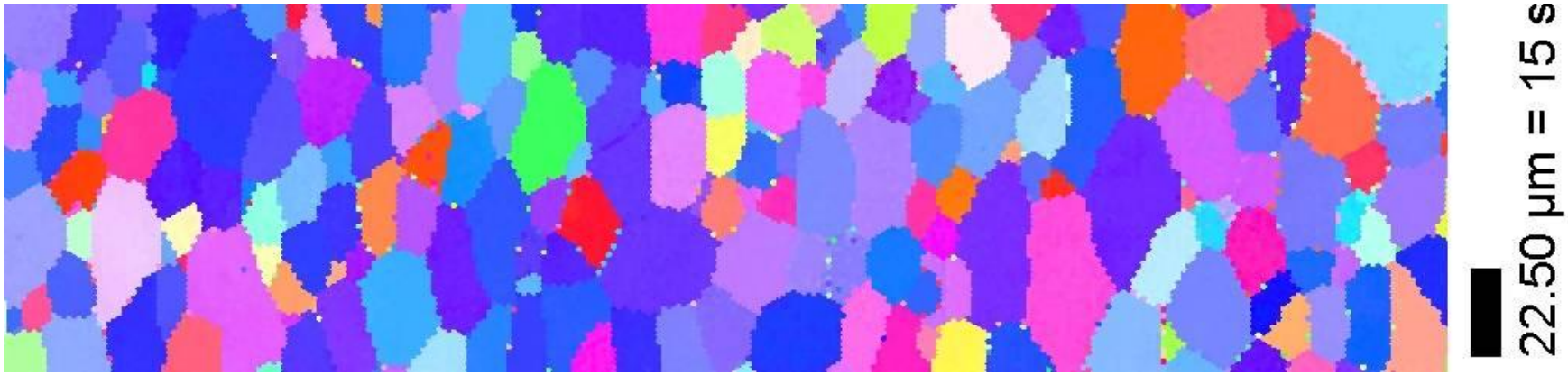
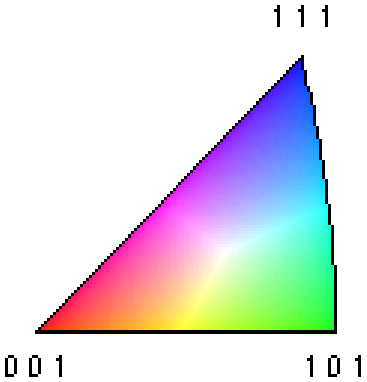
Textura Cristalográfica

Fernando JG Landgraf

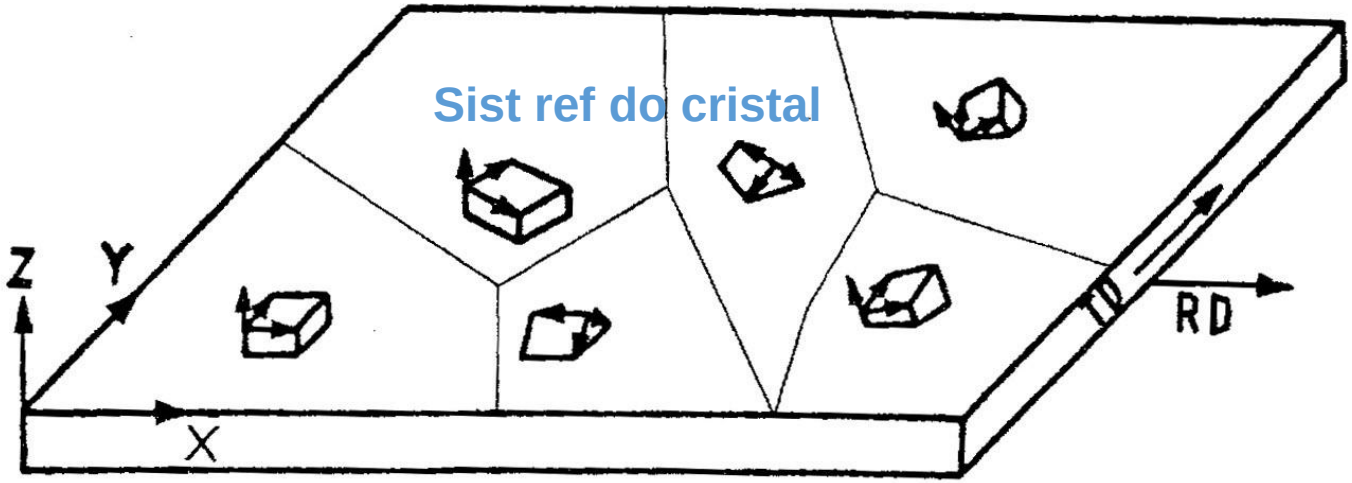




Textura cristalográfica

- **<u>Definição</u>**: a descrição da distribuição de orientações cristalográficas dos cristais
- de um material policristalino
- em relação a um sistema de referência.

Como descrever a orientação?



**Sistema
De referência
Do objeto**

Relevância: Textura cristalográfica afeta propriedades

- Módulo de elasticidade varia com as direções cristalinas: importante para durabilidade de prótese ortopédica
- Deformação plástica varia com as direções: afeta estampagem de embalagem de lata.
- Eficiência energética de motores elétricos depende da textura.

Módulo de elasticidade

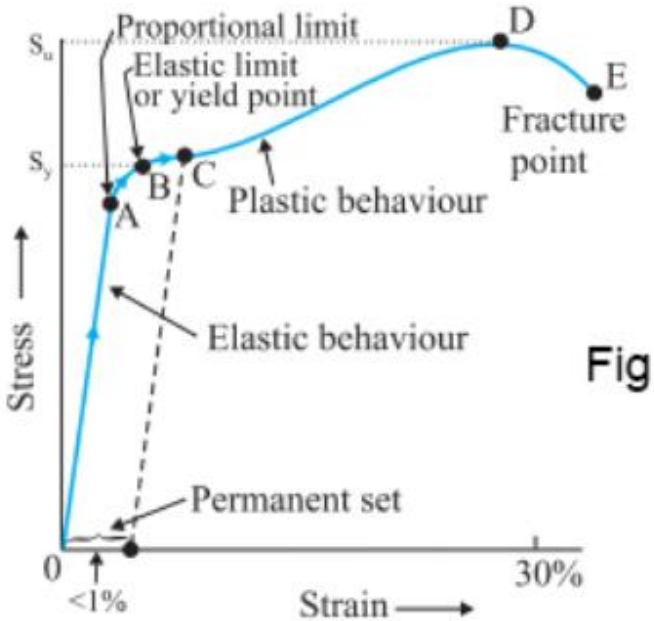
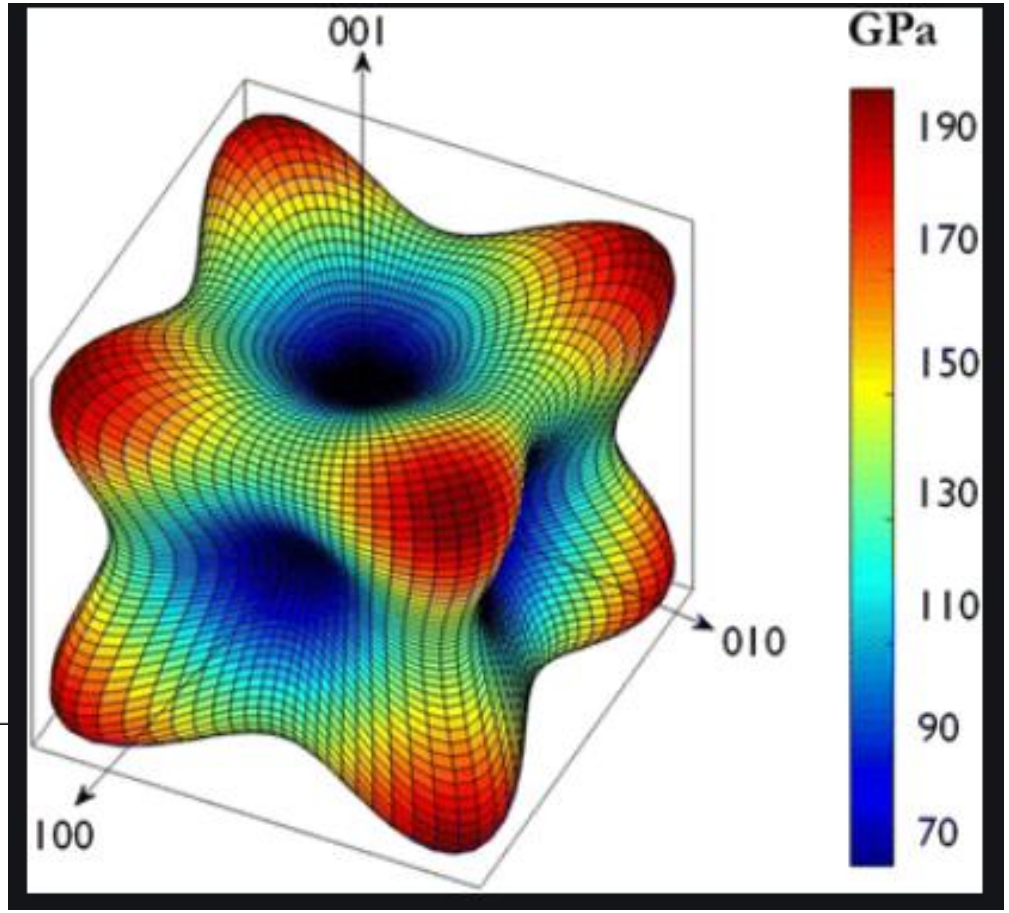


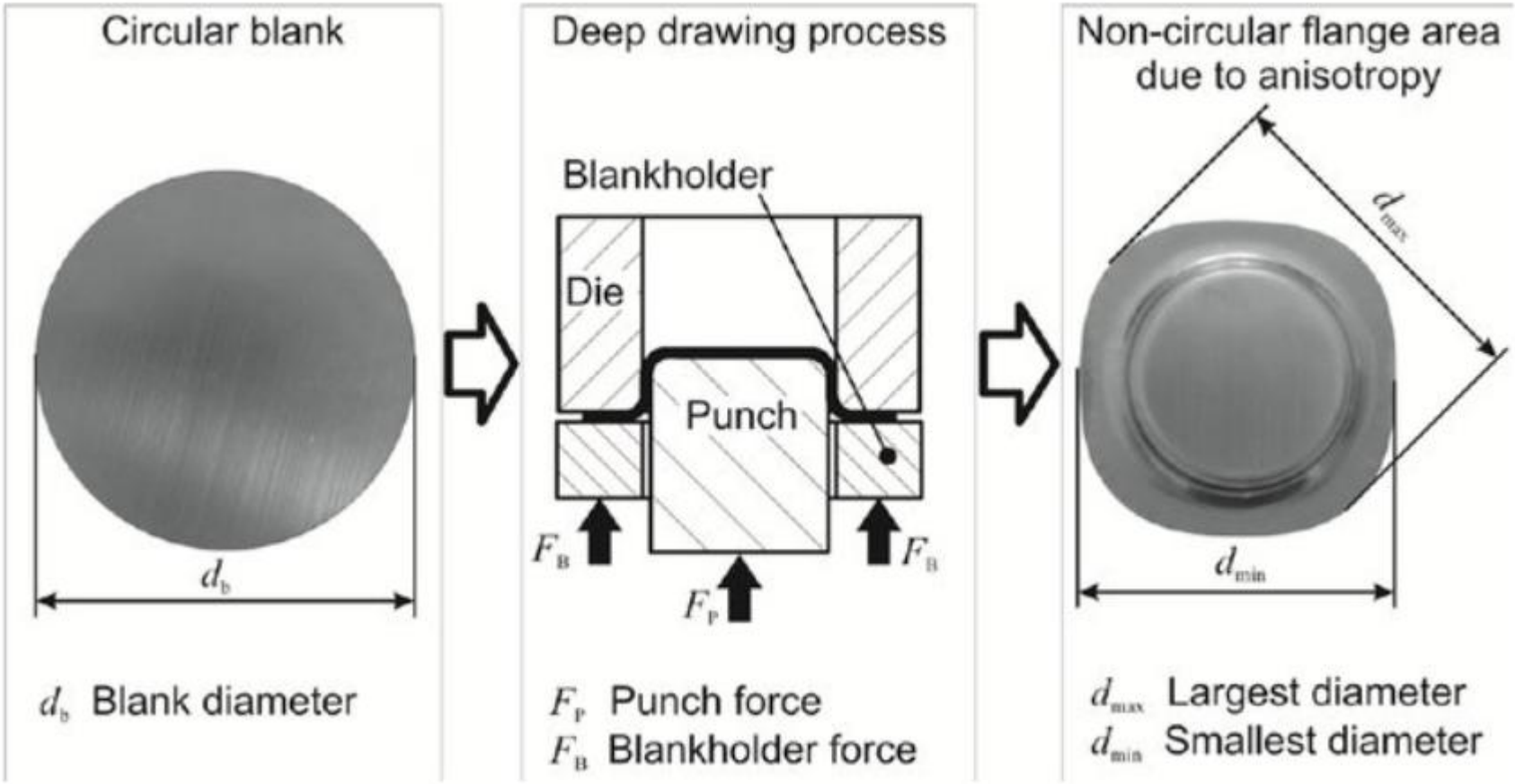
Fig. 1



$E = \sigma/\varepsilon$

$E_{111} > E_{110} > E_{100}$

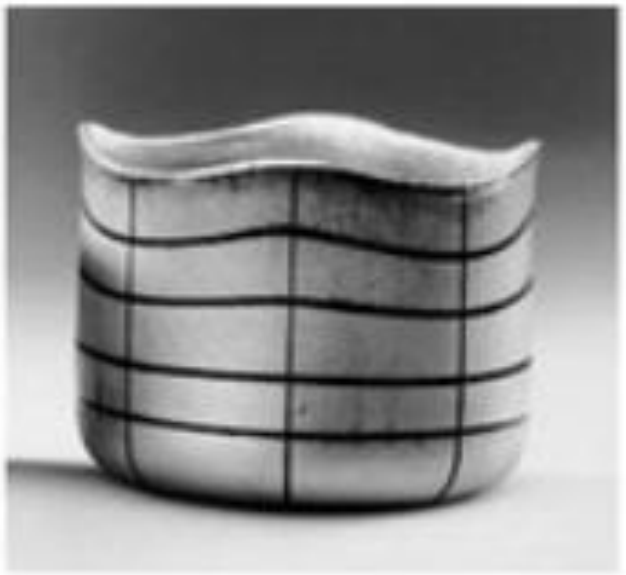
Estampagem:

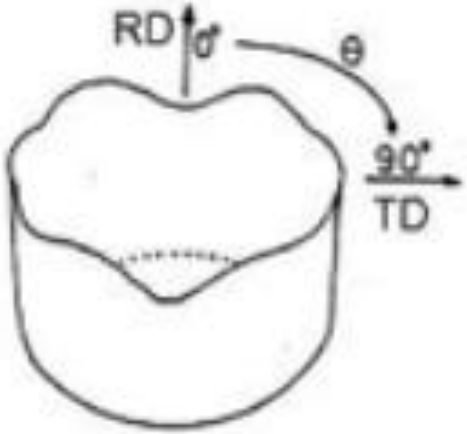


Começa com disco circular. Após estampagem, rebarba não é circular.

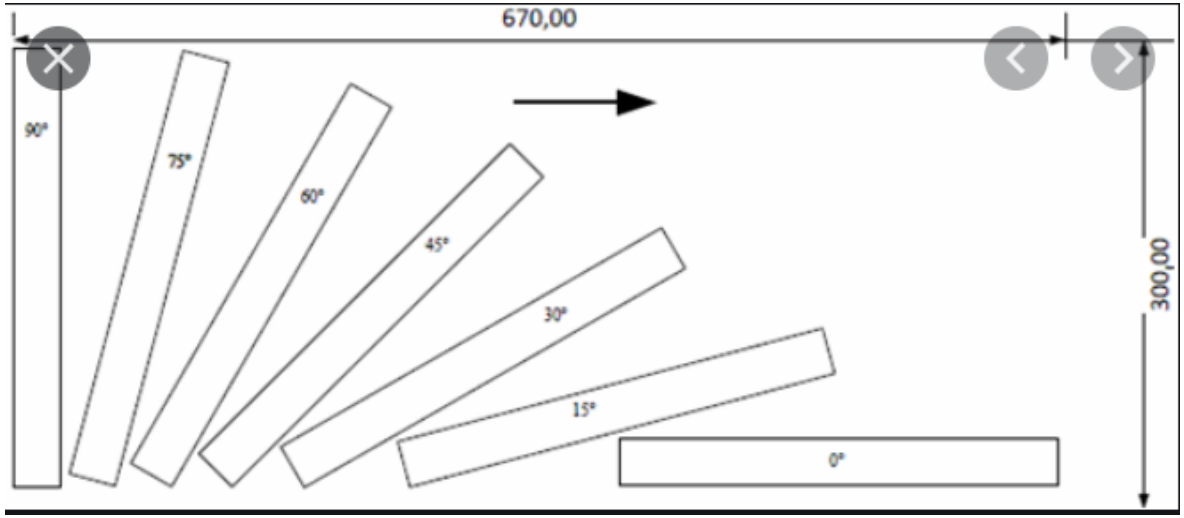
orelhamento

- Partindo de um disco, depois da estampagem ficam orelhas.
- Quanto maior a intensidade do plano (111) paralelo à superfície, menor a altura da orelha.





(c) deep drawn cup



Permeabilidade magnética varia muito com a direção de corte da chapa, mesmo nos aços chamados aços de grão não-orientado.

