

# 極点図から S c h m i d 因子計算

2025年02月19日

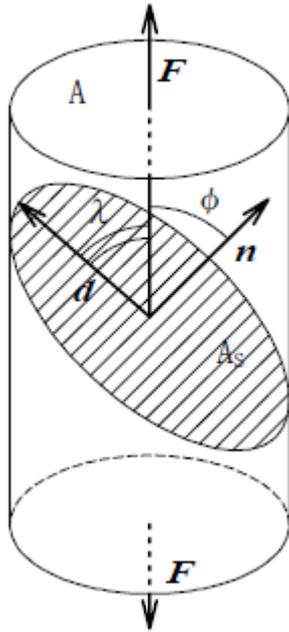
*HelperTex Office*

不明な点は問い合わせください。

1. 概要
2. FCC-Cubic単結晶の場合
  2. 1 手入力でSchmid因子計算
  2. 2 極点図からSchmid因子計算
    2. 2. 1 極点図から  $(hkl)$   $[uvw]$  を決定
    2. 2. 2  $(hkl)$   $[uvw]$  からSchmid因子計算
    2. 2. 3 引っ張りSchmid因子の計算
    2. 2. 4 圧縮方向
    2. 2. 5 RD方向の引っ張りSchmid因子計算
    2. 2. 6 ND方向からRD方向への引っ張りSchmid因子
3. BCC-Cubic単結晶の場合
4. HCP単結晶の場合
5. LaboTex VolumeFraction (VF%) の結果から
6. 他のODFソフトウェアのVF%結果の入力から

## 1. 概要

Schmid因子は



A面のND方向への引っ張り  $\mathbf{F}$  に対し、滑り面  $A_s$  の  $\mathbf{d}$  方向、 $\mathbf{n}$  方向の余弦  $F_s = \cos \phi * \cos \lambda$  をSchmid因子として計算される。

単に、A面のND方向のみであれば、A面のND方向で計算されるが、A面を傾けた方向も計算するのであれば、 $(hkl) [uvw]$  の算出が必要になります。

(例えば、A面に対しND方向からRD方向の連続Schmid因子計算の場合)

単結晶の場合、極点図から  $(hkl) [uvw]$  を求める

CrystalOrientationDソフトウェア

多結晶の場合、LaboTexやSmartLab-TextureよりVF%を求める

Schmid因子計算は

BCCSchmidFactorcalc

HCPSchmidfactorcalc

で計算を行う。

データ入力は、

手入力、あるいはファイル入力



BCCSchmidFactorCalcでは手入力 (Data Input)

A面 (30, 8, 95) に対し引っ張り方向ではすべり面 (1-11) [011] に対し0.493を得る

The screenshot shows the BCCSchmidFactorCalc3.17 software interface. The 'InputFile(TXT)' field is set to 'Data input'. The 'Slip Systems' section has 'FCC{111}<1-10>' selected. The 'Data input' section has '30 8 95' entered in the 'real [h k l] or [h k l]' field, with the 'Input' button highlighted in yellow. The results table shows the following data:

[h k l]<u v w>	phi1	PHI	phi2
{30.0 8.0 95.0}			
Input	max	SlipSystem	
{30.0 8.0 95.0}	0.493	(-1-11)[011]	
SlipSystem			
slip0	(111)[0-11]	0.473	
slip1	(111)[-101]	0.353	
slip2	(111)[-110]	-0.12	
slip3	(-1-11)[011]	0.24	
slip4	(-1-11)[101]	0.291	
slip5	(-1-11)[-110]	-0.051	
slip6	(-111)[0-11]	0.26	
slip7	(-111)[101]	0.373	
slip8	(-111)[110]	0.113	
slip9	(1-11)[011]	0.493	
slip10	(1-11)[-101]	0.311	
slip11	(1-11)[110]	0.182	

The 'Schmidcalc' button in the bottom right is also highlighted in yellow. The 'AlongRD(X)' field is set to 3, 'AlongTD(Y)<=0' to 2, and 'AlongND(Z)' to 1. The 'SchmidFactorProfile' section is set to 'ND->RD' with a 'Step' of 15. The 'Clear', 'SlipDisp', 'Schmidcalc', 'Symmetry SchmidCalc', and 'SchmidFDisp' buttons are visible at the bottom right.

