, \quad (8)$$

где $\Theta_0 = 15^\circ$; Σ — обратная плотность совпадающих узлов (число узлов решетки, приходящихся на один совпадающий узел).

Специальными считают решетки совпадения с $\Sigma < 25$. Для кубических материалов специальные разориентировки расположены на сторонах стандартного стереографического треугольника [2].

В таблице приведены специальные углы разориентировки для кубических решеток [9, 10].

На рисунке показаны распределение осей разориентировок в пространстве угол – ось в стандартном стереографическом треугольнике и ФВР в пространстве Эйлера.

Видно, что взаимные разориентировки для прокатанного образца расположены внутри треугольника, а для рекристаллизованного при углах разворота, меняющихся в интервалах 10–

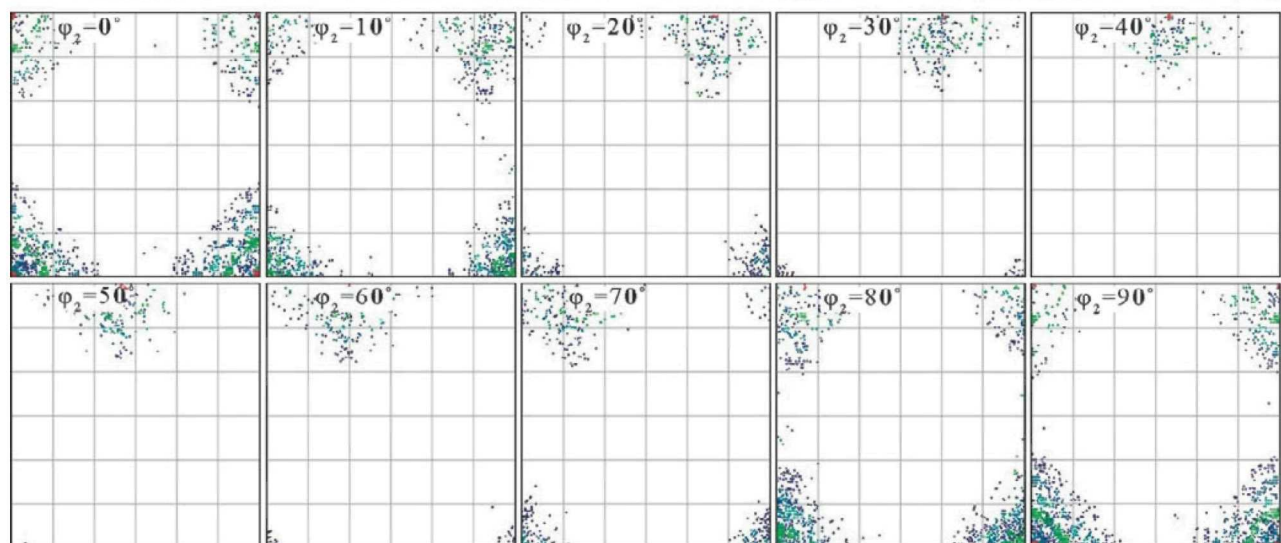
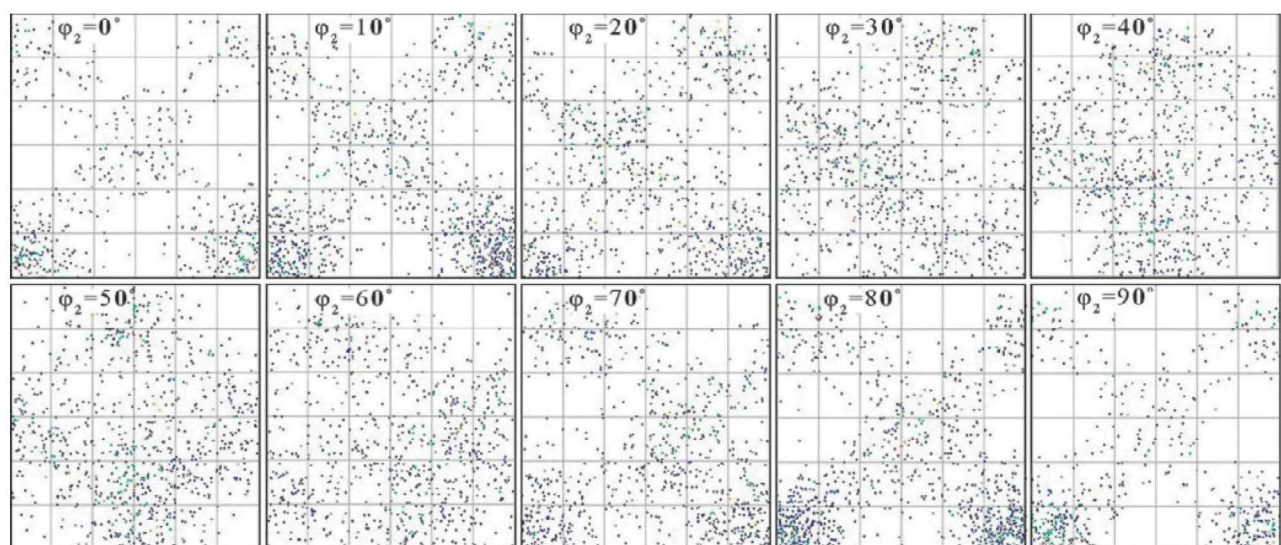
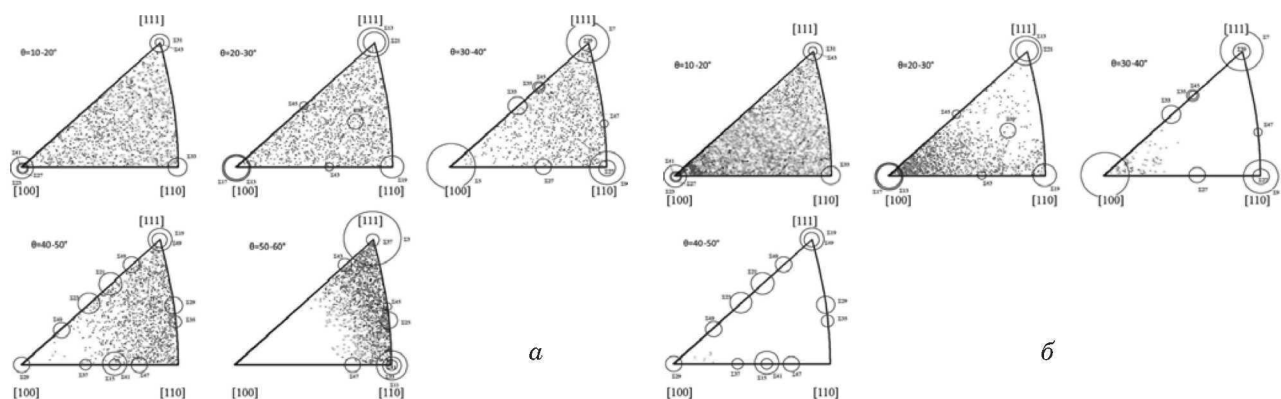
Специальные углы и параметры осей разворота решеток совпадающих узлов в кубических кристаллах

