

ЕФ  
объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

1662 / 2-81

30/III-81

P11-80-844

К.Фельдманн

КОМПЛЕКСНАЯ ПРОГРАММА ЭВМ  
ДЛЯ АНАЛИЗА ТЕКСТУР МЕТОДОМ ФРО

Направлено в журнал "Кристаллография"

1980

## ВВЕДЕНИЕ

Магнитные, электрические, механические и другие свойства материалов в значительной степени определяются технологическими условиями их создания. Важным методом изучения изменений, происходящих в веществе вследствие технологических процессов, является исследование преимущественных ориентаций кристаллографических направлений или плоскостей кристаллитов /кристаллографическая текстура/ в поликристаллическом агрегате. Наиболее полную информацию о текстуре содержит трехмерная функция распределения ориентаций /ФРО/, которую можно восстановить из данных по рассеянию рентгеновских лучей или нейтронов<sup>1,2,3/</sup>. Наиболее распространенным способом представления ФРО, полюсных фигур /ПФ/ и обращенных полюсных фигур /ОПФ/ является разложение в ряд по обобщенным шаровым и сферическим функциям<sup>1/</sup>. Этот метод прямо связывает ФРО, ПФ и ОПФ через коэффициенты разложения. В настоящей работе дается описание программы для ЭВМ, которая позволяет рассчитывать обращенные полюсные фигуры и функцию распределения ориентаций на основе экспериментально определенных полных полюсных фигур. Программа дает возможность анализа текстур материалов с кубической, гексагональной, тетрагональной и орторомбической симметрией кристаллической решетки. Необходимость создания такой программы для ЭВМ была указана в решениях Всесоюзной конференции по текстурам и рекристаллизации в металлах и сплавах, Красноярск, 1980 г.<sup>17/</sup>.

## ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О МАТЕМАТИЧЕСКОМ ФОРМАЛИЗМЕ

Фундаментальная функция в исследовании текстур - функция распределения ориентаций - описывает статистическим образом связь между системами координат образца и кристаллитов в образце. Если  $dV$  - часть объема образца, имеющая ориентацию  $g$  в интервале  $g$  и  $g + dg$ , а  $V$  - полный объем образца, то ФРО определяется следующим образом:

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

/1/

где  $f(g)$  есть функция распределения ориентаций кристаллитов в образце.  $g$  определяется в пространстве эйлеровых углов  $\phi_1, \Phi, \phi_2$ :

$$g = g(\phi_1, \Phi, \phi_2). \quad /2/$$

В общем случае  $f(g)$  трудно определить непосредственно из эксперимента. Известно только, что эта функция должна отражать свойства симметрии кристаллитов и симметрии образца относительно текстуры.

Как отмечалось выше, наиболее распространенным методом представления  $f(g)$  является разложение ее по обобщенным шаровым функциям:

$$f(g) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{n=-\ell}^{\ell} C_{\ell}^{mn} T_{\ell}^{mn}(g), \quad /3/$$

или согласно работе<sup>/1/</sup> по так называемым симметризованным обобщенным шаровым функциям:

$$f(g) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} T_{\ell}^{\mu\nu}(g). \quad /4/$$

Переход от /3/ к /4/ позволяет учесть симметрии кристаллической решетки и образца по текстуре, что приводит к уменьшению числа членов в разложении /4/. Симметризованные обобщенные шаровые функции являются линейными комбинациями обычных обобщенных шаровых функций:

$$T_{\ell}^{\mu\nu}(g) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{n=-\ell}^{\ell} A_{\ell}^{\nu n} A_{\ell}^{\mu m} T_{\ell}^{mn}(g). \quad /5/$$