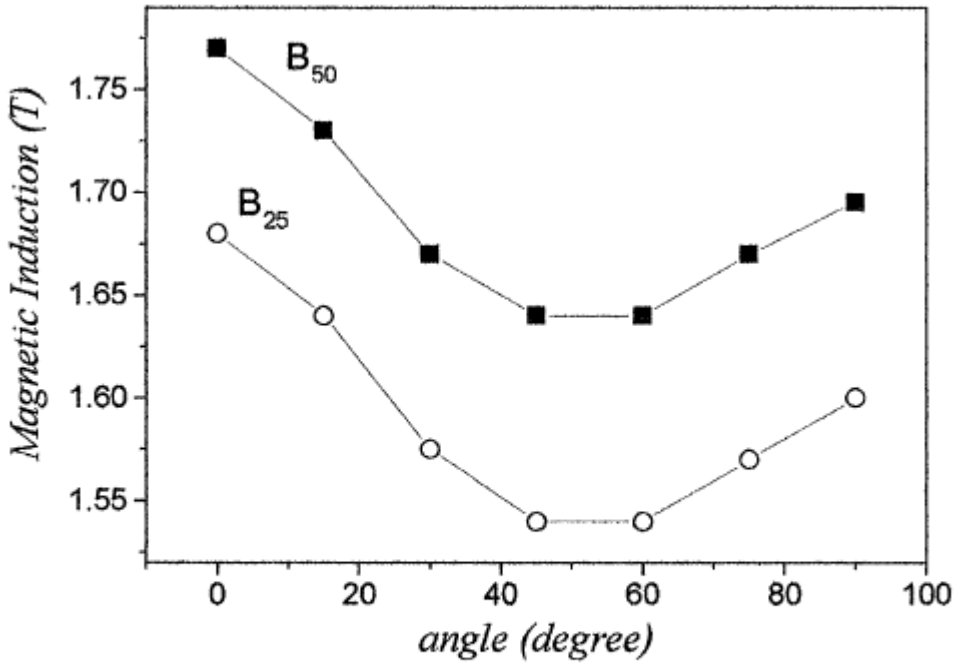
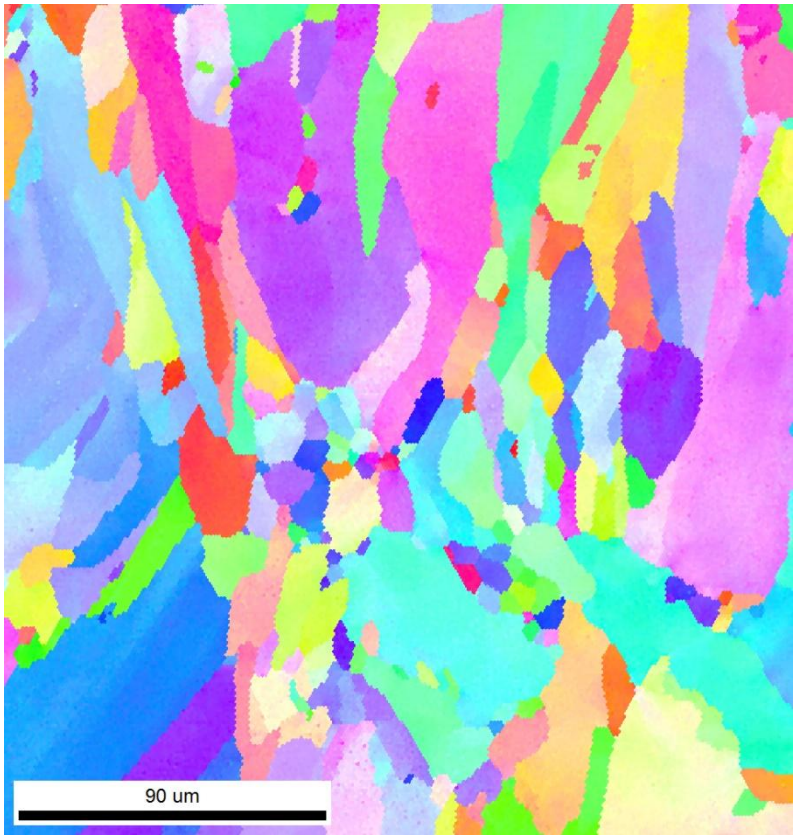


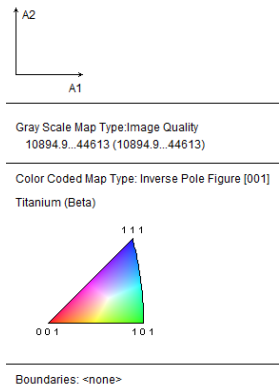
Fig. 1. B_{25} and B_{50} as a function of the angle to the rolling direction.

Como controlar a textura?

- A laminação de chapas a frio altera a textura segundo certos padrões.
- A recristalização no recozimento tende a aleatorizar, mas mantém certos padrões. O controle é quase “receita de bolo”.
- A manufatura aditiva também permite o controle da textura.

Impressão 3D (Manuf. Aditiva) em metais:





Código de cores das orientaçõe s

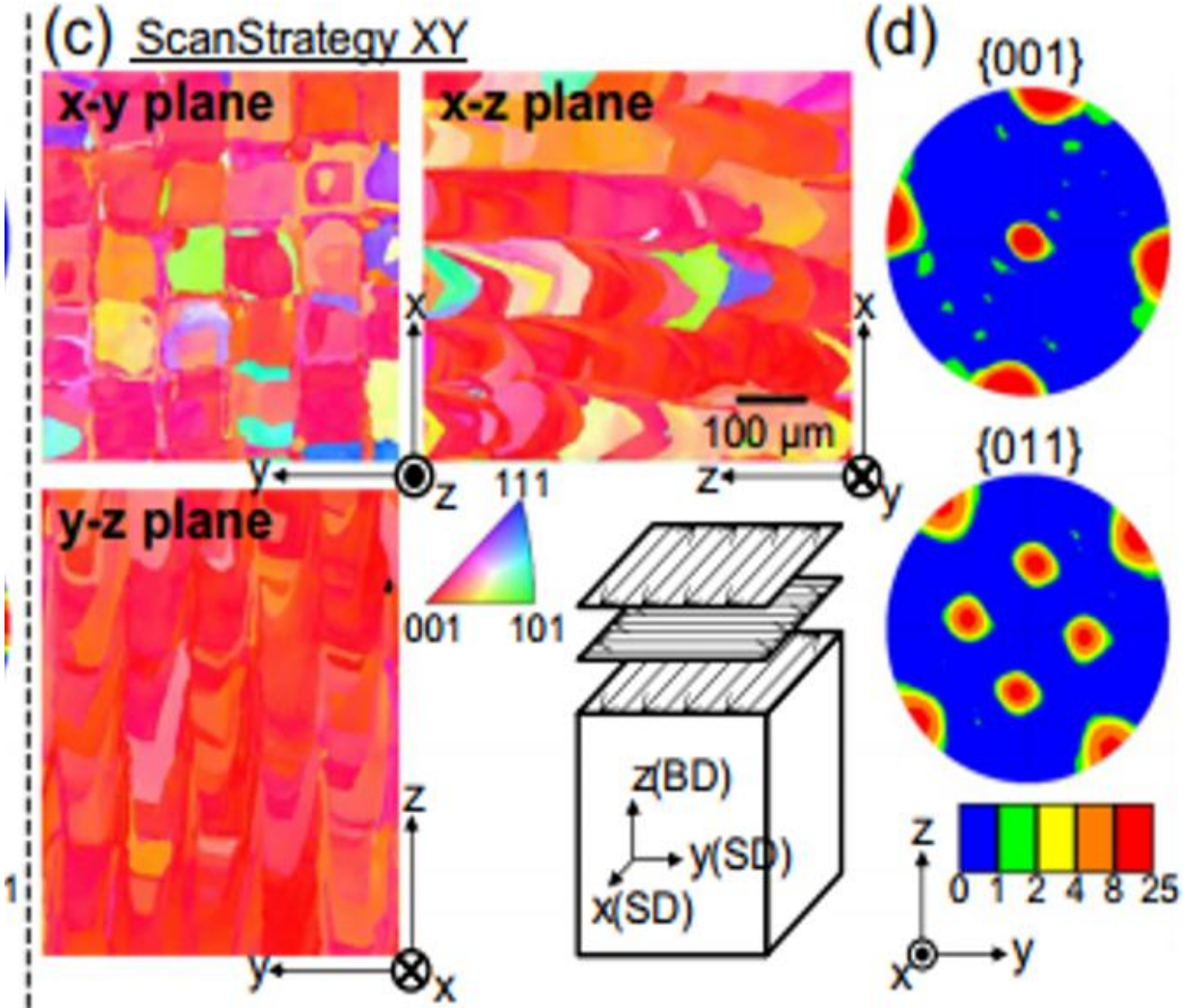
Microestrutura mostrando poça de fusão do laser e grãos.

Amostra F (300 W, 1000 mm/s) aumento de 1000x.

Imagem de EBSD : cores indicam orientação cristalográfica de cada grão.

EBSD amostra F (300 W, 1000 mm/s) aumento de 1000x. Stepsize 1µm

Mestrado em andamento no PMT



Em certos casos é possível obter forte textura cristalográfica

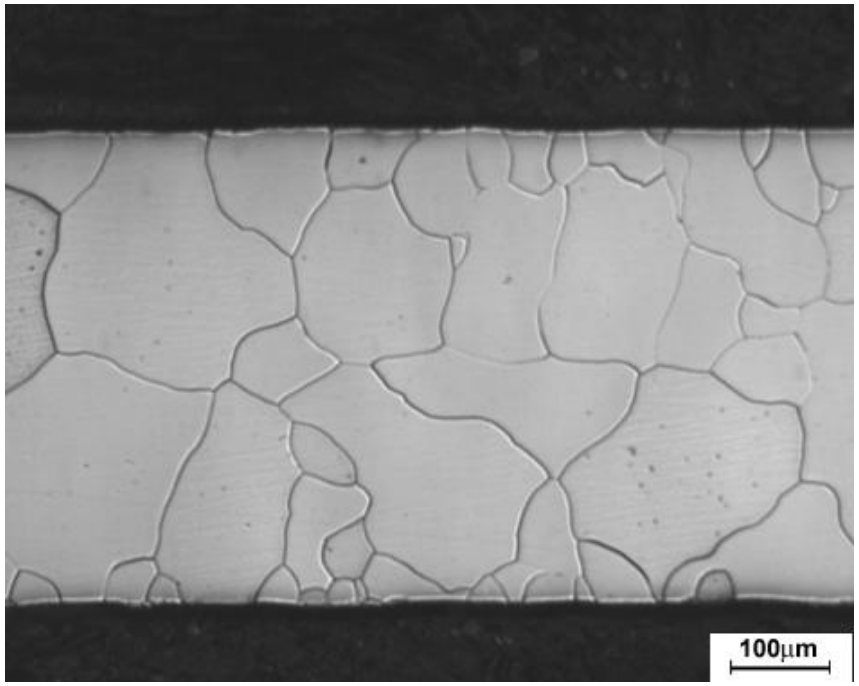
Textura cristalográfica de liga de Ti-Mo produzida por Manufatura Aditiva por Selective Laser Melting.

((c) mapas IPF dos três planos ortogonais. (d) PF {001} e {011} medidas no plano y-z de uma liga Ti-Mo

Fonte: ISHIMOTO et al, 2017

Materiais são policristalinos

- A grande maioria dos materiais são policristalinos: contém muitos cristais (“grãos”).
- Tamanho médio de grão entre 10µm e 1mm.



Chapa de aço usada em motores elétricos

Materiais são policristalinos

- Nanomateriais são aqueles com tamanho médio de grão abaixo de 0,1 µm
- Um C.P. de tração pode ter 10^{10} grãos.
- **Propriedades dependem de carac. dos grãos**:
  - Tamanho
  - Forma
  - **Orientação**

Anisotropia de propriedades

- O valor do **módulo de elasticidade (E= σ/ε)** de um **monocristal** varia com a direção cristalina.

Direção		<100>	<110>	<111>
E_{Ferro}	GPa	125	210	273

- Num corpo **policristalino**

  o valor do módulo numa certa direção

  dependerá da distribuição das orientações dos cristais no interior do corpo.

textura cristalográfica não é ...

- Nem a forma dos cristais
- Nem a rugosidade da superfície do material

Motivos para ocorrer textura

- Solidificação direcional: grãos crescem mais rápido em certas direções.
- Epitaxia: grãos crescem com a orientação do substrato.
- Deformação plástica: grãos sofrem rotação durante deformação (aula 2).
- Recristalização: novos grãos surgem com novas orientações
- Transformações de fase: idem

Como descrever a orientação de um grão

- A orientação é sempre descrita em relação ao sistema de referência.
- Por exemplo, numa chapa laminada, as referências naturais são o plano da superfície da chapa, a direção longitudinal, que é a Direção de Laminação (DL ou RD), a direção transversal (DT ou TD), a direção normal (DN ou ND).
- Num fio, a referência é a direção longitudinal do fio

Figura ????

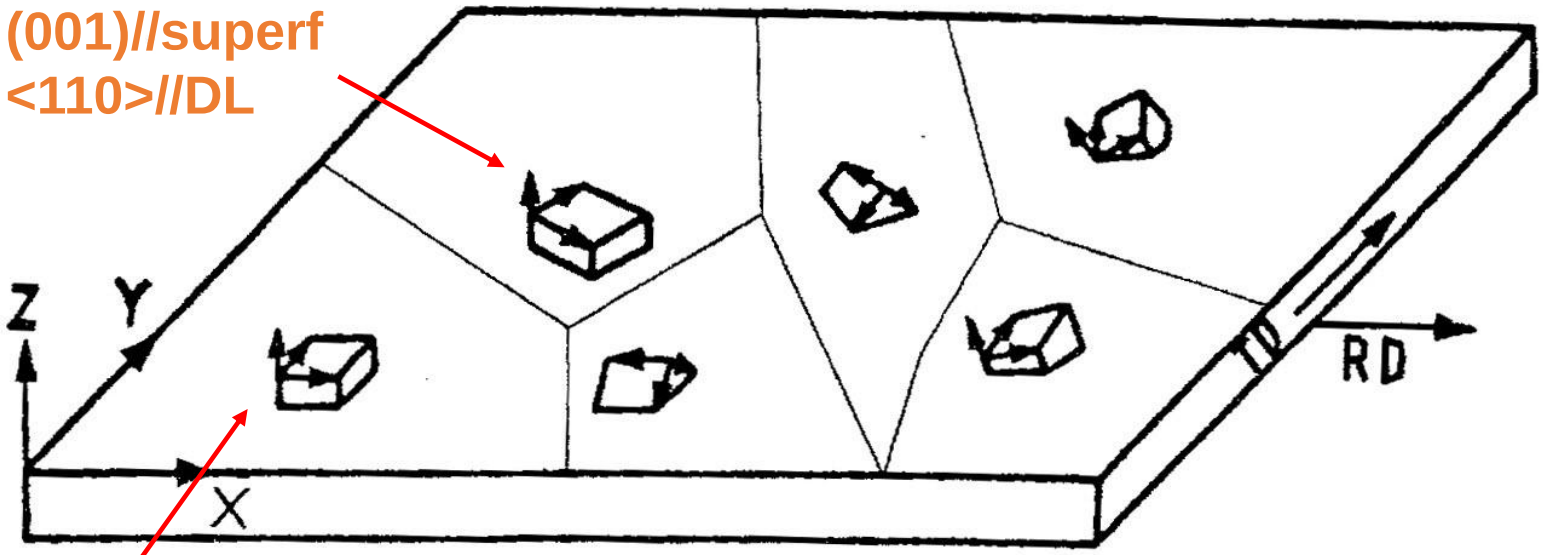
Como descrever a orientação de um grão

- Dizemos que uma chapa tem simetria ortorrômbica: as direções DN, DT e DL são ortogonais, mas não são equivalentes.
- Poderíamos descrever a orientação de um cristal em relação às direções DN, DL e DT da chapa, mas o padrão é usar o plano da superfície da chapa e a DL.
- A orientação de um cristal pode ser descrita pelo índice de Miller do plano cristalino do cristal que é paralelo à superfície e pelo índice de Miller da direção cristalina que é paralela à DL:
- Orientação genérica é (hkl)[uvw]

(hkl) // superf. e [uvw]//DL

Como descrever a orientação de um

Grão 2
(001)//superf
<110>//DL



Grão 1:
(001)//superf
[100] //DL

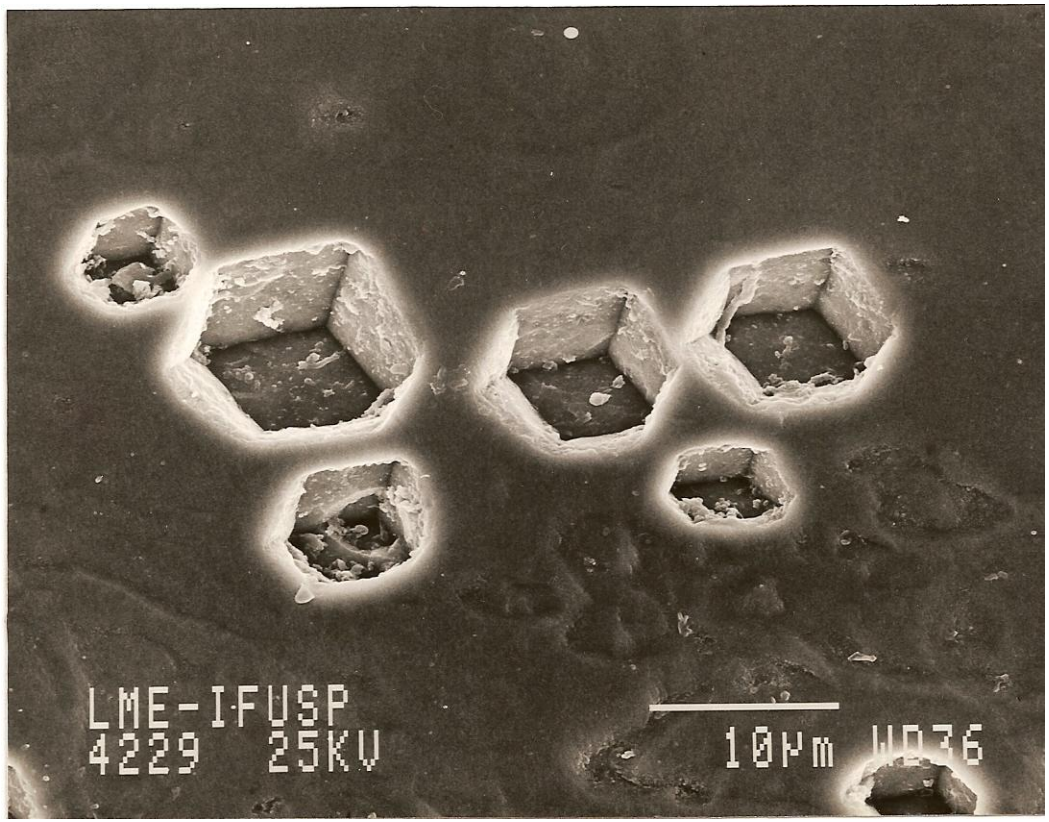
Orientação é
(001)[100]

Três problemas distintos:
-Como determinar as orientações?
-Como representar a distribuição das orientações?
-Como quantificar a distribuição de orientações?

