

## Application of the Bingham quaternion distribution to texture analysis of a hematite specimen

### Anwendung der Bingham Quaternionen-Verteilung zur Texturanalyse einer Hämatitprobe

HELMUT SCHAE BEN, Freiberg, KARLA BALZUWEIT, Belo Horizonte (Brazil), ORLANDO LEÓN-GARCÍA Belo Horizonte (Brazil), CARLOS A. ROSIÈRE, Belo Horizonte (Brazil), HEINRICH SIEMES, Aachen

**Key words:** EBSD data analysis, orientation map, grain modeling, fabric analysis, orientation probability density, Bingham quaternion distribution, canonical coefficients, fitting of pseudo Bingham quaternion distribution, hematite texture model.

#### Abstract

Electron backscatter diffraction (EBSD) provides crystallographic orientation data referring to a location at the surface of the specimen and results in an orientation map (Fig. 1). An orientation probability density function in terms of volume portions of crystallites supporting orientations within a given range is estimated by non-parametric kernel density estimation and displayed in  $\sigma$ -sections (Fig. 2). The raw data are corrected with respect to confidence index (CI), forward scatter detector signal (SEM), and grain size of a preliminary grain construction (Fig. 3). Then, grains are reconstructed (Fig. 4), revealing one grain conspicuous both in terms of its orientation and its size. Excluding this particular grain, i. e. excluding all data referring to pixels assigned to this grain, another ODF is estimated by non-parametric kernel density estimation (Fig. 5). Once the orientation probability density function has been estimated, its characteristic features like pole density functions of any crystallographic form, Fourier coefficients, texture index, entropy, modal orientations, volume proportions etc. can easily be calculated. However, beyond classical texture analysis EBSD data pave the way towards a comprehensive fabric analysis as envisioned by SANDER including reconstruction of crystallites and their boundaries, misorientation analysis, classification of grain boundaries, grain size distribution, grain shape analysis and other features. The ultimate goal of fitting a model probability density function, here a pseudo Bingham quaternion distribution (Fig. 6), is the characterization of the sample in terms of the few parameters of the Bingham distribution (Table 1). In turn, these parameters may promote the geological interpretation and inferences, and facilitate the systematic comparison of several samples. The typical steps of such an analysis are presented with respect to hematite from a high-grade schistose ore sample from the Pau Branco deposit, Quadrilátero Ferrífero (Iron Quadrangle), Brazil. As it turns out, fitting a pseudo Bingham distribution results in a major spherical and a minor fiber term (Tab. 1). Thus new light is shed on a controversy concerning two competing characterizations of the observed pattern of crystallographic preferred orientation of hematite. In fact, while it simplifies one earlier model, it confutes the other one.

#### Zusammenfassung

Beugung durch Elektronen Rückstreuung (EBSD) liefert kristallographische Orientierungsdaten mit Bezug zu einem Ort an der Oberfläche der Probe und schließlich eine Orientierungskarte (Abb. 1). Eine Wahrscheinlichkeitsdichte der Orientierungen bezüglich Volumenanteilen von Kristalliten mit Orientierungen in einem gegebenen Bereich wird durch nicht-parametrische Kern-Dichteschätzung bestimmt und in  $\sigma$ -Schnitten dargestellt. (Abb. 2). Die ursprünglichen Einzelorientierungen werden bezüglich Konfidenz-Index, Detektor-Signal der Vorwärtsstreuung und der Korngröße einer vorläufigen

Konstruktion von Körnern korrigiert (Abb. 3). Dann werden Körner rekonstruiert (Abb. 4), wobei ein Korn sowohl durch seine Orientierung als auch durch seine Größe auffällt. Von der erneuten Kerndichteschätzung einer ODF wird dieses Korn ausgeschlossen, d. h. alle Eigenschaften der diesem Korn zugeordneten Pixel werden nicht berücksichtigt (Abb. 5). Ausgehend von der so geschätzten Orientierungsdichte können charakteristische Größen wie Polfiguren beliebiger Kristallformen, Fourier Koeffizienten, Textur Index, Entropie der Verteilung, modale Orientierungen, Volumenanteile leicht berechnet werden. Über die klassische Texturanalyse hinaus eröffnen EBSD Orientierungsdaten die Möglichkeiten einer vollständigen Gefügeanalyse im SANDERSchen Sinne einschließlich der Rekonstruktion von Kristalliten und ihren Korngrenzen, Missorientierungsanalyse, Klassifikation von Korngrenzen, Korngrößenverteilung, Kornformanalyse und anderer Eigenschaften des Gefüges. Das oberste Ziel der Anpassung einer Modellverteilung, hier einer pseudo Bingham Quaternionen Verteilung (Abb. 6), besteht in der Charakterisierung der Stichprobe mit Hilfe einiger weniger Verteilungsparameter (Tab. 1). Die Parameter selber können eine geologische Interpretation unterstützen und Schlussfolgerungen nahe legen, insbesondere können sie den systematischen Vergleich verschiedener Stichproben erleichtern. Die typischen Arbeitsschritte einer solchen Analyse werden am Beispiel einer Hämatitprobe von einem schiefrigen, hochhaltigen Eisenerz der Pau Branco Mine, Quadrilátero Ferrífero („Eisernes Viereck“), Brasilien, vorgestellt. Dabei ergibt die Anpassung eine pseudo Bingham Verteilung mit einem größeren Kugel- und einem kleineren Faser-Term (Tab. 1). Dieses Modell lässt zwei frühere konkurrierende Modelle in neuem Licht erscheinen; tatsächlich wird das eine Modell vereinfacht, während das andere widerlegt wird.