## 2. 2 極点図から S c h m i d 因子計算

### 2. 2. 1 極点図から (h k l) [u v w] を決定

反射極点図 (1 1 1) から (5 3 1) [-4 3 1 1] が計算される

CrystalOrientationD 2.15 by CTR PDuser CTR CTR

File Help Blind-10 CreatePFStep:1.0 hkl disp=true α0->90 X-Axis:South

PoleFigure

Select file  
  Center of gravity  RD input mode is South. Maxindex  ExtentAngle

C:\CTR\work\NewCubicCODisp\tmp\111 2.1X1  
 Data input area  
 Alpha(center=0)  Xaxis(South: Beta=0)(RD: Beta=180) hkl

Calculation  
 ND rotate  degree   notContour  FWHM  degree

{hkl}<uvw>  
 maxIndex  extentAngle

Calculate Index  
 CalcPoleFigure     
   
 Other(h,k,l)

0.0	122.82
0.0	-2.06
0.0	-46.84
0.0	76.6
0.0	41.67
0.0	-139.5

calcuw  
 chiangle  
 88.52 179.98  
 91.44 -178.08  
 89.09 178.09  
 88.02 -178.36  
 91.44 179.98  
 90.81 -178.5  
 88.97 178.49  
 91.44 178.6

{hkl}<uvw>(extentAngle=2.0)  
 (5 3 1)[-4 3 1 1] (112.53 80.27 59.04)  
 (5 3 1)[-5 4 1 3] (114.47 80.27 59.04)  
 (5 3 1)[-6 5 1 5] (115.85 80.27 59.04)  
 (7 4 1)[-1 1 3] (114.29 82.93 60.26)  
 (13 7 2)[-1 1 3] (114.11 82.29 61.7)  
 (15 9 2)[-1 1 3] (114.44 83.48 59.04)

RD TD Max=768.78 Min=0.0  
 768.0  
 767.0  
 766.0  
 765.0  
 764.0  
 763.0  
 762.0  
 761.0

RD TD Max=100.0 Min=0.0  
 99.0  
 98.0  
 97.0  
 96.0  
 95.0  
 94.0  
 93.0

Initialize File

{ 5 3 1 } < - 4 3 1 1 > を使って S c h m i d 因子計算を行う

## 2. 2. 2 (h k l) [u v w] からSchmid因子計算

LaboTex形式で仮のデータを入力し方位の変更を行う

BCCSchmidFactorCalc3 3.17 by CTR PDuser CTR CTR

File Help Text SlipProfile ND(NDRotate) abs(SF) Orthorhombic

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode) [icon] {1 1 0}<-1 -1 2> 100.0

Disp [ ] DISP

Slip Systems

[ ] {011}<11-1> [ ] {112}<11-1> [ ] {123}<11-1> [x] FCC{111}<-1-10> [ ] Stack [ ] Inverse

Data input

real {h k l} or {h k l} [ ] Input {h k l}[u v w] [ ] Input phi1 PHI phi2 phi1<=90,PHI<=90 [ ] Input

{1 1 0}<-1 -1 2> 100.0

AlongRD(X) [ ] [ 3 ] [ 0 ] AlongTD(Y)<=0 [ 2 ] [ 0 ] AlongND(Z) [ 1 ] [ 0 ] [ 4 ] [ 0 ]

Clear

[ ] SlipDisp

Schmidcalc

Symmetry SchmidCalc

SchmidFDisp

SchmidFactorProfile

[ ] ND->RD [ ] all [ ] Step 15 [ ]

[ ] AXISRotation [ ] HKLDouble

BCCSchmidFactorCalc3 3.17 by CTR PDuser CTR CTR

File Help Text SlipProfile ND(NDRotate) abs(SF) Orthorhombic

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode) [icon] {1 1 0}<-1 -1 2> 100.0