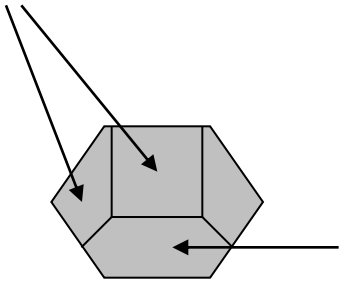
Métodos para determinar a orientação dos cristais

- Observação das cavidades de corrosão (“etch pit”) em cada grão: ataque químico expõe planos de baixo índice de Miller.
- Difração de raios X
- Difração de elétrons
- Difração de neutrons

Cavidades de corrosão



Paredes laterais do furo

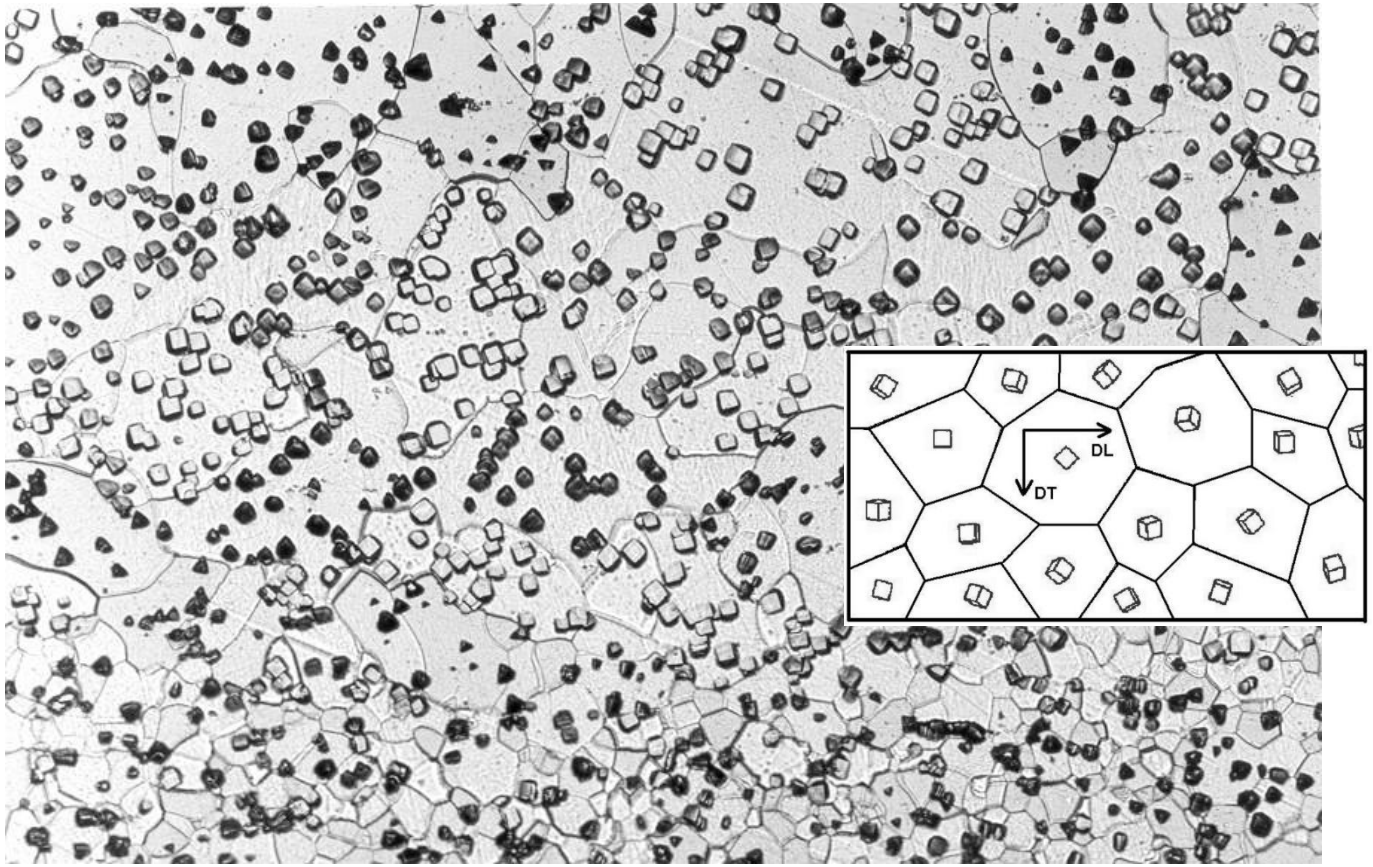


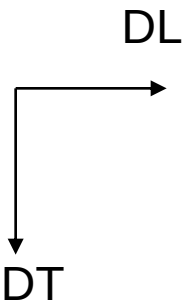
fundo do furo

Furo de seção hexagonal

Nota-se que na superfície de um único cristal,
a corrosão forma furos de mesma orientação (“pites”)
É possível identificar a orientação do cristal pelo desenho dos furos

Orientação dos grãos vista por “etch pit”





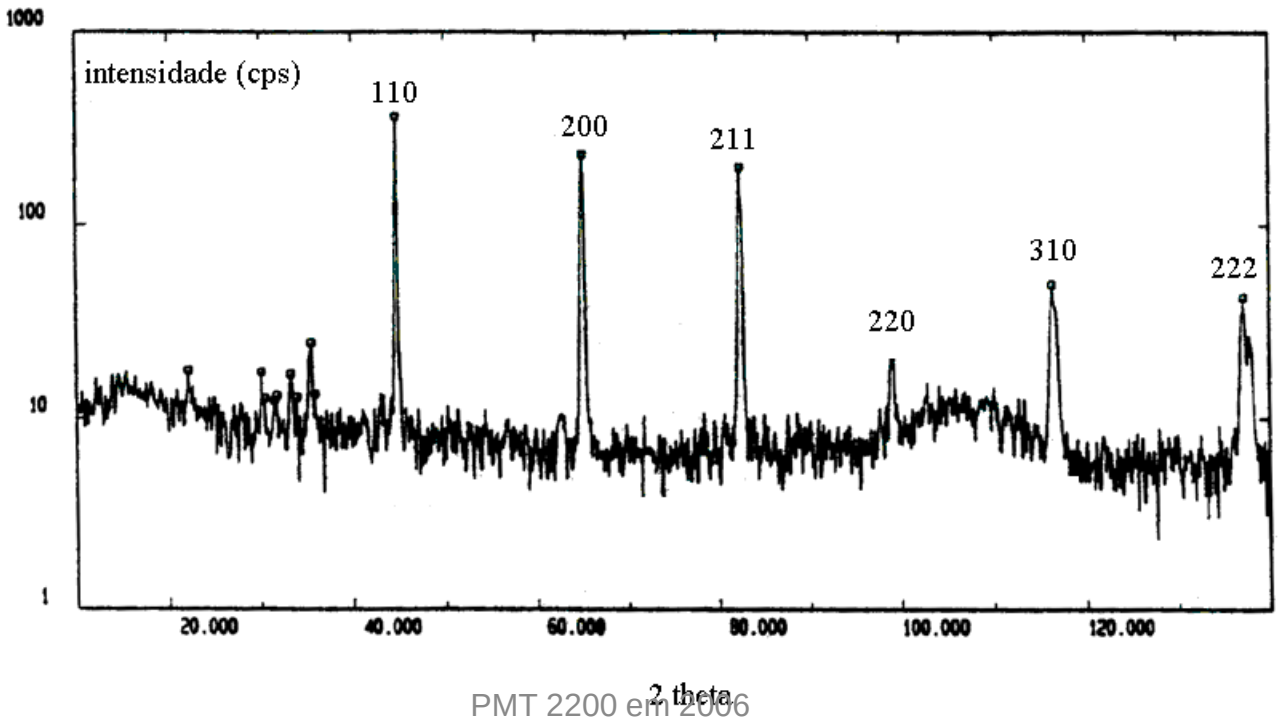
Algumas orientações são fáceis de identificar, mas a maioria não é

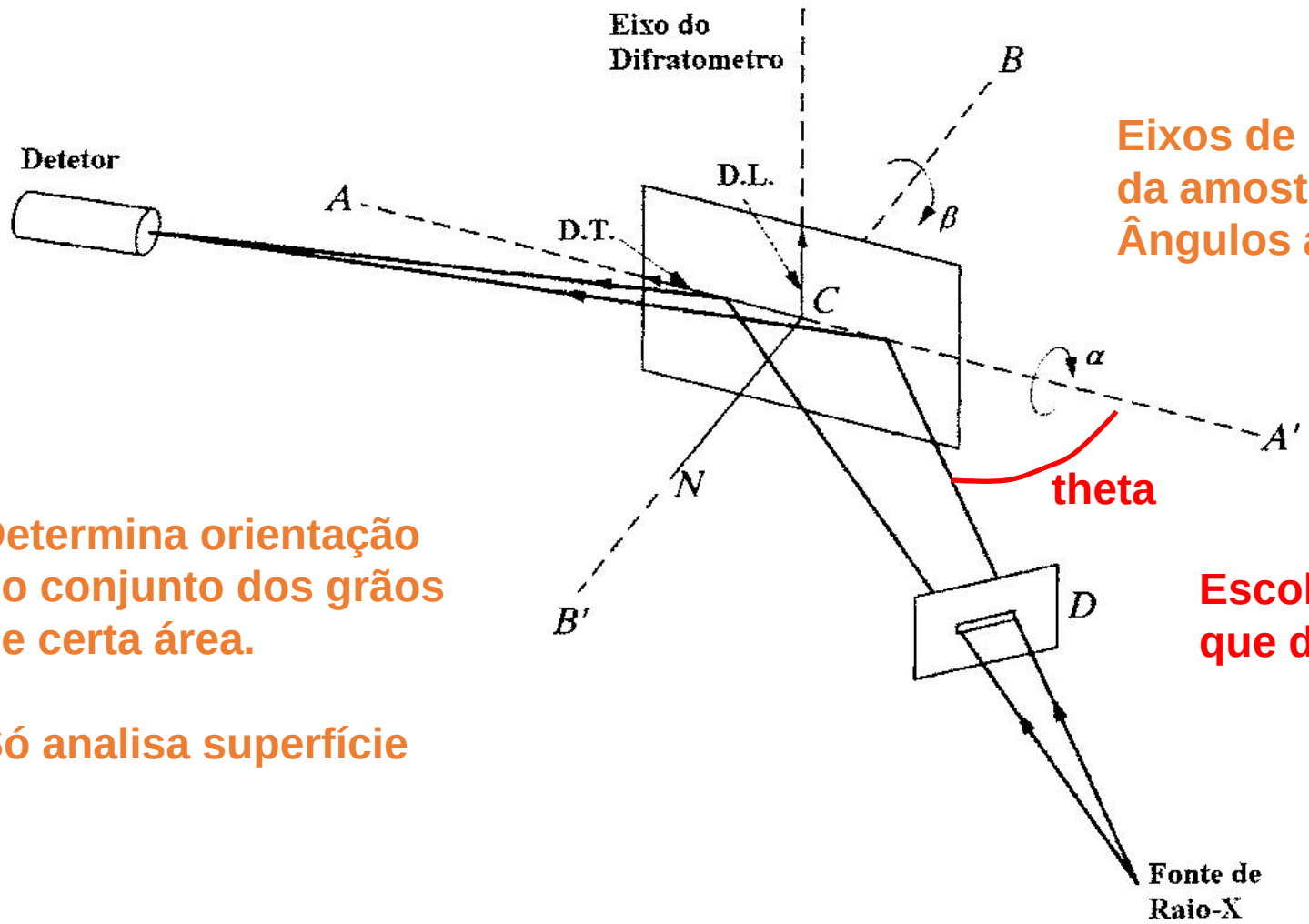
Difração de raios x

Na geometria mais comum,

(com DN no mesmo plano que feixe incidente e refletido)

Só detecta a presença dos grãos que tem os planos (110), (200), (211), (220), (310) e (222) paralelos à superfície





Eixos de rotação
da amostra
Ângulos alfa e beta.

theta

Determina orientação
do conjunto dos grãos
de certa área.

Só analisa superfície

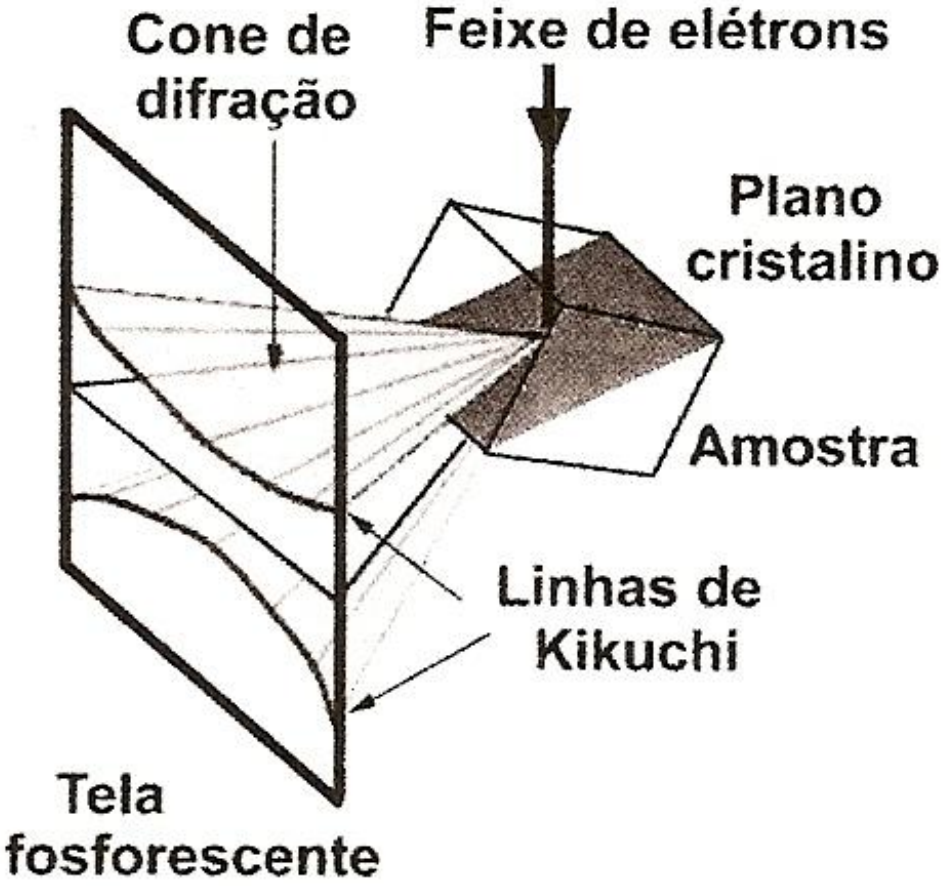
Escolhe-se ângulo
que dê difração

Difração de elétrons por EBSD

EBSD:
Electron back scatter diffraction
Difração de eletrons retroespalhados

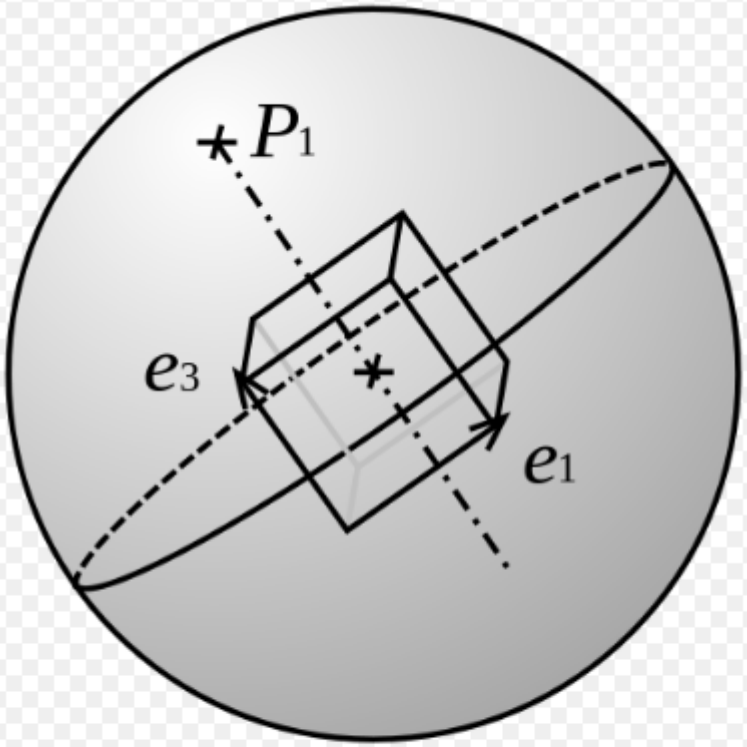
Determina orientação de cada grão

Só analisa superfície

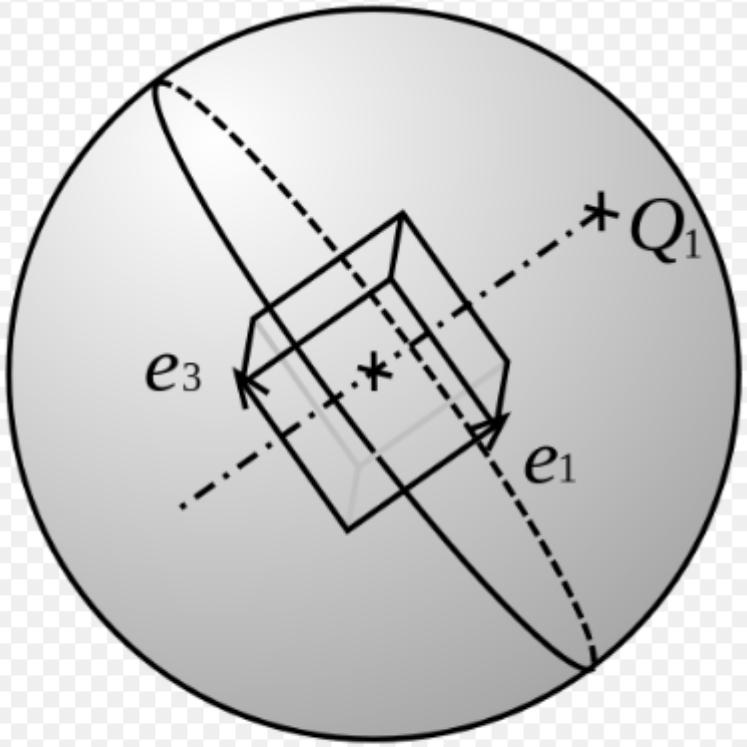


Métodos de representação

- Figura de pólo inversa
- Figura de pólo direta
- Espaço de Euler



P_1 : pôle du plan (e_1,e_2) - plan (001)

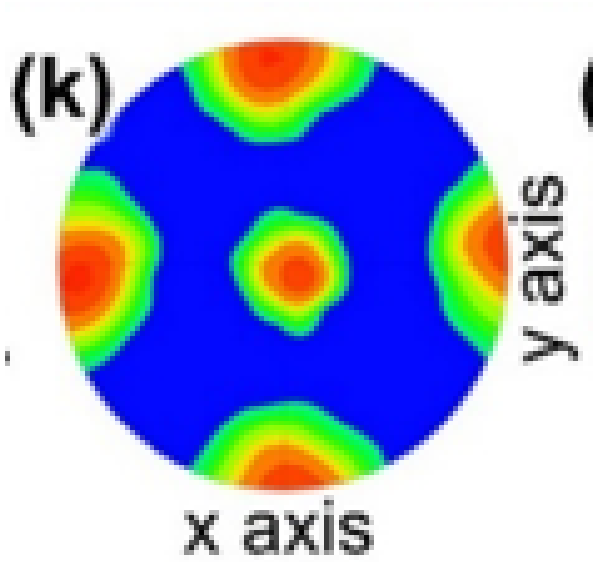


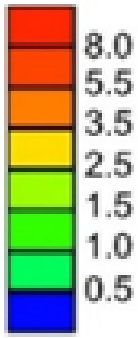
Q_1 : pôle du plan (e_2,e_3) - plan (100)

Figura de polo direta

- Num material policristalino, Representa as intensidades relativas da ocorrência espacial de um certo plano cristalino ou direção cristalina na amostra em análise.