Коэффициенты разложения  $A_{\ell}^{n\nu}$  учитывают симметрию образца по текстуре, а  $A_{\ell}^{m\mu}$  - симметрию кристаллической решетки зерен. Для случая кубической симметрии кристаллической решетки эти величины можно найти в работе<sup>/1/</sup>. В случае некубической симметрии  $A_{\ell}^{m\mu}$  или  $A_{\ell}^{n\nu}$  имеют следующий вид:

$$A_{\ell}^{m\mu} = \begin{cases} 1, & m = 0, \\ \sqrt{2}, & m = k(\mu - 1), \\ 0, & 0 < m \neq k(\mu - 1), \end{cases} \quad /6/$$

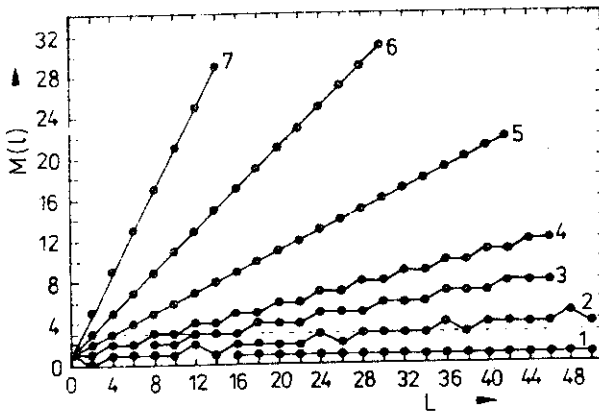


Рис. 1. Число линейно-независимых шаровых функций в зависимости от степени разложения для разных симметрий кристаллитов и деформаций. 1 - симметрия вращения; 2 - кубическая; 3 - гексагональная; 4 - тетрагональная; 5 - орторомбическая /текстура прокатки/; 6 - моноклинная; 7 - триклинная.

где

$$k = \begin{cases} 1 & \text{для орторомбической,} \\ 2 & \text{для тетрагональной,} \\ 3 & \text{для гексагональной симметрий.} \end{cases} \quad /7/$$

Уравнение /4/ интегрируется по всем ориентациям, для которых направления  $h=(hk\ell)$  кристаллитов совпадают с заданными направлениями  $\vec{y}$  образца. Полученная таким образом функция - функция распределения осей - имеет вид:

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \frac{C_{\ell}^{\mu\nu}}{2\ell+1} k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}) k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}), \quad /8/$$

где  $k_{\ell}^{\mu}(\vec{h})$  и  $k_{\ell}^{\nu}(\vec{y})$  - симметризованные сферические функции.  $M(\ell)$  и  $N(\ell)$  - число линейно независимых шаровых функций для данной степени разложения  $\ell$  /см. рис. 1/. Если  $\vec{h}$  имеет фиксированное значение  $\vec{h}_i$ , то  $A(\vec{h}_i, \vec{y})$  представляет собой полюсную фигуру направления  $\vec{h}_i$ :

$$A(\vec{h}_i, \vec{y}) = P_{\vec{h}_i}(\vec{y}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} F_{\ell}^{\nu}(\vec{h}_i) k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}). \quad /9/$$

Коэффициенты этой функции определяются выражением

$$F_{\ell}^{\nu}(\vec{h}_i) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i). \quad /10/$$

Эквивалентные формулы для ОПФ получаются для фиксированного направления образца  $\vec{y}_i$  :

$$A(\vec{h}, \vec{y}_i) = R_{\vec{y}_i}(\vec{h}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} H_{\ell}^{\mu}(\vec{y}_i) k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}), \quad /11/$$

где

$$H_{\ell}^{\mu}(\vec{y}_i) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}_i). \quad /12/$$

Направления  $\vec{y}$  и  $\vec{h}$  задаются в полярных координатах /см. рис.2/. В случае изображения  $\vec{h}$  угол азимута  $\gamma$  заменяется символом  $\beta$  и согласно /1/  $\beta$  отсчитывается от зеркальной плоскости. Учитывая ортонормальность сферических функций, из уравнения /5/ получаем:

$$F_{\ell}^{\nu}(\vec{h}_i) = \frac{4\pi \oint P_{\vec{h}_i}(\vec{y}) k_{\ell}^{\nu*}(\vec{y}) d\vec{y}}{\oint P_{\vec{h}_i}(\vec{y}) d\vec{y}}, \quad /13/$$

где знаменатель является фактором нормировки полюсной фигуры  $\vec{h}_i$ .

