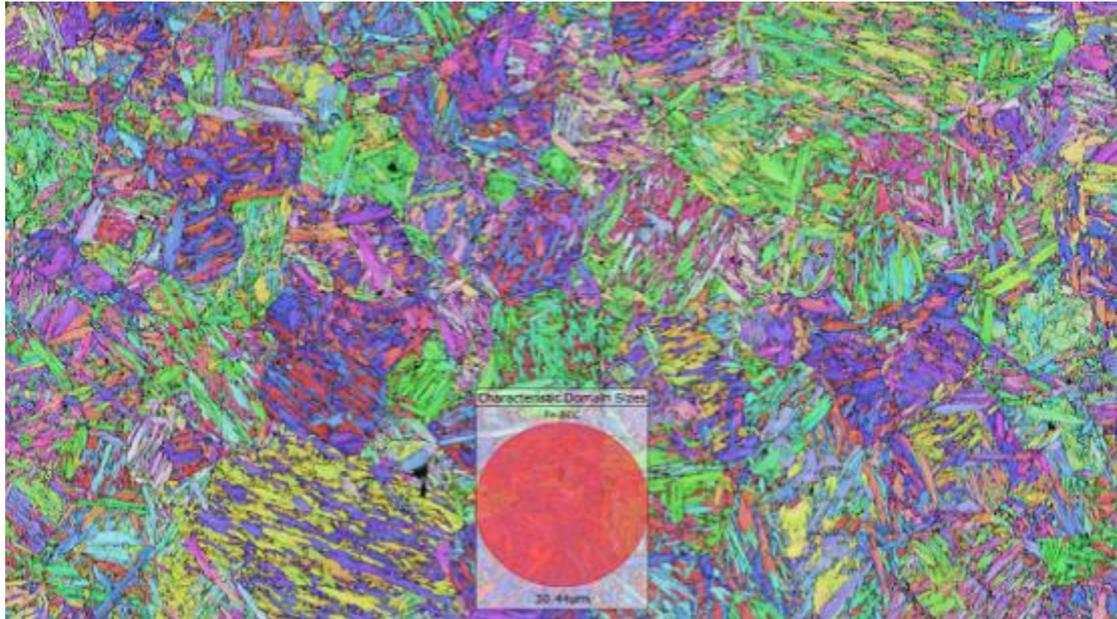


## 距离取向差函数（DDF）——EBSD 分析中趣事一件

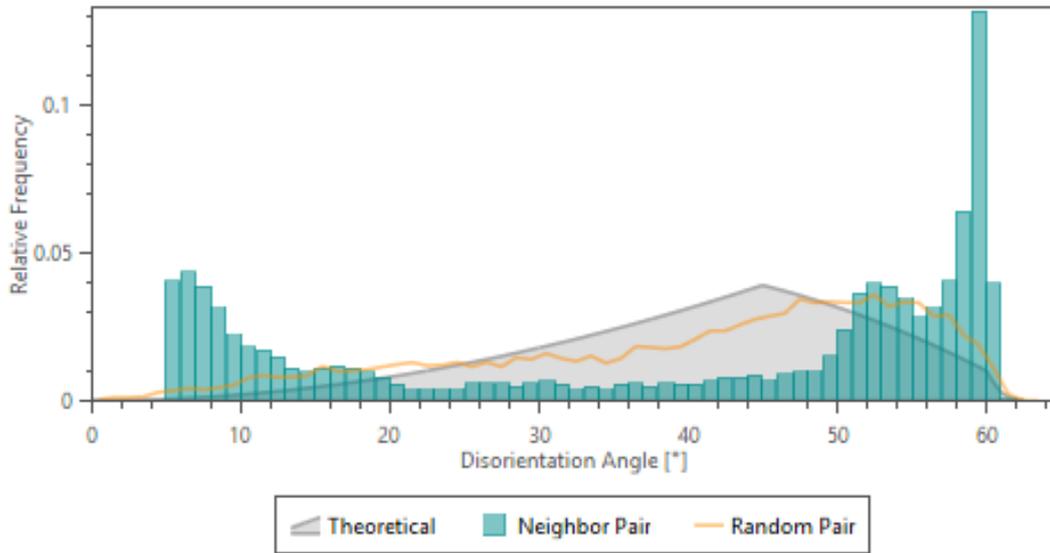
初识距离取向差函数（Distance Disorientation Function, DDF），是最近 AZtecCrystal 发布第二个版本时新增加的一项功能。通过 DDF 分析，AZtecCrystal 可以很容易获得原奥氏体晶粒大小（图一），而无需输入取向关系和变体信息。这就很有意思了，因为一般要重构原奥氏体晶粒是个很复杂的过程，而如果仅仅想知道原奥氏体晶粒大小，用这个功能就很简单。