FPD para plano (100)





Escala de cores para intensidade

Intensidade é relativa. Se distribuição de orientações fosse totalmente ao acaso, o círculo seria todo verde, correspondendo a intensidade 1 para todas as direções. Se, ocorrem muitos em certas direções

Figura de polo direta

- O mesmo material, o mesmo plano do material, pode ser analisado em função de diferentes planos cristalinos.
- As figuras de polo deverão mostrar que são compatíveis entre si.
- Se o material tem textura do tipo “cubo na face”, como mostra a figura de polo (100), necessariamente a figura de polo (110) tem que ter aquela distribuição de polos.

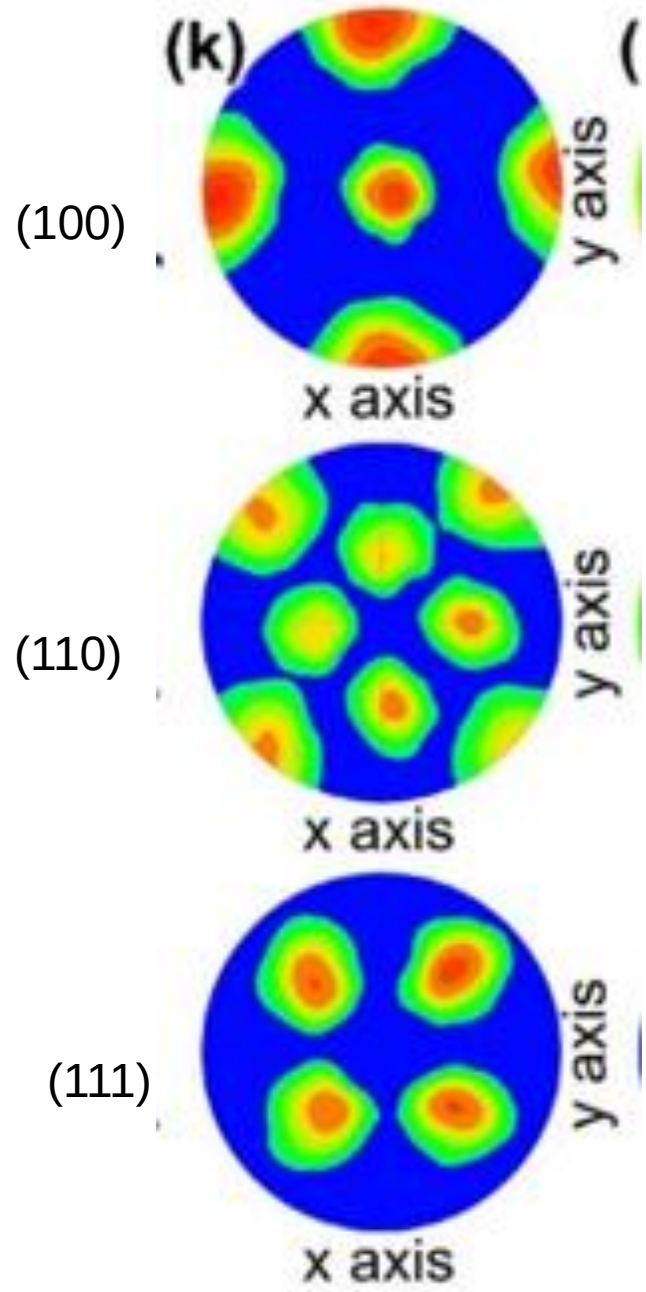
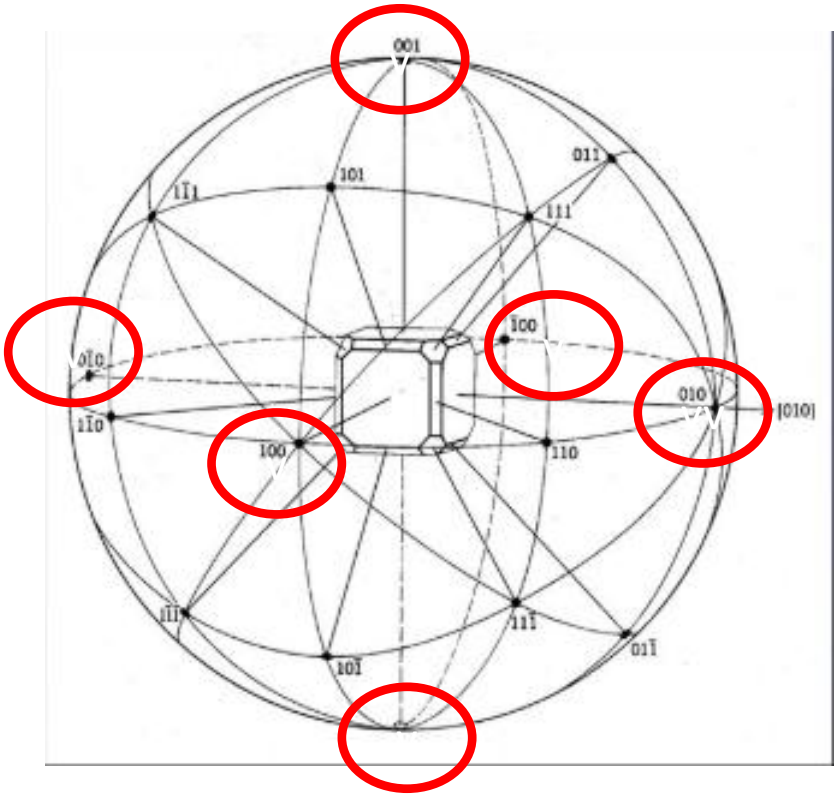


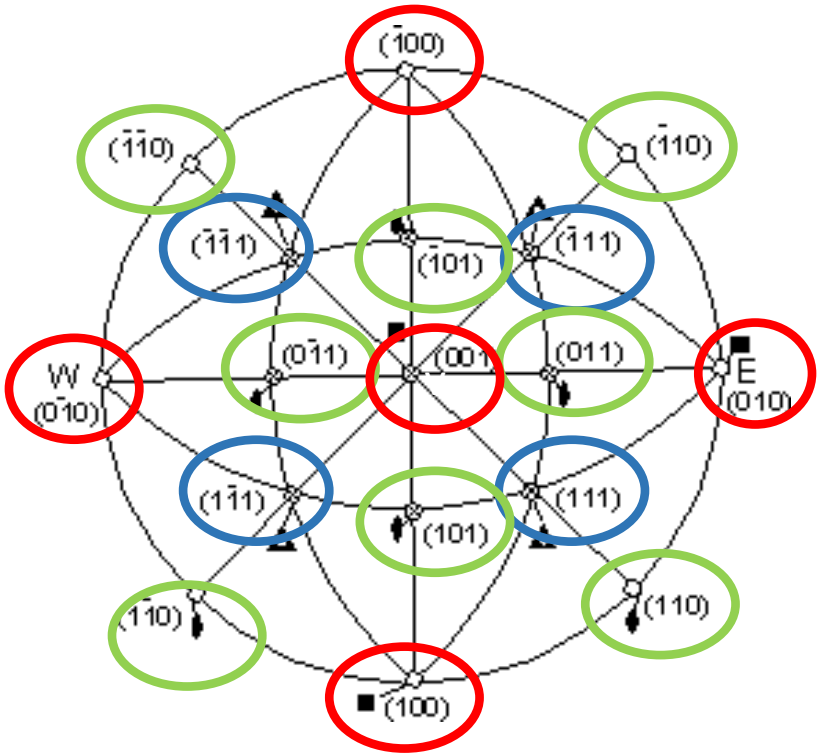
Figura de polo inversa: Para entender as cores das imagens do EBSD



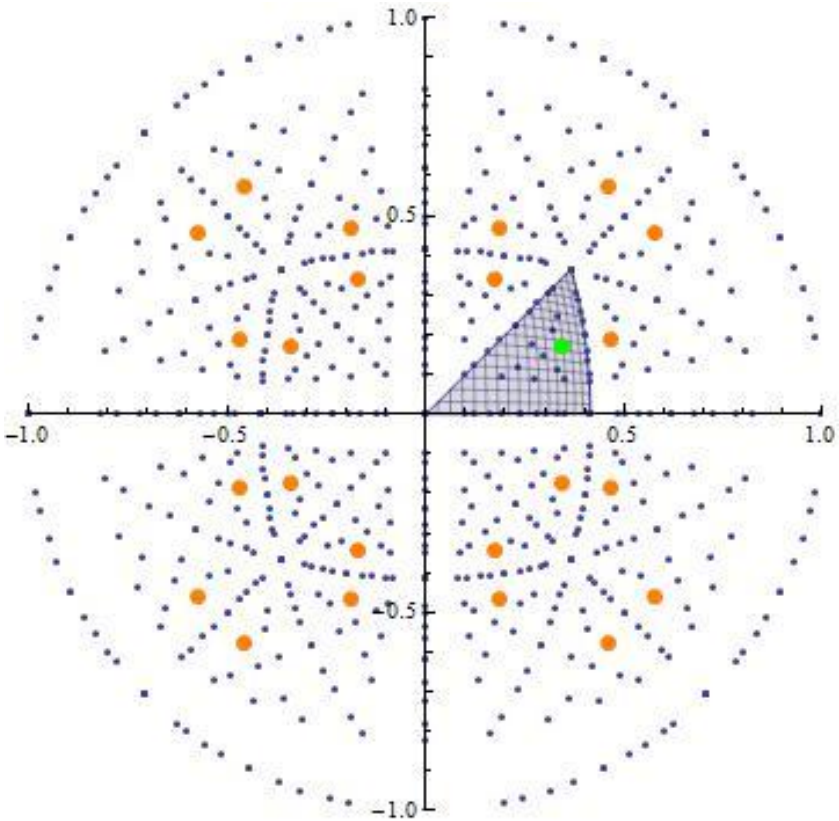
- Uma “projeção estereográfica” de um cubo no centro da esfera mostra onde as normais a cada plano cristalino intercepta a esfera de referência.
- Notar onde as direções da família <100> interceptam a esfera.
- Vamos olhar essa esfera de cima

Para entender as cores das imagens do EBSD (II)

- Podemos ver onde algumas das direções cristalinas cruzam a esfera de referência, vista de cima.
- a direção [001], normal ao plano (001), fica bem no centro.
- Vemos 5 direções da família<100>.
- Vemos 4 direções da família <111>
- Vemos 8 direções da família <110>



Para entender as cores das imagens do EBSD



as direções de maior índice tem maior número de variantes.

O desenho ao lado mostra, em laranja, a localização dos 24 polos da família <425>

Note que um dos 24 polos dessa família cai dentro daquele triângulo hachurado: aquele **ponto verde**.

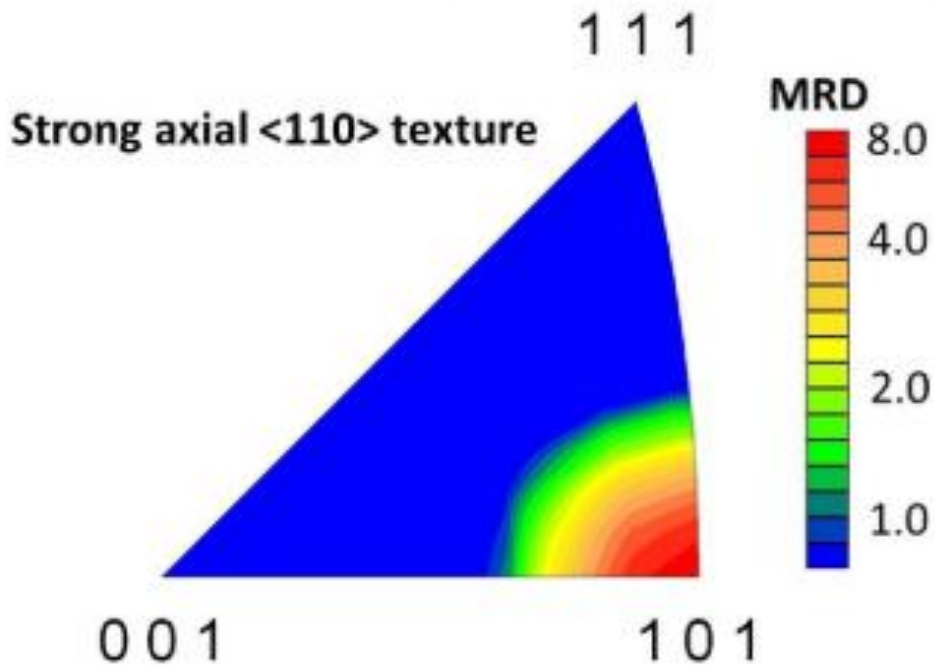
Devido às simetrias da estrutura cúbica, QUALQUER família de direções terá sempre um polo naquele triângulo

É possível representar a textura na figura de polo inversa

15

Grain Orientation Distribution

Axial texture is easily represented on an inverse pole figure

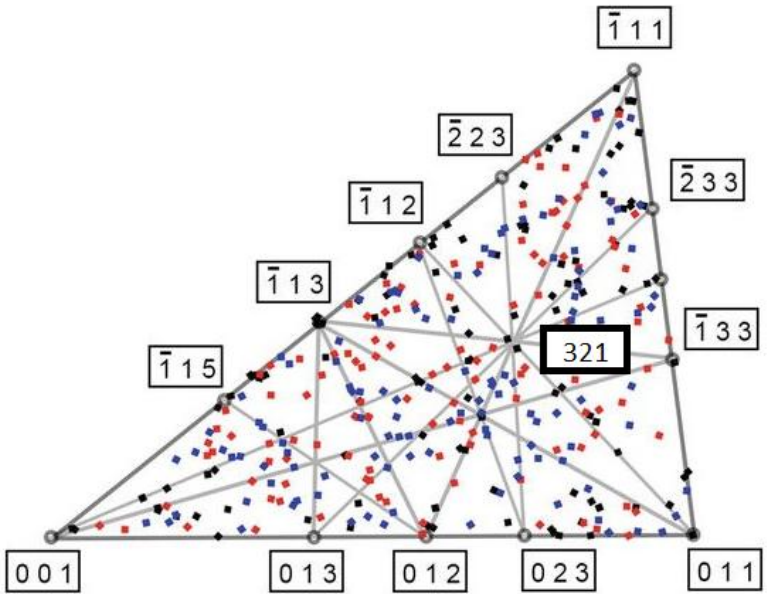


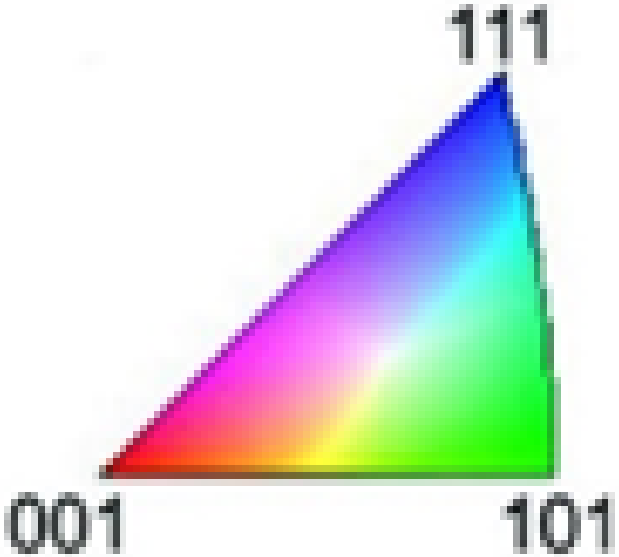
Data from a Si-Fe alloy that has a strong Goss texture component, which means crystals aligned with <100>//RD and <011>//ND

960 × 720

Please acknowledge Carnegie Mellon if you make public use of these slides

Outro uso da FPI (IPF): Para entender as cores das imagens do EBSD





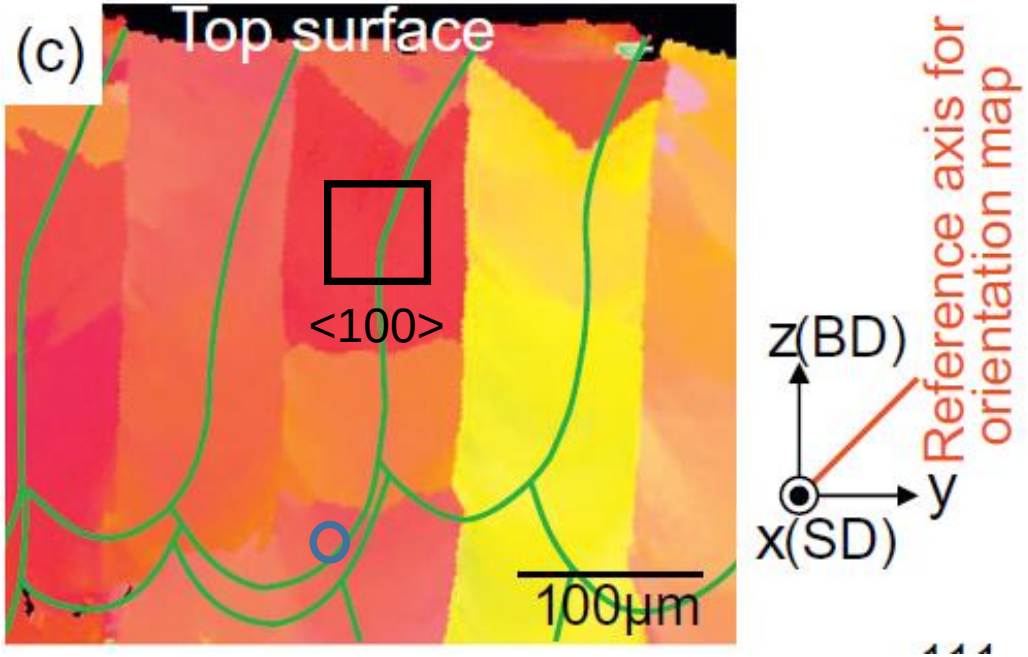
Portanto posso criar um código de cores para as direções cristalinas. Sempre adotamos essa referência acima.