С помощью известных коэффициентов  $F_{\ell}^{\nu}$  с использованием метода наименьших квадратов решается система линейных уравнений /10/. Окончательное выражение имеет следующий вид:

$$\sum_i W_i k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i) [F_{\ell}^{\nu}(\vec{h}_i) - \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i)] = 0, \quad /14/$$

где  $W_i$  - вес полюсной фигуры  $\vec{h}_i$ .

С помощью определенных коэффициентов разложения  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  строится ФРО согласно выражению /4/. Кроме этого, можно вычислить ОПФ и "теоретические" ПФ. На основе известных  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  определяется так называемый текстурный индекс

$$J = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \frac{1}{2\ell+1} [C_{\ell}^{\mu\nu}]^2, \quad /15/$$

являющийся мерой резкости текстуры и отклонения  $\Delta C_{\ell}^{\mu\nu}$  и  $\Delta F_{\ell}^{\nu}$  /см. /1/ /.

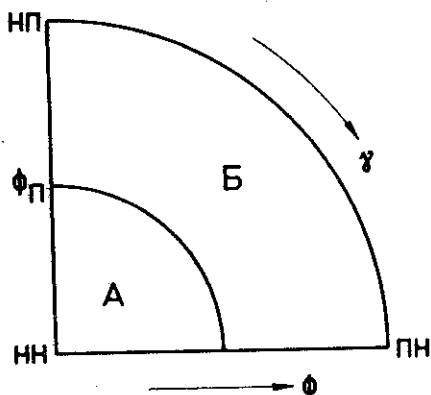


Рис.2. Схема полюсной фигуры. Области А и Б измеряются в режимах отражения и пропускания соответственно.  $\Phi$ ,  $\gamma$  - полярные координаты;  $\Phi_{II}$  - предельный угол; НН - направление нормали; НП - направление прокатки; ПН - поперечное направление.

### ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ

Программа TEXTUR позволяет обрабатывать экспериментальные полюсные фигуры, проводить полный количественный анализ текстуры /см. рис. 3/ в рамках описанного выше математического формализма. Исходной экспериментальной информацией для программы являются ПФ, измеренные в эксперименте по дифракции рентгеновских лучей или нейтронов.

В подпрограмме SPECTR читаются экспериментальные данные и вводятся необходимые поправки.

При анализе текстур с орторомбической симметрией образца полюсные фигуры определяются из экспериментов на пропускание и отражение нейтронного и рентгеновского луча. Поэтому части ПФ, измеренные в двух режимах, нормируются по времени измерения, и вычисляется нормированный на единицу времени фон. Поправка на поглощение вводится согласно монографии<sup>14</sup>. В первом приближении оно считается независимым от угла  $\Phi$  для случая дифракции на отражение:

$$\sigma_R = \frac{2\mu d \exp(-\mu d \cos \theta)}{\cos \theta \cdot (1 - \exp(-\mu d / \sin \theta))} \quad /16/$$

Для случая пропускания поглощение зависит от угла  $\Phi$ :

$$\sigma_T(\Phi) = \frac{\mu \cdot d \cdot \exp(-\mu d / \cos \theta) (\cos(\theta - \Phi) - \cos(\theta + \Phi))}{\cos \theta (\exp(-\mu d / \cos(\theta - \Phi)) - \exp(-\mu d / \cos(\theta + \Phi)))} \quad /17/$$