Σ	hkl	Θ	Σ	hkl	Θ	Σ	hkl	Θ
3	111	60,00	27	110	31,59	41	100	12,68
5	100	36,86	27	210	35,43	41	210	40,89
7	111	38,21	29	100	43,60	41	110	55,88
9	110	38,94	29	221	46,40	43	111	15,18
11	110	50,47	31	111	17,90	43	210	27,91
13	100	22,61	31	320	54,50	43	322	60,77
13	111	27,79	33	110	20,05	45	311	28,62
15	220	48,18	33	311	33,56	45	211	36,87
17	100	28,07	33	110	58,99	45	221	53,13
19	110	26,52	35	211	34,05	47	331	37,07
19	111	46,82	35	331	43,23	47	320	43,66
21	111	27,78	37	100	18,92	49	111	43,57
21	211	44,41	37	310	43,14	49	511	43,57
23	311	40,45	37	111	50,57	49	322	49,23
23	100	16,26	39	111	32,20			
25	331	51,68	39	321	30,13			

20 и 20–30°, они сосредоточены вблизи вершины (направление [100]). Разориентировки, соответствующие специальным границам, находятся в вершинах треугольника. Очевидно, что для прокатанного образца в данном случае специальные границы не выявляются, для рекристаллизо-

ванного специальные границы $\Sigma = 13$, 17 и 23, причем границы $\Sigma = 23$ встречаются наиболее часто.