图一 AZtecCrystal 测量原奥氏体晶粒大小

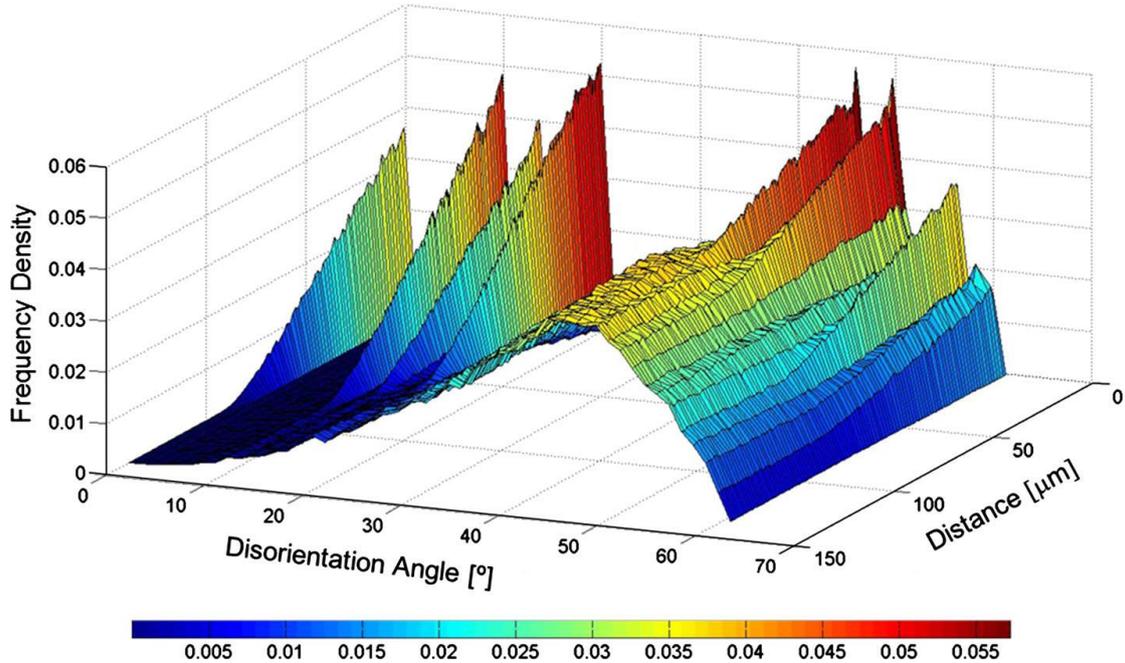
那么 DDF 到底是什么呢？

顾名思义，距离取向差函数，与取向差分布有关。取向差分布在 EBSD 的分析中早已成熟应用多种功能。在 AZtecCrystal 中可分为三种：第一种是理论曲线，即取向随机分布时，任意两个取向之间的取向差值的分布；第二种是晶界取向差角分布，即面分布图中，相邻像素对之间的取向差值的分布；还有第三种是面分布图中，不相关、随机选取的像素对之间的取向差值的分布，对比理论曲线，它能在一定程度上反映出面分布图中的取向择优。其实，第二种和第三种取向差分布已经暗含了距离的概念，第二种是相邻像素对距离为 1 个像素，而第三种是随机像素对，距离不定。



图二 AZtecCrystal 里的三种取向差分布：理论曲线、相邻像素对和随机像素对

如果把像素对之间的距离作为自变量，统计得到的取向差分布这条曲线作为因变量，那么就构造出了距离取向差函数了。如图三所示 DDF 函数示例，是从包含 30 个晶粒，每个晶粒大小为 91 $\mu\text{m}$  的模拟 EBSD 数据生成的[Morales-Rivas et al., 2015]。当距离为最小时，取向差分布曲线就是晶界取向差分布，由于取向关系和变体的原因，特定的角度位置存在几个尖峰；而当距离从小到大变化时，取向差分布曲线上的尖峰逐渐降低；最后，当距离足够大，取向差分布曲线就变成了随机像素对的取向差分布，整体变得平滑，逐渐趋近于理论曲线。