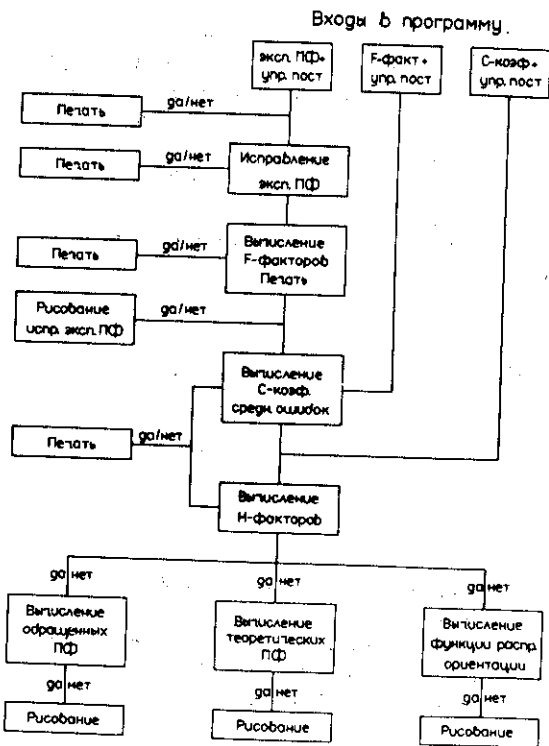


Рис.3. Схематическое изображение возможностей программы TEXTUR.

где  $d$  - толщина образца,  $\mu$  - линейный коэффициент поглощения,  $\theta$  - угол Брэгга.

Допущение о независимости  $\sigma_R$  от  $\Phi$  часто оказывается неверным, поэтому в программе имеется возможность введения поправки  $\sigma_R$  эмпирическим способом.

При проведении измерений в режиме пропускания и отражения в случае предельного\* угла  $\Phi_n$  поправка на поглощение должна быть одинаковой. Отсюда  $\sigma'_R(\Phi_n) = \sigma_R + \sigma_c$ . Поглощение в центре полюсной фигуры  $\int \Phi =$

$0^\circ$  определяется уравнением /16/. В интервале от 0 до  $\Phi_n$  оно аппроксимируется следующим образом:

$$\sigma'_R(\Phi_n - n \cdot \Delta\Phi) = \sigma_R + \frac{\sigma_c}{2^n} \quad /18/$$

Имеется возможность исправления выбитых точек. Значение выбитой точки заменяется средним значением четырех окружающих ее точек, если:

$$4 \cdot S_{j,k} < S_{j,k-1} + S_{j,k+1} \quad , \quad \text{или} \quad 4S_{j,k} < S_{j-1,k} + S_{j+1,k} \quad ,$$

\* Предельный угол - угол, при котором меняется режим съемки пропускания на отражение или наоборот /см. рис. 2/.

или  $S_{j,k} > S_{j,k-1} + S_{j,k+1}$ , или  $S_{j,k} > S_{j-1,k} + S_{j+1,k}$ .

В случае резких текстур применять эти критерии нежелательно.

В подпрограмме SPECTR имеется возможность печати исходных и исправленных данных.

Подпрограмма FACTOR реализует математический формализм, описанный в предыдущем разделе, кроме вычисления функции распределения ориентаций. Наиболее сложной частью расчета является вычисление интегралов /13/. Так как сферические функции сильно осциллируют при больших степенях  $l$ , могут возникать значительные ошибки при численном интегрировании, если расстояние между точками слишком велико /5/. Поэтому предусмотрена возможность квадратичной интерполяции экспериментальных данных до расстояния одного градуса между точками для вычисления интегралов /13/. В процессе работы над программой оказалось целесообразным начинать расчеты на основе известных факторов  $F_{\rho}^{\mu\nu}$  или коэффициентов  $S_{\rho}^{\mu\nu}$ , поэтому подпрограмма FACTOR имеет дополнительные входы /рис. 3/.

На основе определенных  $H_{\rho}^{\mu}$  можно в программе INPOFI вычислить ОПФ для нормального направления, направления прокатки и поперечного направления в случае текстуры проката и ОПФ оси текстуры в случае аксиальной симметрии образца по текстуре.

Подпрограмма TEPOFI вычисляет из определенных коэффициентов  $S_{\rho}^{\mu\nu}$  так называемые теоретические полюсные фигуры с угловым шагом 5 или 6 градусов.