Análise da textura por EBSD com Imagem de Figura de Polo Inversa

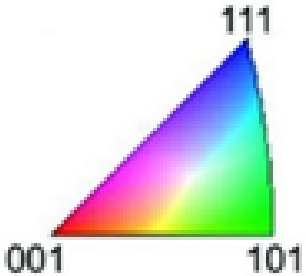
O MEV determina a orientação cristalográfica de cada região de 1um3 onde para o feixe de elétrons.

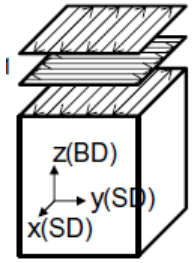
O operador informa o software que quer pintar cada pixel com a cor da direção cristalográfica <u>paralela a uma direção do sistema de referência</u> da nossa amostra.

A figura ao lado mostra que os pixeis foram pintados com a cor da

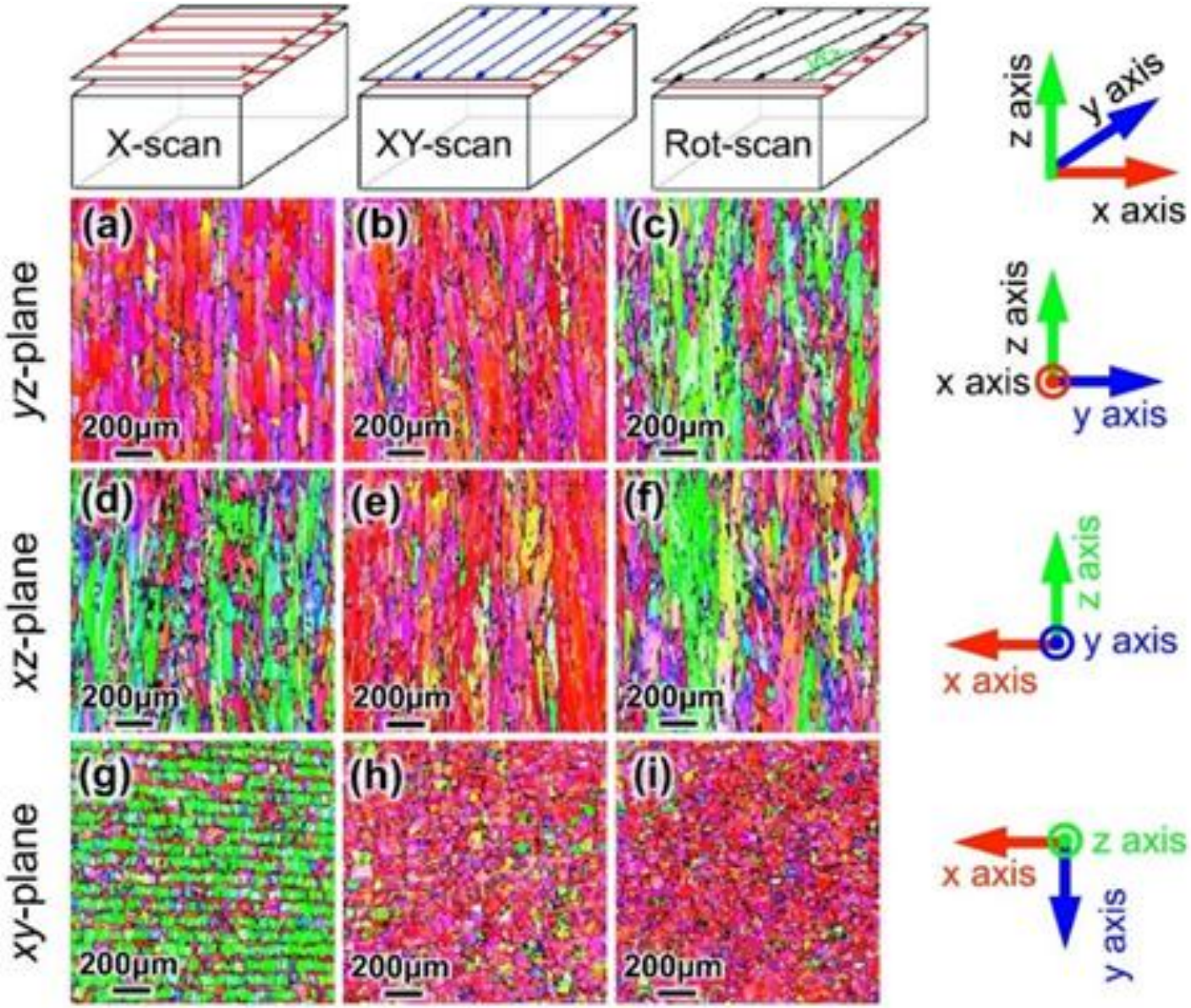


Portanto, um grão vermelho demonstra que todos os pixeis que o compõe estão orientados de maneira que seu eixo <100> está alinhado paralelamente à direção X da amostra.

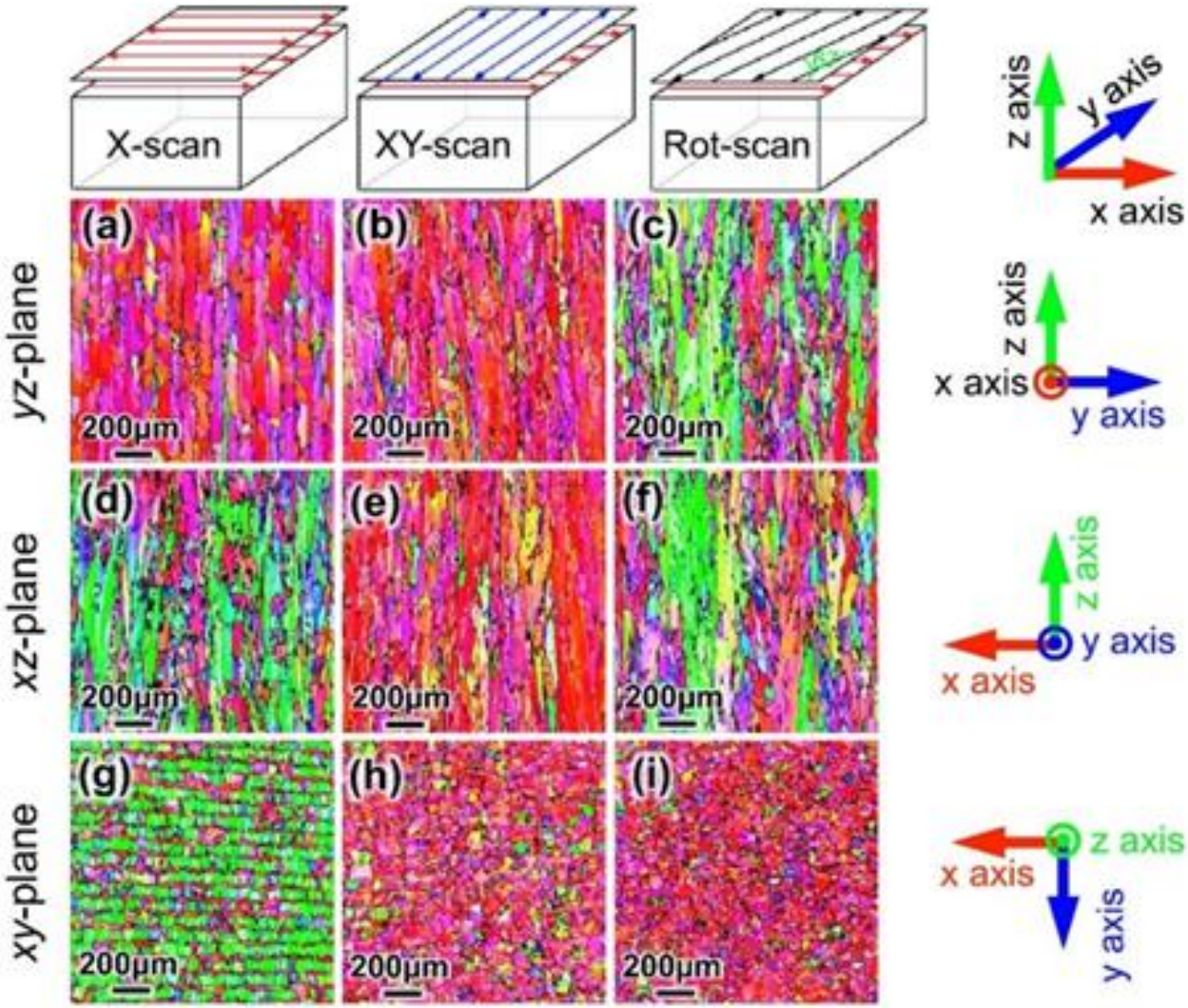




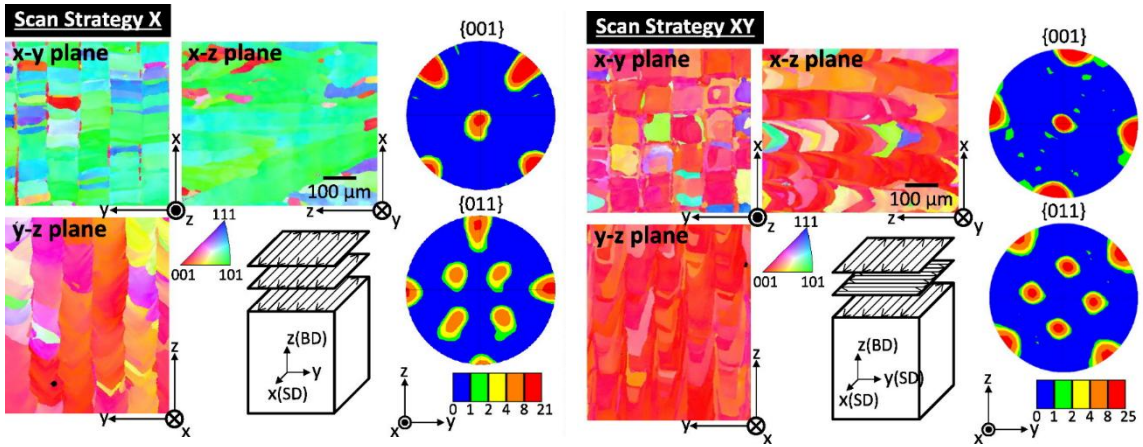
Atenção à coluna b-e-h : entender que é “cubo na face”



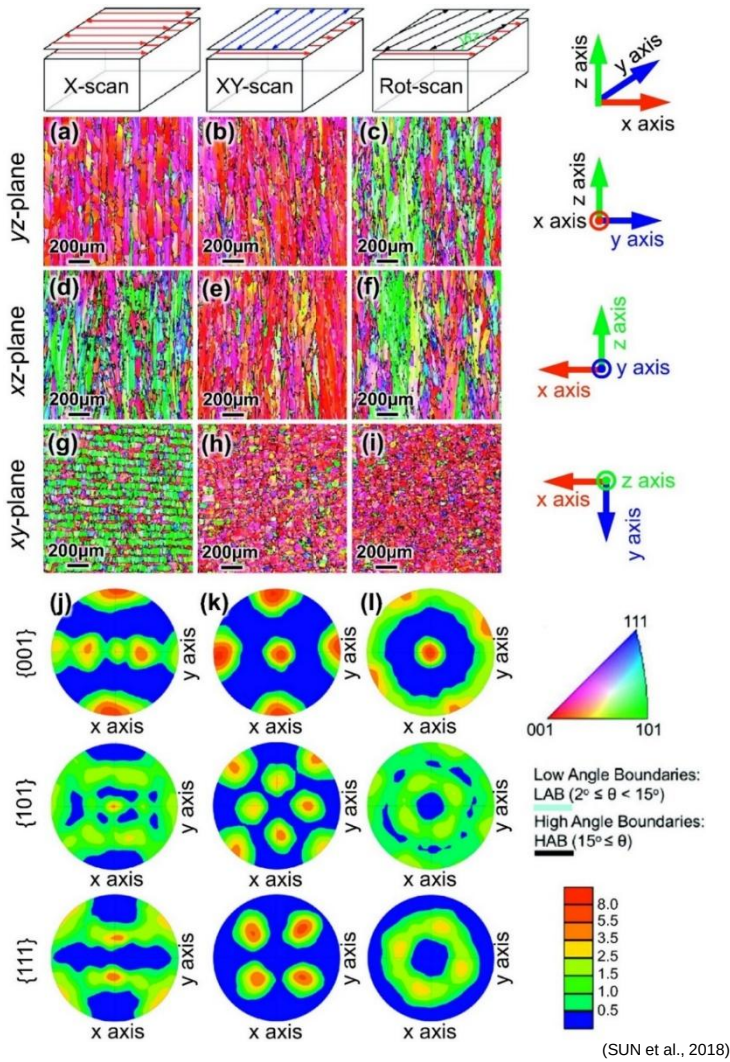
Manufatura aditiva: efeito da variação da estratégia de varredura do caminho do laser ao fabricar o material



Dois artigos, com ligas diferentes, deram resultados similares, usando estratégia XY:
Ishimoto analisou liga Ti–15Mo–5Zr–3Al, CCC
Sun analisou liga 80Ni20Mo, CFC



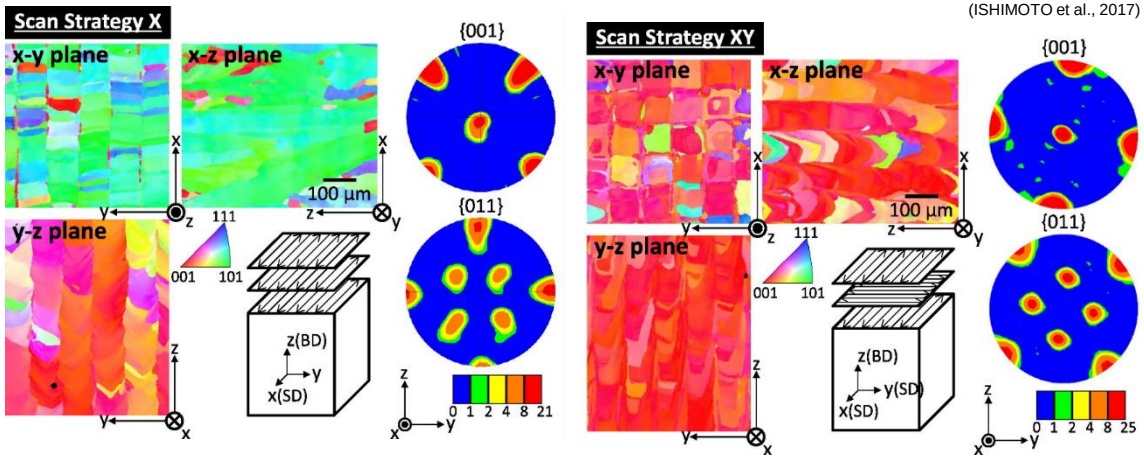
(ISHIMOTO et al., 2017)



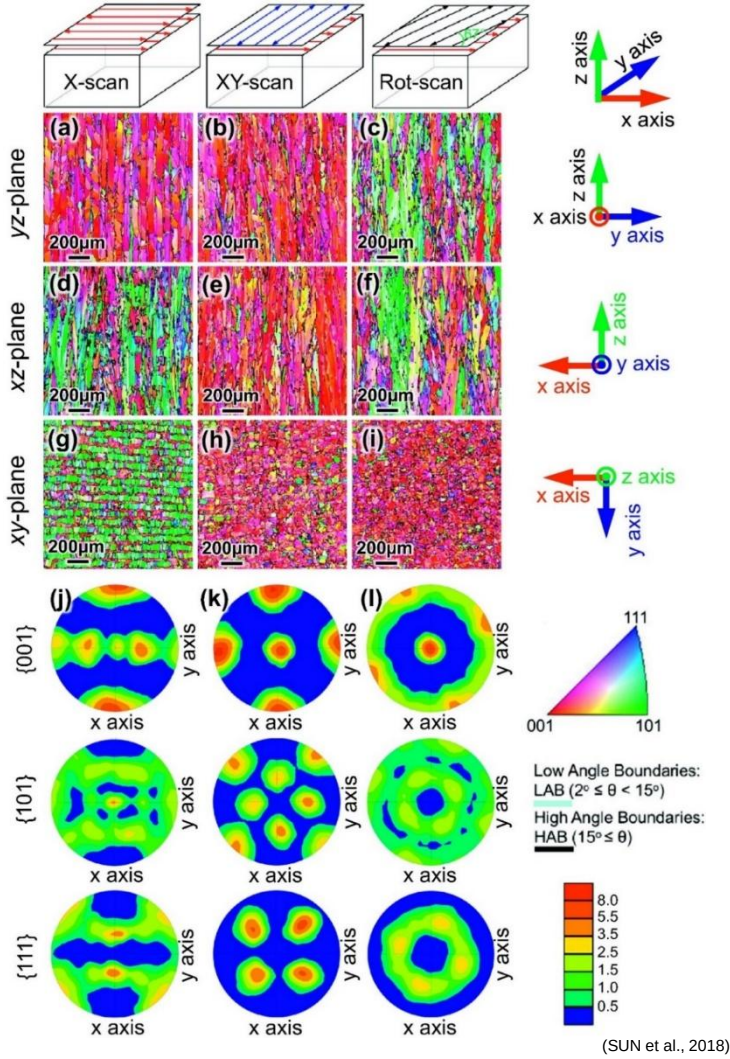
(SUN et al., 2018)

Em ligas com estrutura cúbica:
Scan X deu <110>//BD, com [100]//x: é “cubo rodado”
Scan XY deu [001]//BD, com [100]//x é a “cubo na face”
Sacn rotacionado 67º deu [001]//BD,
é a “fibra cubo”

A literature as vezes causa problema



(ISHIMOTO et al., 2017)

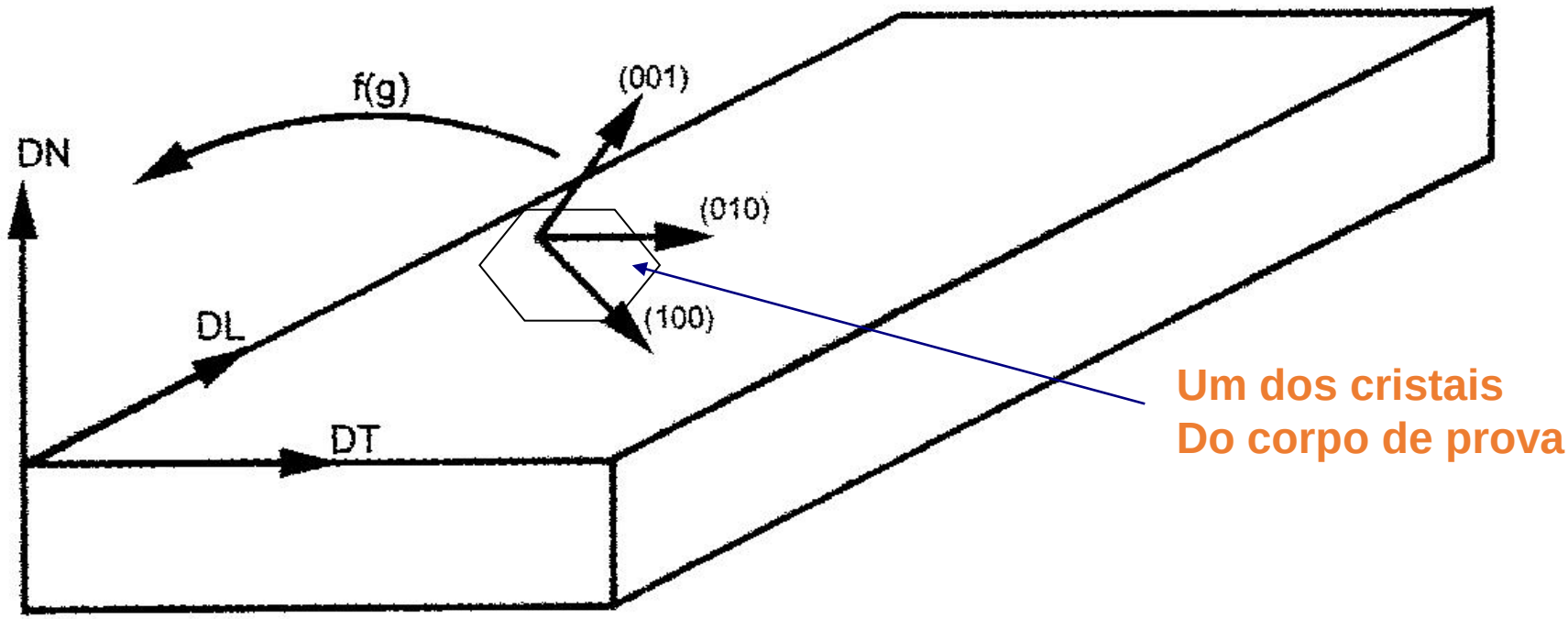


(SUN et al., 2018)

Dois artigos sobre SLM de materiais diferentes têm resultados idênticos de textura, mostrando que estratégia de varredura scan X dá textura de “cubo rodado” e varredura XY dá “cubo na face’. As figuras de polo (001) da estrategia XY para os dois artigos são iguais. Entretanto, as figuras de polo (001) da estratégia X-scan não são.