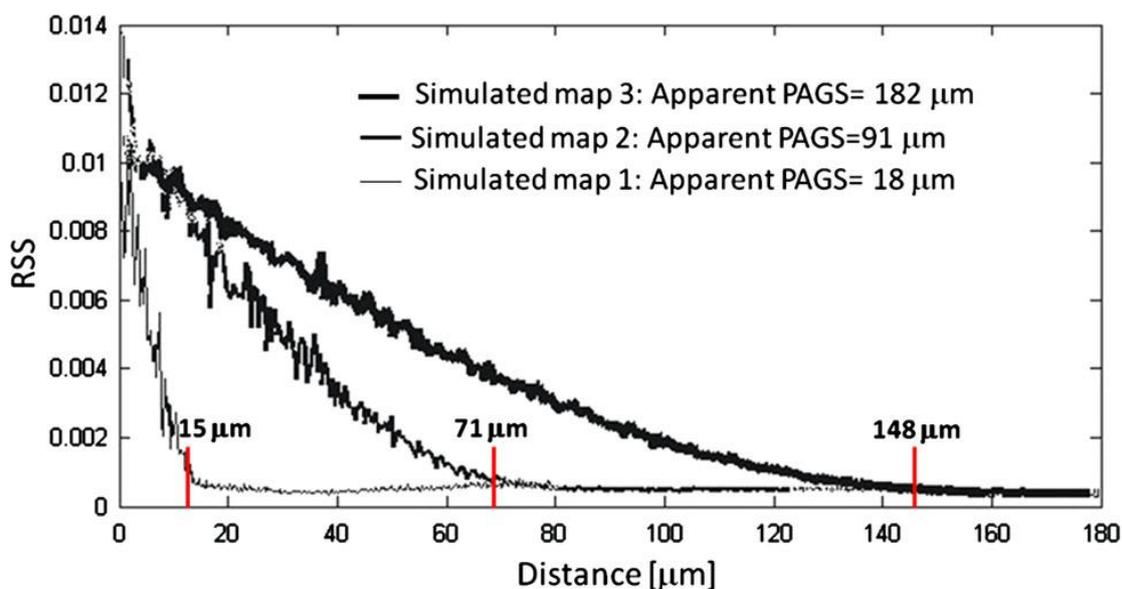


图三 DDF 示例，它由一系列不同距离的取向差分布曲线构成[Morales-Rivas et al., 2015]

为什么会随着距离呈现这样的变化趋势呢？可以简单的分析一下，当距离很小的时候，像素对落在同一个晶粒的概率较高，如果碰巧跨越晶界，就代表了晶界的取向差；而随着距离的增大，像素对落在同一个晶粒的概率逐渐降低，不仅跨越晶界的概