Подпрограмма OVF вычисляет функцию распределения ориентаций с угловым шагом 5 градусов для каждого угла:  $\phi_1, \Phi, \phi_2$ . Есть возможность распечатать входные и расчетные данные, а также нарисовать текстурные функции ПФ, ОПФ и ФРО на графопостроителе /см. рис. 4, 5, 6/. На печать выдаются  $\rho, \mu, \nu, S_{\rho}^{\mu\nu}, \Delta S_{\rho}^{\mu\nu}, H_{\rho}^{\mu}, \Delta F_{\rho}^{\mu\nu}, J, ОПФ, теоретические ПФ и ФРО$ .

## ОБРАЩЕНИЕ К ПРОГРАММЕ

Программа TEXTUR написана на ФОРТРАНе. Некоторые особенности применяемого транслятора описаны в работе /6/. Программа обрабатывает полюсные фигуры, покрытые сетью точек с угловым расстоянием между ними не меньше 5 градусов /обычно 6 градусов/. С целью снижения затрат машинного времени сферические функции, необходимые для расчета факторов  $F_{\rho}^{\mu\nu}$  всех ПФ, вычисляются один раз. ФРО вычисляется в целом, а не в сечениях одного угла. Такой подход требует относительно большой оперативной памяти ЭВМ. В связи с этим ограничено число применяемых для расчета полюсных фигур. Настоящая версия, работающая



на БЭСМ-6, позволяет вводить не больше 12 ПФ, что вполне достаточно для решения большинства практических задач.

Разложение в ряд по сферическим функциям возможно до  $\ell = 22$  в случае орторомбической кристаллической симметрии и  $\ell = 34$  для более высоких симметрий. На рис. 3 приведена схема, показывающая возможности программы. Часть программы, позволяющая рисовать результаты, предполагает наличие графопостроителя DIGIGRAF -1008.

В программу вводятся сведения о числе ПФ, используемых для расчета, о степени разложения, симметрии кристаллической решетки и образца, об угловом расстоянии между точками ПФ и степени интерполяции. Затем вводятся 5 трехзначных чисел, указывающих, какая из возможностей программы /см. рис. 3/ реализуется, а также расстояние между изолиниями на графиках /см. рис. 4-6/. Далее требуется номер измерения и название исследуемого вещества. Кроме этого, вводятся постоянные решетки и в случае кубической кристаллической симметрии - коэффициенты  $A_{\mu\nu}^{\mu\nu}$  /уравнение /5// в виде целых чисел. Если  $C_{\ell}^{\mu\nu}$  - исходные данные, то требуется чтение этих величин. В случае счета на основе факторов  $F_{\ell}^{\nu}$  и ПФ вводятся миллеровские индексы и веса ПФ. Затем следует или чтение  $F_{\ell}^{\nu}$ , или ввод дальнейшей информации о ПФ. Надо ввести  $\mu d$  из формулы  $I = I_0 e^{-\mu d}$  для каждой ПФ. Изменение эффективной толщины образца учитывается согласно уравнениям /16/ и /17/. Для каждой ПФ требуется ввод числа циклов в режимах отражения и пропускания пучка, двойной брэгговский угол, время измерения и величина постоянного фона для отражения и пропускания. Число циклов на отражение и пропускание может быть 16 для  $\Delta\Phi = 6^\circ$  или 19 для  $\Delta\Phi = 5^\circ$ . Затем вводится экспериментальная ПФ с угловым расстоянием 6 или 5 градусов. При вычислении теоретических ПФ, отличных от экспериментальных ПФ, надо указать, сколько вычисляется ПФ и с какими миллеровскими индексами, которые должны быть меньше 10. /h.k.,  $\ell < 10$ /. В программе предусмотрена возможность вывода координат изолиний на перфокартах. Настоящая версия программы TEXTUR занимает 71200<sub>8</sub> слов оперативной памяти БЭСМ-6.