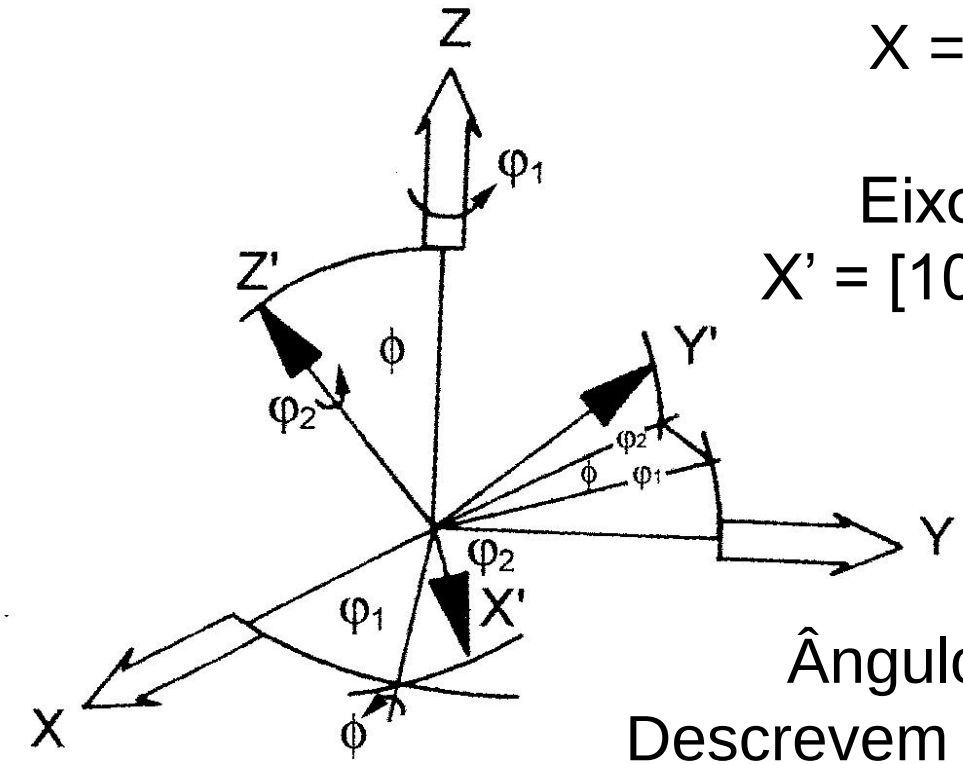
Explique.

Como representar a orientação segundo Euler



O problema é estabelecer uma relação entre
a orientação dos eixos cristalográficos de cada cristal
e o sistema de referência do corpo de prova, no caso, uma chapa.
Euler propôs que <u>três ângulos de rotação</u> descrevem qualquer orientação.

Três ângulos de rotação na notação de Bunge

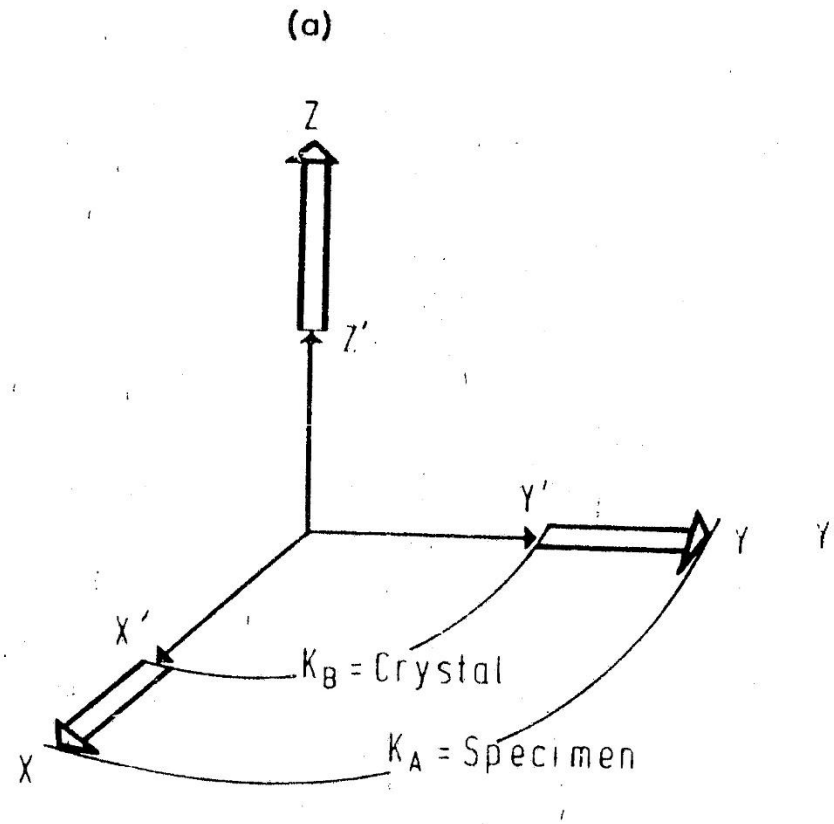


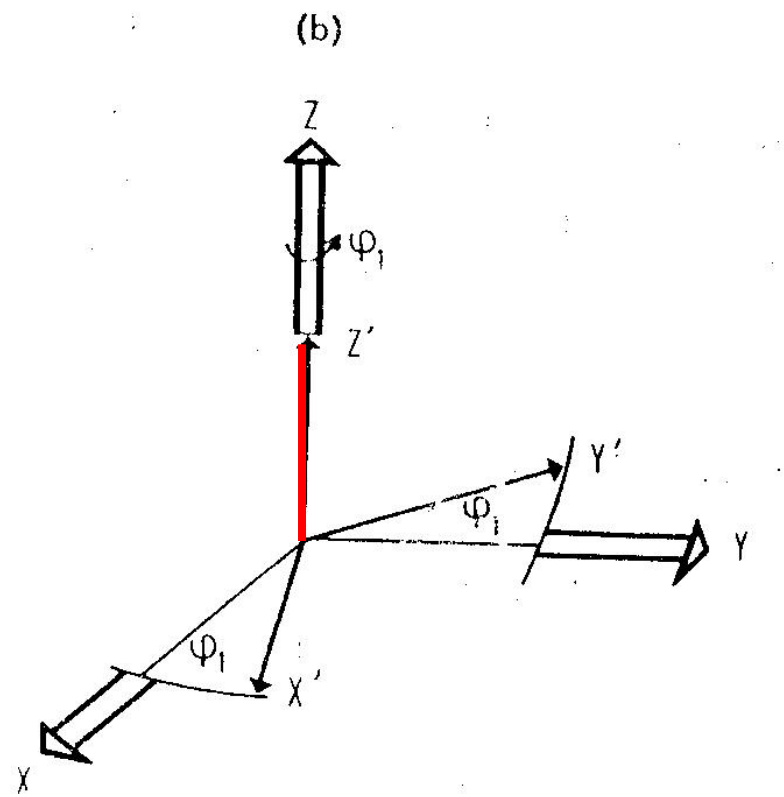
Eixos X, Y e Z do corpo de prova
X = DT, Y = DL e Z = DN

Eixos X', Y' e Z' do cristal
X' = [100], Y' = [010] e Z' = [001]

Ângulos de rotação φ_1 , Φ e φ_2
Descrevem orientação de qualquer cristal

Rotação φ_1

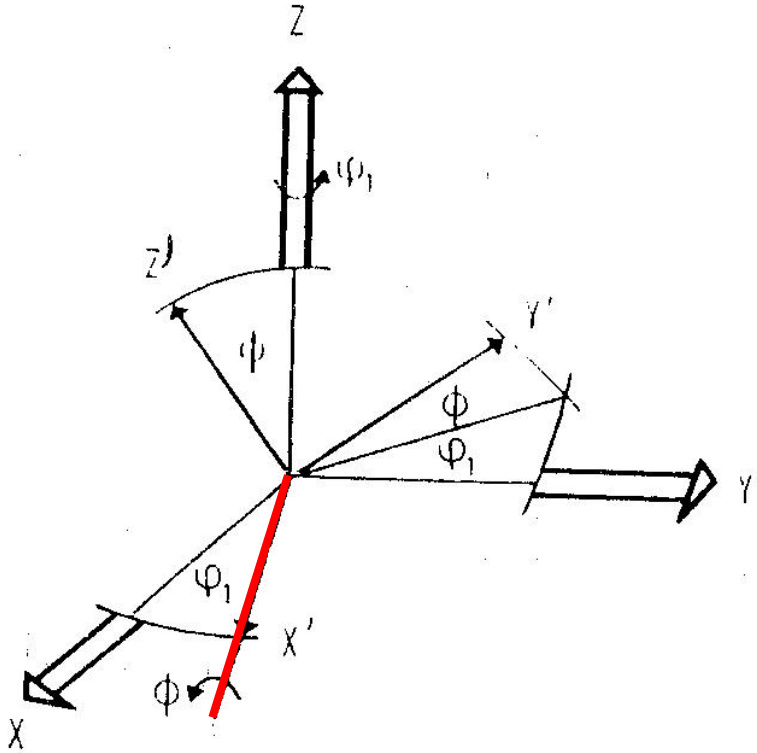


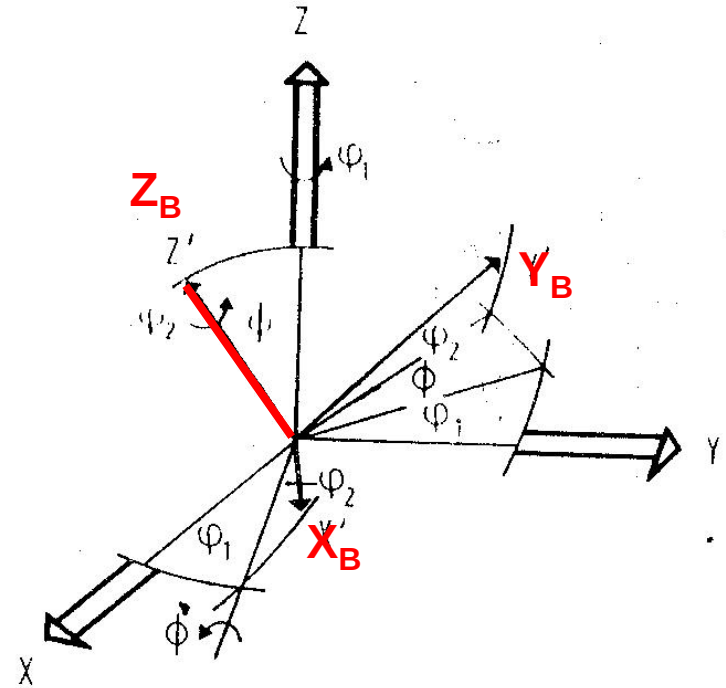


Parte-se de X', Y', Z' do cristal
Coincidente com X Y Z da amostra

<u>Rotação 1</u>. Aplica-se φ_1,
uma rotação em torno de Z.
Chega-se a X'Y'Z' provisórios

Rotacões Φ e φ_2



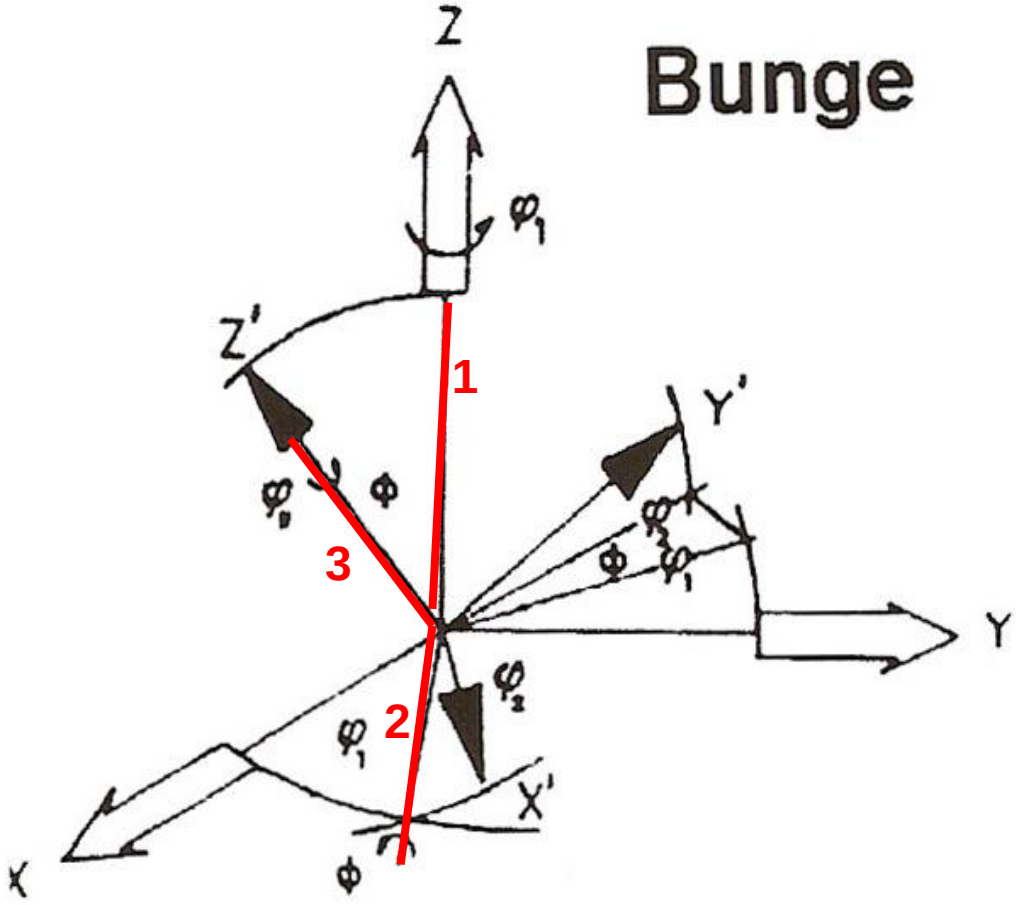


(d)

Rotação 2: Aplica-se rotação Φ em torno de X' provisório gerando Y' e Z' provisórios

Rotação 3: Aplica-se rotação φ_2 em torno de Z' provisório Chegando a X_B, Y_B e Z_B do cristal

Resumindo



A ordem das rotações
É relevante:
φ_1 em torno de Z
Φ em torno de X'
E φ_2 em torno de Z'

Representação matricial

$$g(h\ k\ l)(u\ v\ w) = \begin{bmatrix} \frac{u}{n} & \frac{kw - lv}{mn} & \frac{h}{m} \\ \frac{v}{n} & \frac{lu - hw}{mn} & \frac{k}{m} \\ \frac{w}{n} & \frac{hv - ku}{mn} & \frac{l}{m} \end{bmatrix}$$

$$m = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad \text{e} \quad n = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}\ .$$

Representação matricial do problema

$$g = (hkl)[uvw]$$

$$g = \begin{bmatrix} u' & r' & h' \\ v' & s' & k' \\ w' & t' & l' \end{bmatrix}$$

Onde u' v'e w' são os cossenos diretores da DL
r' s' t'os cossenos diretores da DT
h' k' e l'os cossenos diretores da DN

Representação matricial

$$g(\varphi_1\phi\varphi_2) = g_{\varphi 2}^{Z'} . g_{\phi}^{X'} . g_{\varphi 1}^{Z'}$$

$$g_{\phi}^{X'} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & sen\phi \\ 0 & -sen\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

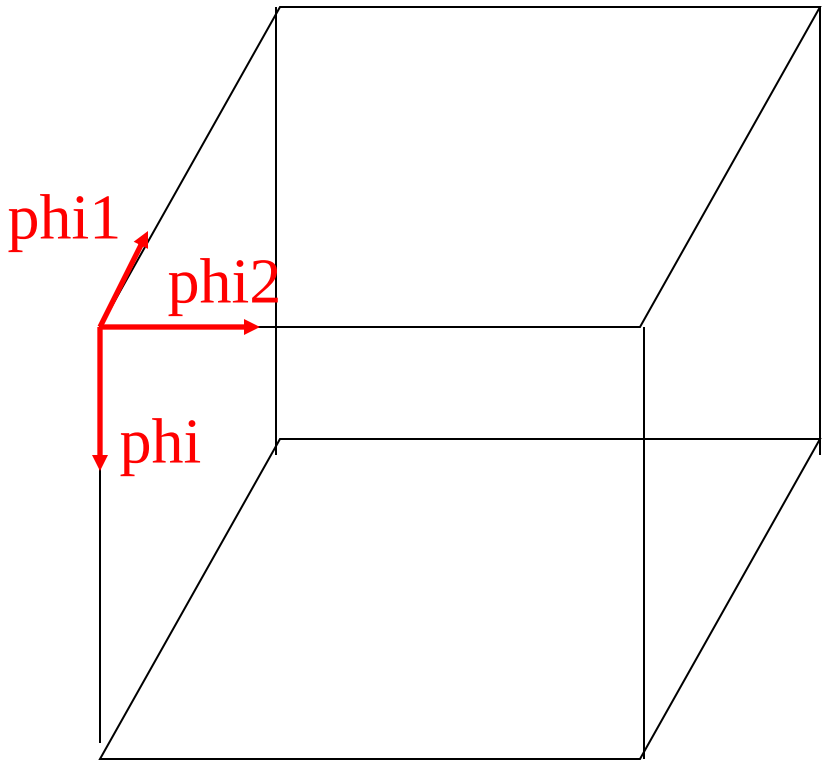
$$g_{\varphi_1}^{Z'} = \begin{bmatrix} \cos\varphi 1 & sen\varphi 1 & 0 \\ -sen\varphi 1 & \cos\varphi 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