Вид ФВР в пространстве углов Эйлера для рассматриваемых образцов различен и коррелирует с исходными данными (ФРО), что указыва-



ФВР в пространствах угол – ось (а, б) и Эйлера (в, г) для прокатанного и рекристаллизованного образцов соответственно

ет на наличие текстуры взаимных разориентировок [2, 3]. Максимумы ФВР показывают наиболее вероятные взаимные разориентировки кристаллитов.

Заключение

С помощью упрощенного способа расчета, не включающего математические преобразования, используемые в методе гармоник, получили ФВР для прокатанного и рекристаллизованного образцов алюминиевого сплава 6016. Анализ результатов на наличие решеток совпадения и специальных границ показал, что в деформированном материале специальные границы отсутствуют. В рекристаллизованном сплаве они зафиксированы при $\Sigma = 13, 17$ и 23 . По ФВР также можно определить спектр возможных разориентировок и связать его с образованием или отсутствием специальных границ, однако подобный подход не позволяет получить точные данные о границах зерен, так как учитывает все возможные ориентировки в поликристалле.

Работа выполнена по государственному заданию № 007-00129-18-00.

ЛИТЕРАТУРА

1. Новиков И. И., Розин К. М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. — М.: Металлургия, 1990. — 335 с.
2. Скрытний В. И., Храмцова Т. П., Яльцев В. Н. и др. Текстура взаимных разворотов в поликристаллах / Физика и химия обработки материалов. 2010. № 2. С. 71 – 74.
3. Skrytnyy V. I. Misorientation distribution function of crystals / 15th International School-Conference “New materials — Materials of innovative energy: development, characterization methods and application”. / KnE Materials Science. 2017. P. 342 – 357.
4. Яльцев В. Н., Скрытний В. И. Взаимные развороты кристаллов: учеб. пособие. — М.: НИЯУ МИФИ, 2016. — 88 с.
5. Bunge H. J. Texture Analysis in Materials Science: Mathematical Methods. — London: Butterworths, 1982. — 595 p.
6. Kocks U., Tomé C., Wenk H.-R. Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties. — Cambridge University Press, 1998. — 676 p.
7. Pospiech J., Sztwiertnia K., Haessner F. The Misorientation Function Distribution / Textures and Microstructures. 1986. Vol. 6. P. 201 – 215.
8. Куртасов С. Ф. Методика количественного анализа текстур прокатки материалов с кубической симметрией кристаллической решетки / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2007. Т. 73. № 7. С. 41 – 44.
9. Орлов А. Н., Переvezенцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. — М.: Металлургия, 1980. — 153 с.
10. Randle V. The Role of the Coincidence Site Lattice in Grain Boundary Engineering. — London: Institute of Materials, 1996. — 120 p.

REFERENCES

1. Novikov I. I., Rozin K. M. Crystallography and Crystal Lattice Defects. — Moscow: Metallurgiya, 1990. — 335 p. [in Russian].
2. Skrytnyy V. I., Hramcova T. P., Yaltsev V. N., et al. The Texture of Misorientations in Polycrystals / Fiz. Khimiya Obrab. Mater. 2010. N 2. P. 71 – 74 [in Russian].
3. Skrytnyy V. I. Misorientation distribution function of crystals / 15th International School-Conference “New materials — Materials of innovative energy: development, characterization methods and application” / KnE Materials Science. 2017. P. 342 – 357.
4. Yaltsev V. N., Skrytnyy V. I. Misorientations in Crystals. — Moscow: MEPhI, 2016. — 88 p. [in Russian].
5. Bunge H. J. Texture Analysis in Materials Science: Mathematical Methods. — London: Butterworths, 1982. — 595 p.
6. Kocks U., Tomé C., Wenk H.-R. Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties. — Cambridge University Press, 1998. — 676 p.
7. Pospiech J., Sztwiertnia K., Haessner F. The Misorientation Function Distribution / Textures and Microstructures. 1986. Vol. 6. P. 201 – 215.
8. Kurtasov S. F. A Technique for the Quantitative Analysis of Rolling Textures of Materials with Cubic Lattice Symmetry / Zavod. Lab. Diagn. Mater. 2007. Vol. 73. N 7. P. 41 – 44 [in Russian].
9. Orlov A. N., Perevezentsev V. N., Rybin V. V. Grain Boundaries in Metals. — Moscow: Metallurgiya, 1980. — 153 p. [in Russian].
10. Randle V. The Role of the Coincidence Site Lattice in Grain Boundary Engineering. — London: Institute of Materials, 1996. — 120 p.