Для обработки 6ПФ для вещества с гексагональной кристаллической симметрией при разложении до  $\ell = 22$  и с полным использованием возможностей программы расходуется 20 минут счетного времени БЭСМ-6. При отказе от исправления выбитых точек, интерполяции, определения ОПФ и теоретических ПФ расходуется 8 минут.

В заключение автор выражает свою благодарность П.Земану за помощь при создании части программы, касающейся рисования результатов, и Е.А.Горемычкину за критическое обсуждение работы.

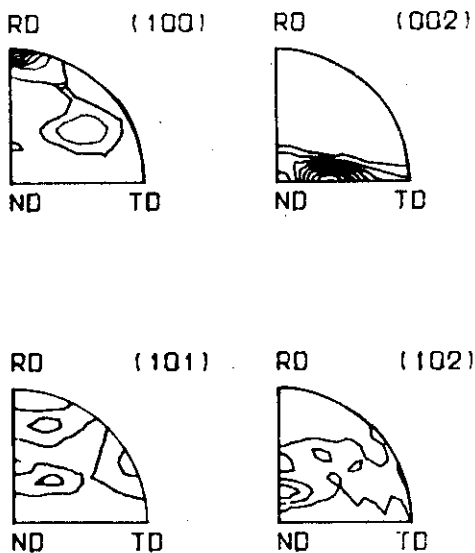


Рис.4. Комплект полюсных фигур, нарисованный графопостроителем DIGIGRAF-1008.

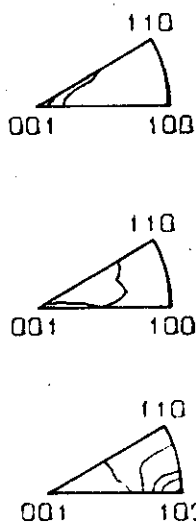


Рис.5. Обращенные полюсные фигуры в направлениях HN, HP и PH, нарисованные графопостроителем DIGIGRAF-1008.

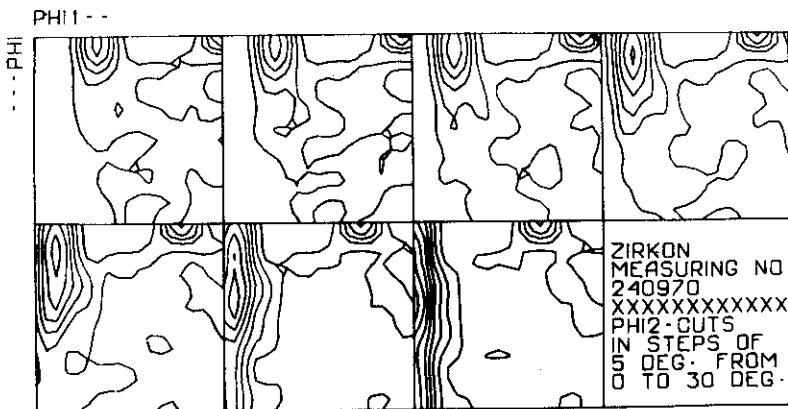


Рис.6. ФРО вещества с гексагональной решеткой, нарисованная графопостроителем DIGIGRAF-1008.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Bunge H.-J. Mathematische Methoden der Texturanalyse, Akademie-Verlag, Berlin, 1969.
2. Imhof J. Z. Metallkunde, 1977, 68, 38.
3. Ruer D. Thesis, Metz University, Metz, 1976.
4. Wassermann G., Grewen J. Texturen metallischer Werkstoffe, Springer-Verlag, Berlin, 1962.
5. Андреев А. и др. ОИЯИ, Р14-12690, Дубна, 1979.
6. Мазный Г.П. Программирование на БЭСМ-6 в системе "Дубна". "Наука", Москва, 1978.
7. Решения III Всесоюзной конференции по текстурам и рекристаллизации в металлах и сплавах, Красноярск. Изд. Красноярского политехнического института, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел  
24 декабря 1980 года.