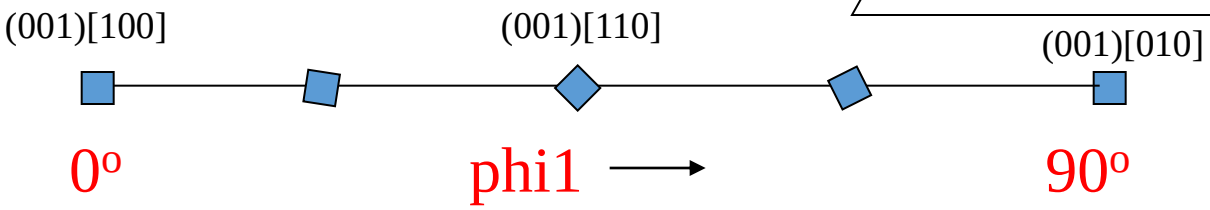
$$g_{\varphi 2}^{Z'} = \begin{bmatrix} \cos\varphi 2 & sen\varphi 2 & 0 \\ -sen\varphi 2 & \cos\varphi 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$g(\varphi_1\phi\varphi_2) = \begin{bmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \text{sen}\,\varphi_1 \,\text{sen}\,\varphi_2 \cos\phi & \text{sen}\,\varphi_1 \cos\varphi_2 + \cos\varphi_1 \,\text{sen}\,\varphi_2 \cos\phi & \text{sen}\,\varphi_2 \,\text{sen}\,\phi \\ -\cos\varphi_1 \,\text{sen}\,\varphi_2 - \text{sen}\,\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\phi & -\text{sen}\,\varphi_1 \,\text{sen}\,\varphi_2 - \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\phi & \cos\varphi_2 \,\text{sen}\,\phi \\ \text{sen}\,\varphi_1 \,\text{sen}\,\phi & \cos\varphi_1 \,\text{sen}\,\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

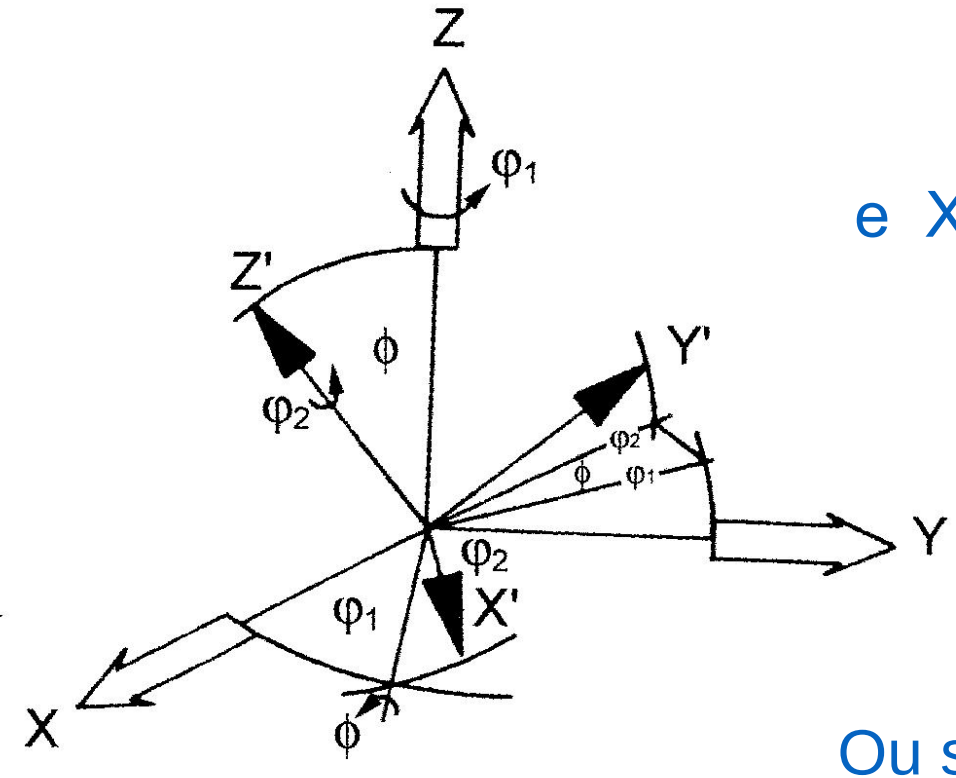
O espaço de Euler

- Todas as orientações possíveis estão descritas neste cubo.
- A origem é a orientação (100)[001] .
- A linha φ_1 de 0 a 90º, para Φ=0 e φ_2=0 cobre as orientações:





Caso simples, ϕ_1=0 , Φ=0 e ϕ_2=0



Sabendo que

X = DT, Y = DL e Z = DN

e X' = [100], Y'= [010] e Z' = [001]

Quando φ_1=0 , Φ=0 e φ_2=0

X coincide com X', Y com Y'

e Z com Z'

Ou seja,

DL é [010] e DN é [001]

Ou seja, (001) é o plano // superfície

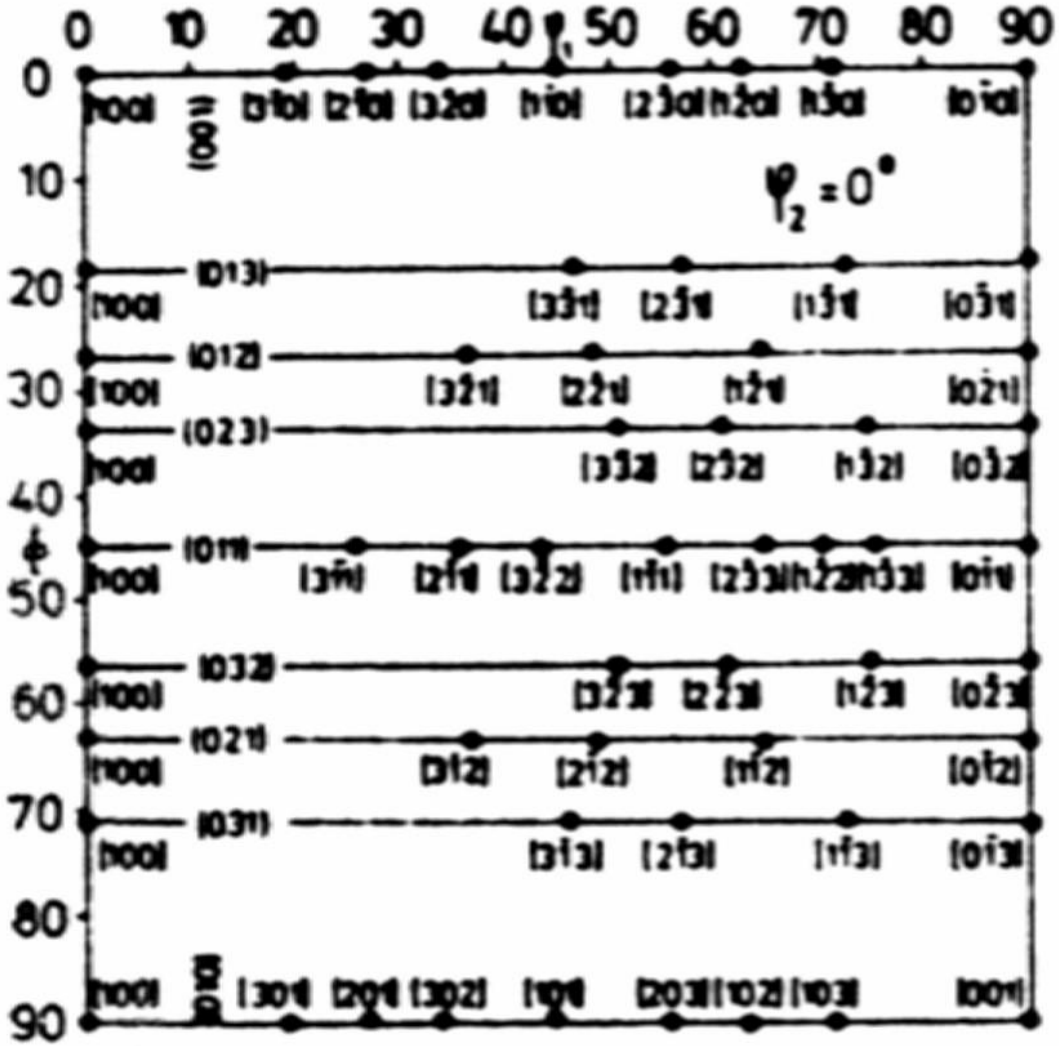
Orientação desse cristal é

(001)[010]

O corte phi$_2$ = 0

- **as linhas horizontais representam planos paralelos a superfície, onde a variação de phi1 é a rotação desse plano em torno da sua normal.** (lembrar que phi1 é uma rotação em torno de z).

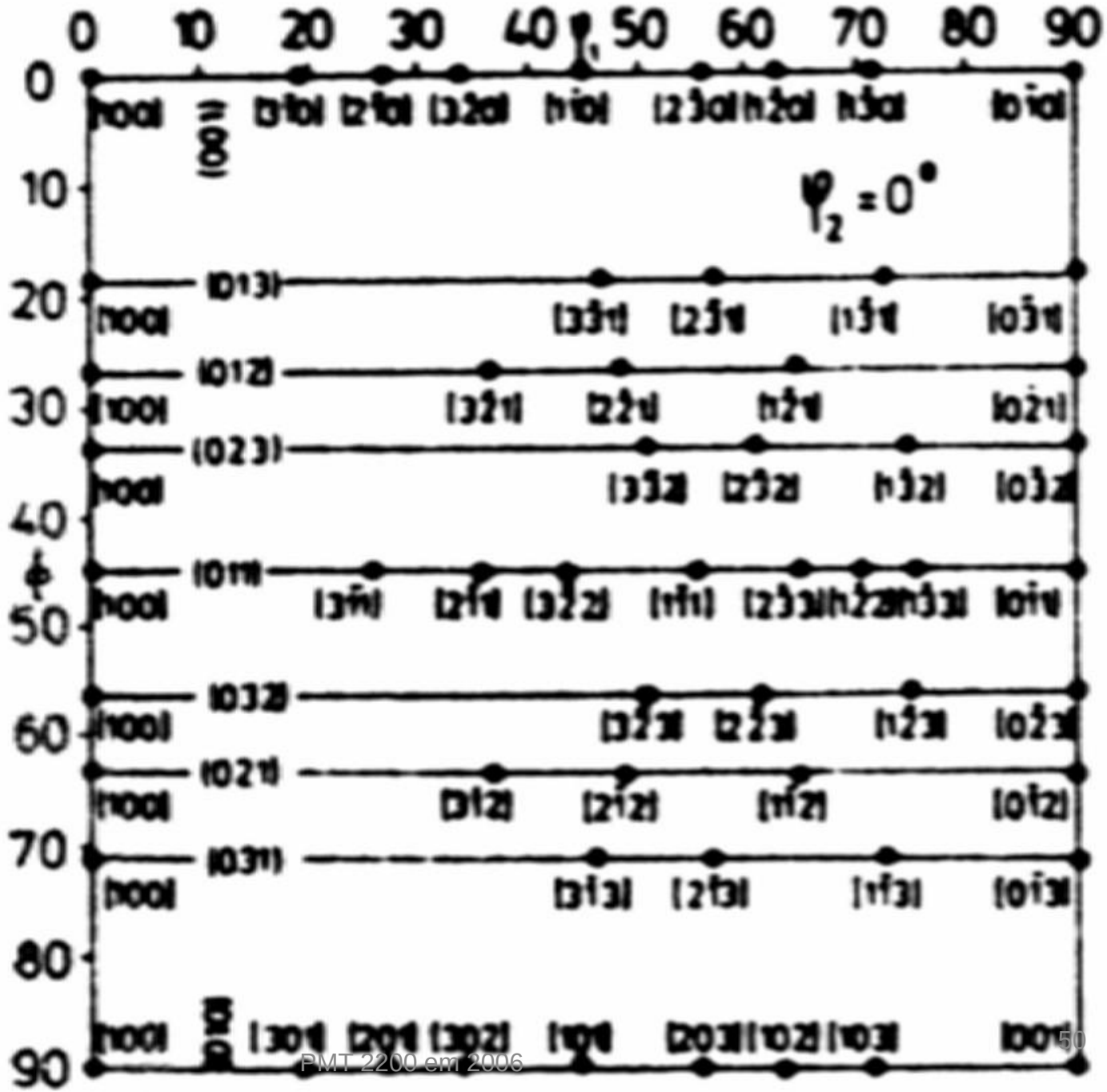
- **Só a linha vertical para phi1=0 mantém fixa a direção paralela a direção de laminação, no caso [100].** (lembrar que phi é a rotação em torno de x')



O corte

Corte

$\varphi_2 = 0$



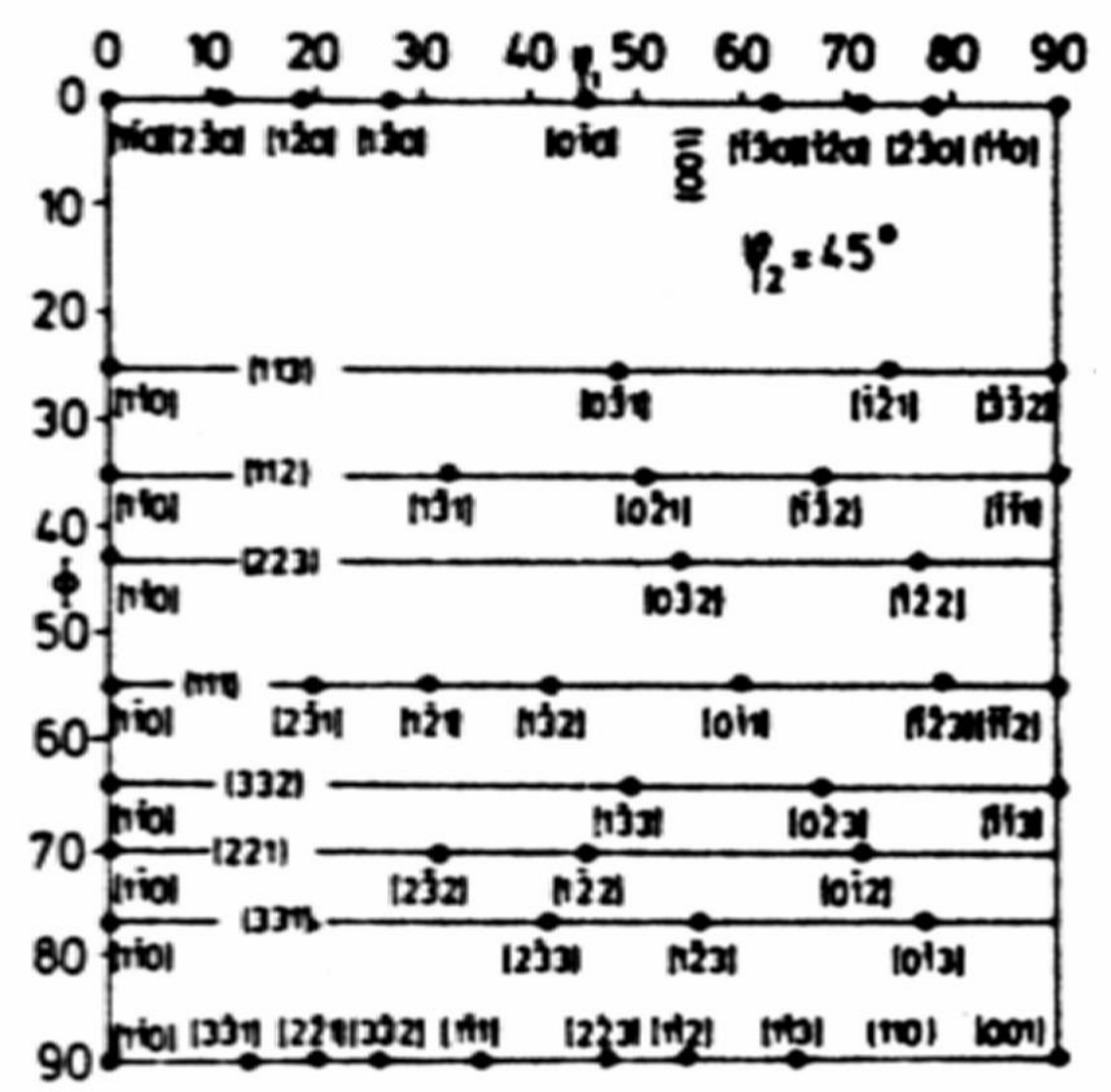
O corte phi$_2$ = 45º

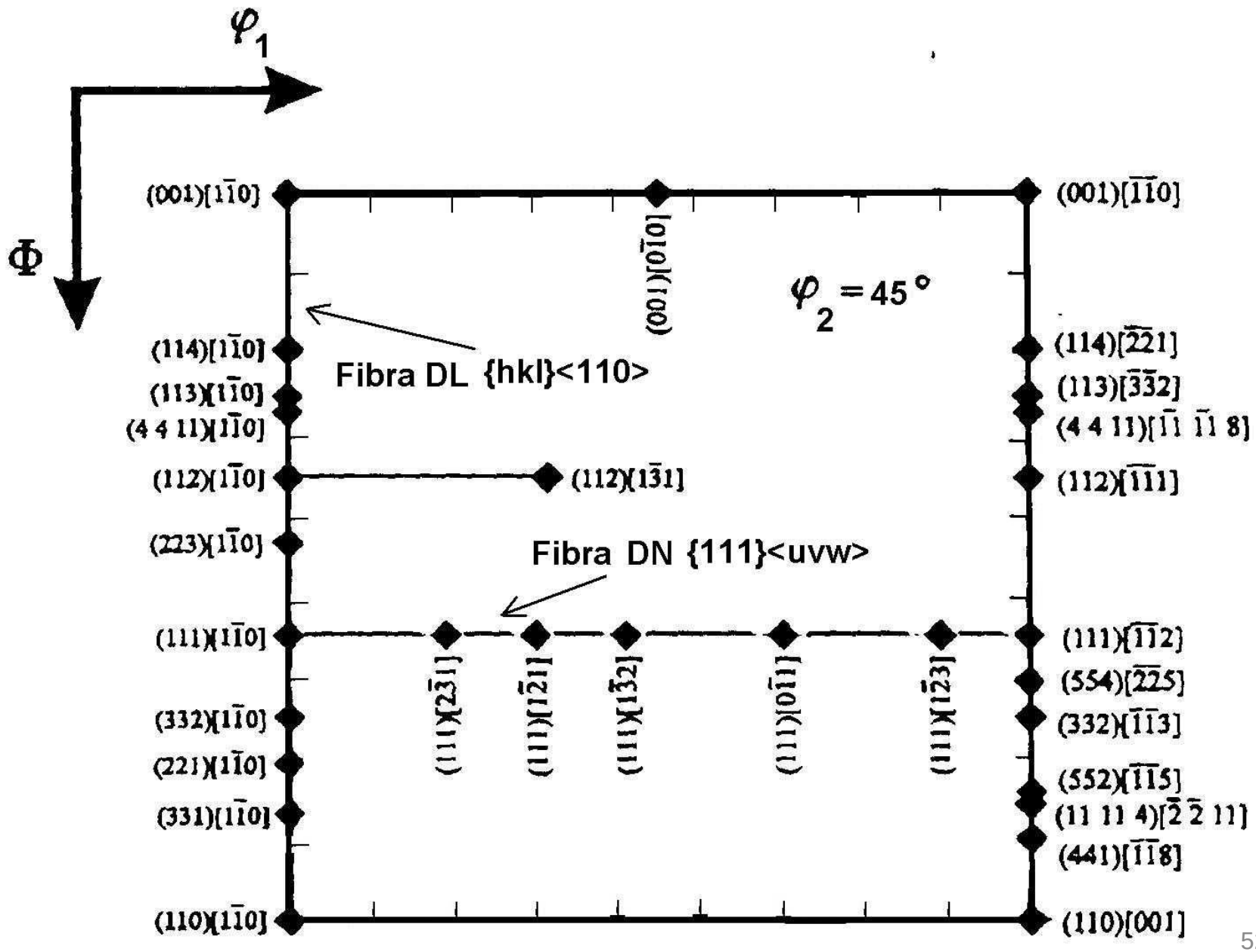
O plano phi$_2$ = 45º é muito usado nos aços por incluir vários componentes intensos da textura:

a linha phi=0 tb mostra o plano (100)//superf.