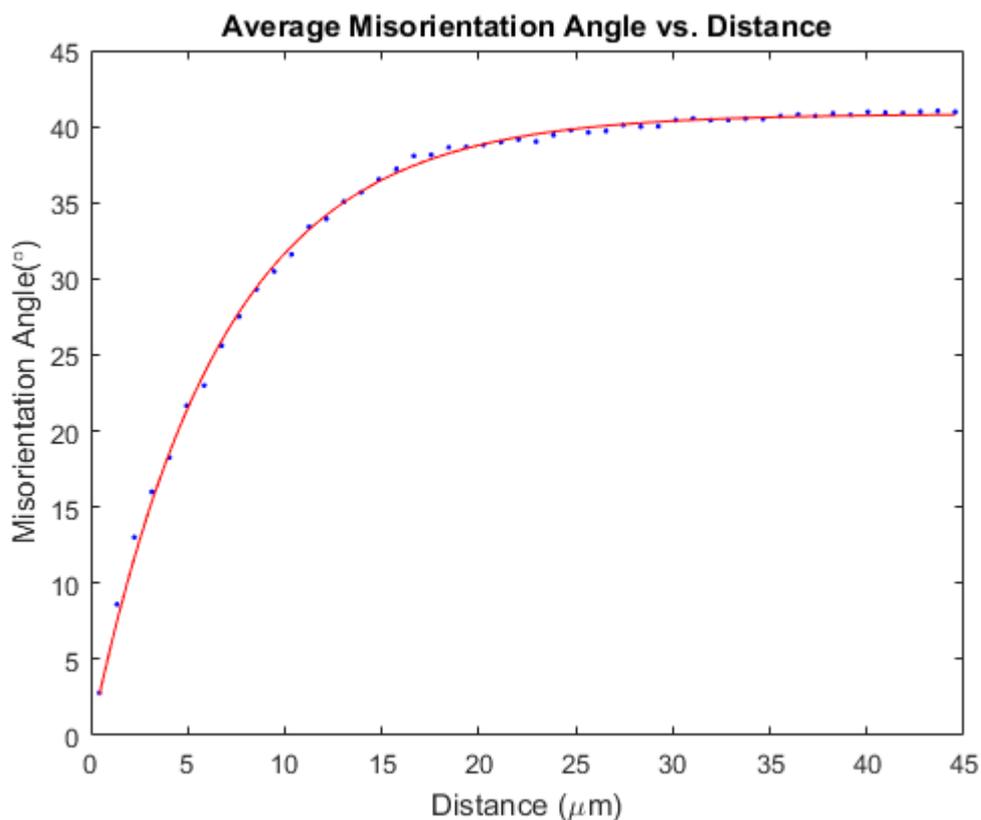
率逐渐增大，甚至还可能跨越晶粒，那么这时的取向差就变得随机起来；随着距离继续变大，像素对跨越晶粒的概率越来越高，整体的取向差就变得越来越随机。所以，DDF 的变化趋势是和晶粒的大小相关的。只需要找到取向差分布从不随机到随机变化的临界点所对应的距离，就可以推算出晶粒大小。

一种方法如图四[Morales-Rivas et al., 2015]所示，利用残差平方和值（Residual Sum of Squares, RSS）来表征随距离变化的取向差分布与随机取向差分布之间的匹配程度：RSS 值越大，意味着匹配越差；反之，匹配越好。对于人为构建模拟的三种晶粒大小的 EBSD 面分布图分析后发现，当 RSS 值到达趋近于水平不变（或接近 0）的转折点时，对应的特征长度就能反映出晶粒的大小，在这个实例中约是晶粒大小的 80%。



图四 利用 RSS 值随距离改变的曲线，推算晶粒大小[Morales-Rivas et al., 2015]

另一种方法是计算出取向差分布的平均值[Brahme, 2012]。距离越近，越可能在同一个晶粒，取向差得越小，取向差的平均值就越小；随着距离增大，取向差的平均值将逐渐达到随机取向的平均值，对于无织构的立方晶系材料来讲，这个值大约是 40.7 度。通过拟合取向差平均值随距离的变化曲线，就可以得到关于特征长度的系数，然后换算出相应晶粒大小，如图五换算出的晶粒大小约为 20μm。



图五 平均取向差值随距离的变化，拟合换算出晶粒大小约为 20um

一般来讲，一旦跨越了晶粒，取向差就会从不随机到随机。但是，在原奥氏体晶粒问题上，仅仅跨越马氏体晶粒还不够，因为同一原奥氏体晶粒转变的马氏体晶粒受到取向关系变体的制约，它们之间的取向差并不是完全随机分布的。所以，一直要等到跨越原奥氏体晶粒后，马氏体晶粒之间的取向关系才会真正变得完全随机起来。因此，通过 DDF 的分析，可以很容易测量出原奥氏体晶粒的大小。而且这一个过程中，无需知道确切的取向关系和变体信息，比较容易实现，这也是此方法的一个最大优势。

另外，因为 DDF 计算出的特征长度并不完全等同于晶粒大小，所以我们一般称之为特征畴界大小 (Characteristic Domain Size)。它代表了取向从不随机到完全随机分布的空间距离，对应的特征可以是晶粒、孪晶粒、原奥氏体晶粒等等。

DDF 这个方法非常讨巧地将 EBSD 中常见的取向差分布与距离结合起来共同分析，得到特征畴界大小的结果，以一种非常简单的思路解决了复杂的原奥氏体晶粒大小的问题。希望广大研究者在使用 EBSD 做分析的时候，也不要拘泥于 EBSD 现有的功能，大胆勇敢地突发奇想，没准可以获得一些奇特的结果，做出原创性的漂亮工作。