A linha phi$_1$=0 mostra [110]//DL.

A linha phi$_2$=55º mostra (111)//superf.




φ1
Φ
φ2 = 45°
(001)[1$\bar{1}$0]
(001)[$\bar{1}\bar{1}$0]
(001)[0$\bar{1}$0]
(114)[1$\bar{1}$0]
(113)[1$\bar{1}$0]
(4 4 11)[1$\bar{1}$0]
(112)[1$\bar{1}$0]
(223)[1$\bar{1}$0]
(111)[1$\bar{1}$0]
(332)[1$\bar{1}$0]
(221)[1$\bar{1}$0]
(331)[1$\bar{1}$0]
(110)[1$\bar{1}$0]
(112)[1$\bar{3}$1]
Fibra DL {hkl}<110>
Fibra DN {111}<uvw>
(111)[2$\bar{3}$1]
(111)[1$\bar{2}$1]
(111)[1$\bar{3}$2]
(111)[0$\bar{1}$1]
(111)[1$\bar{2}$3]
(114)[$\bar{2}\bar{2}$1]
(113)[$\bar{3}\bar{3}$2]
(4 4 11)[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 8]
(112)[$\bar{1}\bar{1}$1]
(111)[$\bar{1}\bar{1}$2]
(554)[$\bar{2}\bar{2}$5]
(332)[$\bar{1}\bar{1}$3]
(552)[$\bar{1}\bar{1}$5]
(11 11 4)[$\bar{2}$ $\bar{2}$ 11]
(441)[$\bar{1}\bar{1}$8]
(110)[001]

Métodos de quantificação da distribuição de orientações

- Figura de pólo inversa
- Figura do pólo direta
- Função de distribuição de orientações cristalinas (FDOC, ou ODF: orientation distribution function).

ODF

- ODF dá a freqüência de ocorrência de cada orientação {hkl}<uvw> de uma amostra.
- Numa amostra sem textura, ou seja, com cristais orientados ao acaso, todas as orientações são igualmente prováveis. A intensidade relativa de cada orientação é 1.
- Numa amostra com textura, cada orientação terá intensidade X vezes a aleatória: X sendo

ODF

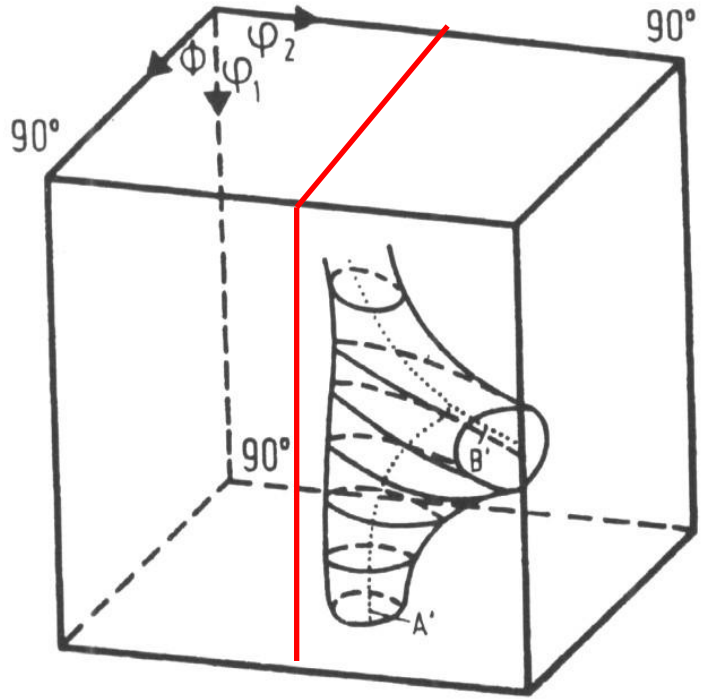
A função f(g) é normalmente representada por uma série de harmônicos esféricos $T_L^{\mu\nu}$ cujos coeficientes $C_L^{\mu\nu}$ descrevem a textura do material.

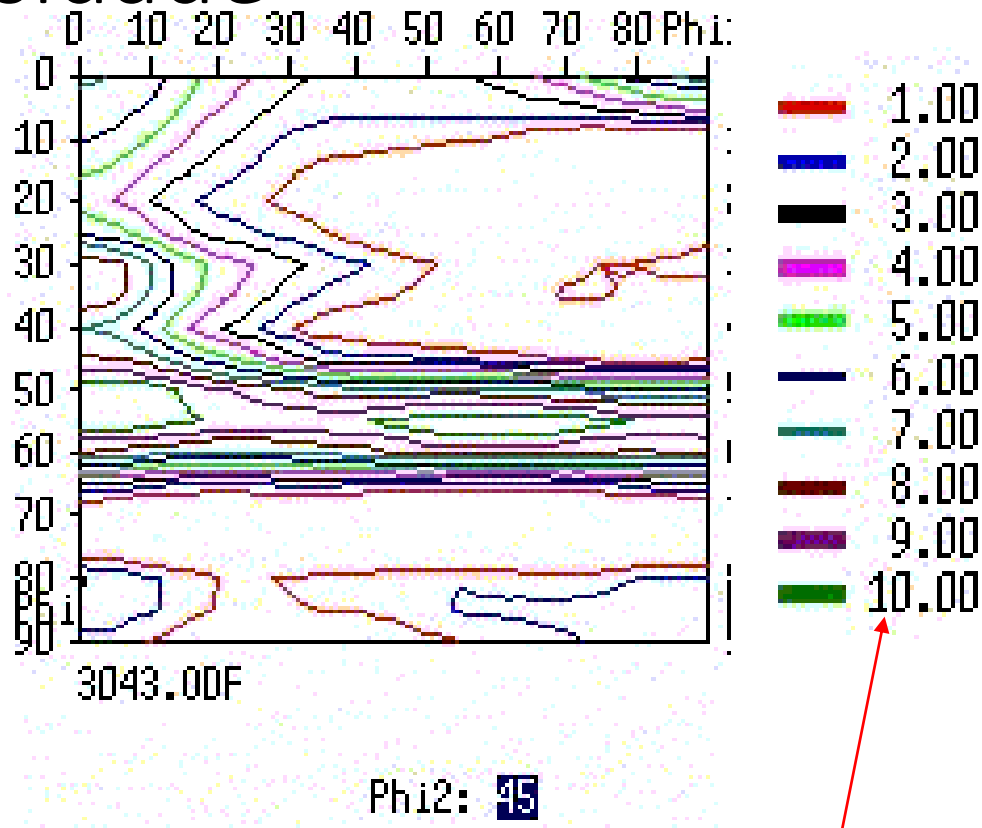
$$f(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = \sum_{l=0}^{\alpha} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} C_l^{\mu\nu} \ddot{T}_l^{\mu\nu}(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$$

O resultado é que, para cada orientação g( ) teremos uma certa intensidade relativa dada em “número de vezes a intensidade do aleatório”.

Isso é representado, no espaço de Euler, ligando os pontos de mesma intensidade, Que cria uma superfície de isointensidade.

Superfície de isointensidade
linhas de isointensidade

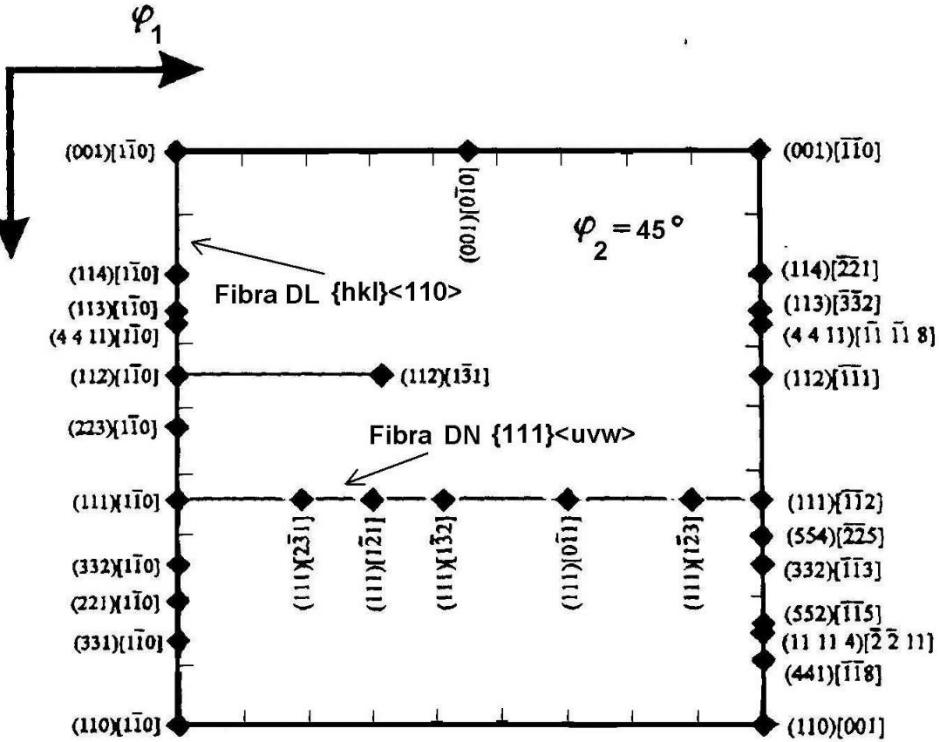




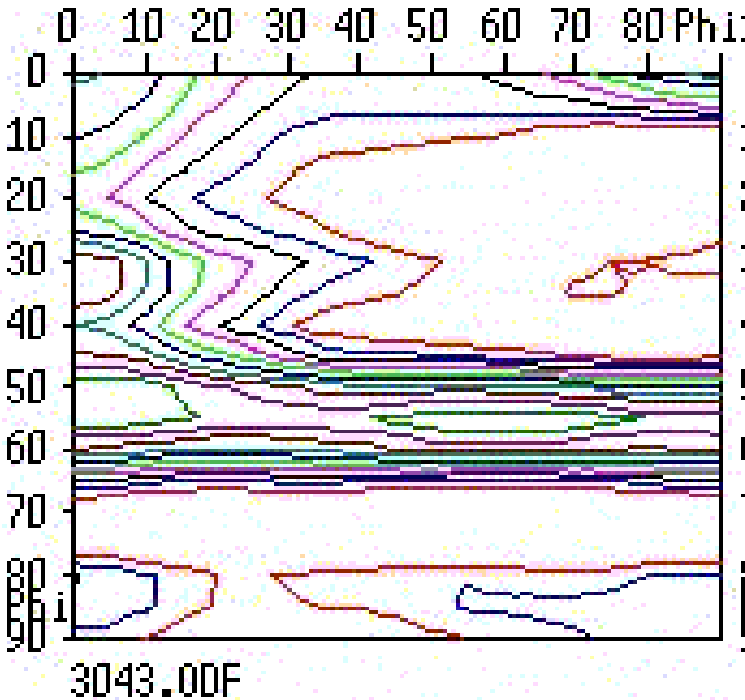
No Espaço de Euler só é possível representar graficamente uma superfície de isointensidade

Num corte do espaço de Euler Posso representar várias isolinhas

Isolinhas

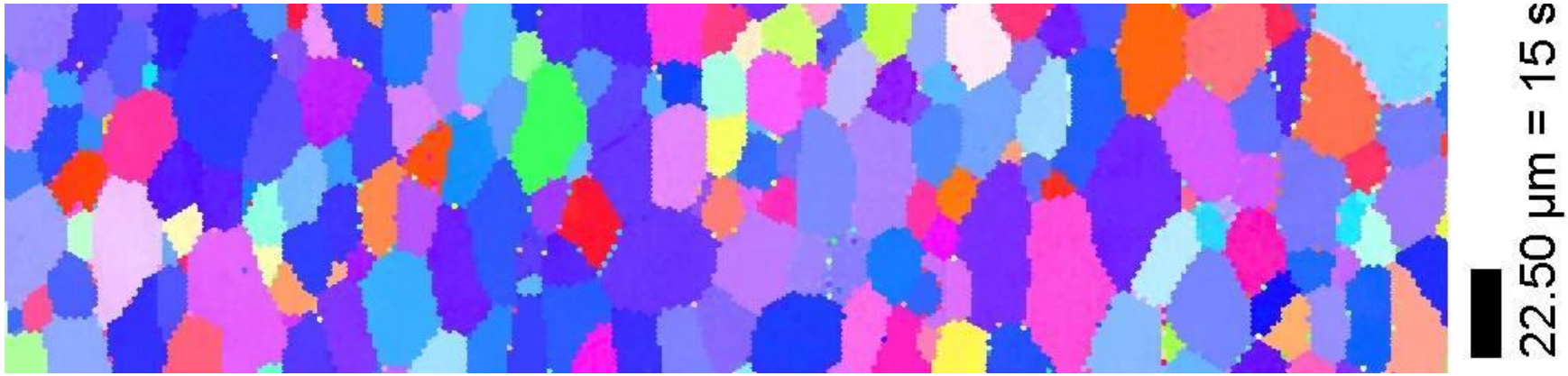


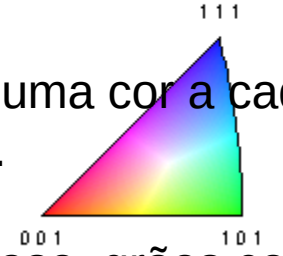
Mapa das posições de algumas
Orientações importantes no
Corte do espaço de Euler



ODF mostra que essa amostra tem
Forte componente de textura (I_R>10)
Com orientação (111)[110]

Orientação de cada grão, por EBSD





Atribuo uma cor a cada orientação de plano, ou direção.

Neste caso, grãos com (111)// superf são azuis
Grãos com (001)// superf são vermelhos, por exemplo.

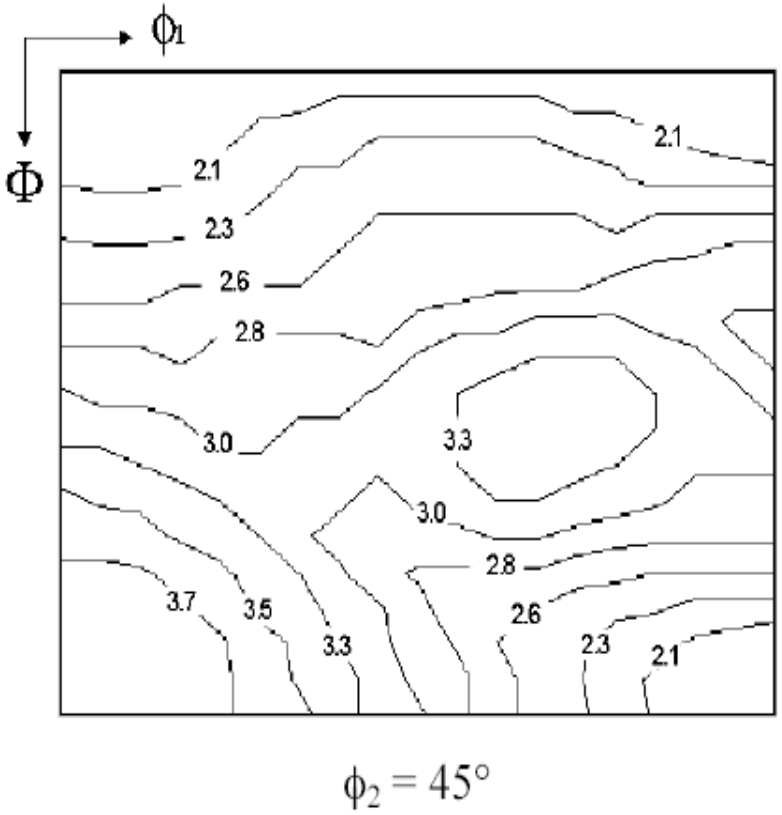
Não é possível representar na mesma imagem a orientação do plano e direção, apesar da informação ser disponível.

Outros usos do espaço de Euler

- É possível representar a variação do fator de Taylor para as diferentes orientações , usando os cortes do espaço de Euler.
- Fator de Taylor (aula 2)

$$M = \Sigma\boldsymbol{\gamma}/\varepsilon$$

- Prevê máximo encruamento (M_{max}) para orientações próximas a {111}<110>



Literatura

- Capítulo “Textura Cristalográfica” da apostila “Deformação, Recristalização e Textura” do Prof. Carlos SC Viana, edição da ABM, 2001.
- Capítulo 12 “Textura Cristalográfica” do livro “...” do Prof. Angelo F. Padilha,

Sites interessantes

- http://www.texture.de/index_e.htm