Disp [ ] DISP

Slip Systems

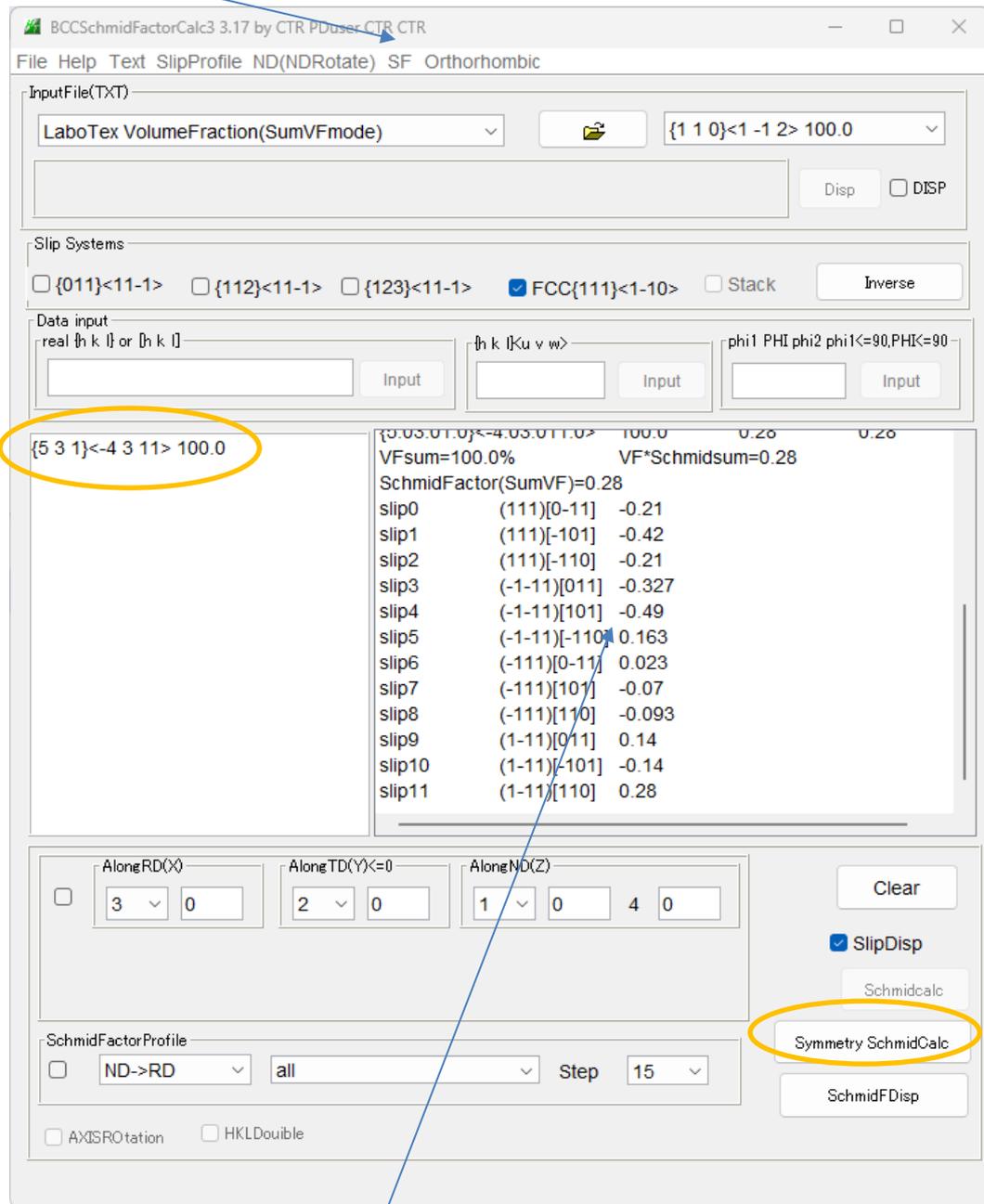
[ ] {011}<11-1> [ ] {112}<11-1> [ ] {123}<11-1> [x] FCC{111}<-1-10> [ ] Stack [ ] Inverse

Data input

real {h k l} or {h k l} [ ] Input {h k l}[u v w] [ ] Input phi1 PHI phi2 phi1<=90,PHI<=90 [ ] Input

{5 3 1}<-4 3 11> 100.0

### 2. 2. 3 引っ張り Schmid 因子の計算



### 2. 2. 4 圧縮では



```

Input      max      Slipsystem
[5.0 3.0 1.0] 0.49      (-1-11)[101]
SlipSystem
  
```

が計算される。

2. 2. 5 RD方向の引っ張りSchmid因子計算

BCCSchmidFactorCalc3 3.18 by CTR PDuser CTR

File Help Text SlipProfile ND(NDRotate) SF Free

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode) [Folder Icon] {1 1 2}<-1 -1 1> 100.0

Disp  DISP

Slip Systems

{011}<11-1>  {112}<11-1>  {123}<11-1>  FCC{111}<1-10>  Stack

Data input

real [h k l] or [h k l]   [h k l][u v w]   phi1 PHI phi2 phi1<=90,PHI<=90

{5 3 1}<-4 3 11> 100.0

VFsum=100.0% VF\*Schmidsum=0.47

SchmidFactor(SumVF)=0.47

slip0	(111)[0-11]	0.224
slip1	(111)[-101]	0.419
slip2	(111)[-110]	0.196
slip3	(-1-11)[011]	0.47
slip4	(-1-11)[101]	0.235
slip5	(-1-11)[-110]	0.235
slip6	(-111)[0-11]	0.403
slip7	(-111)[101]	0.352
slip8	(-111)[110]	-0.05
slip9	(1-11)[011]	0.157
slip10	(1-11)[-101]	0.168
slip11	(1-11)[110]	-0.011

AlongRD(X)  3 0

AlongTD(Y)<=0 2 -90

AlongND(Z) 1 0 4 0

INT/DOUBLE: {3.0001 3.0 3.0}<1.0 1.0 1.0>

{-1.3333 1.0 3.6667}<-5.0 -3.0 -1.0> {-4 3 11}<-5 -3 -1> \*\*\*\*\* newcalc \*\*\*\*\*

SchmidFactorProfile

Reset ND->RD all Step 15

AXISRotation  HKLDouble

Clear

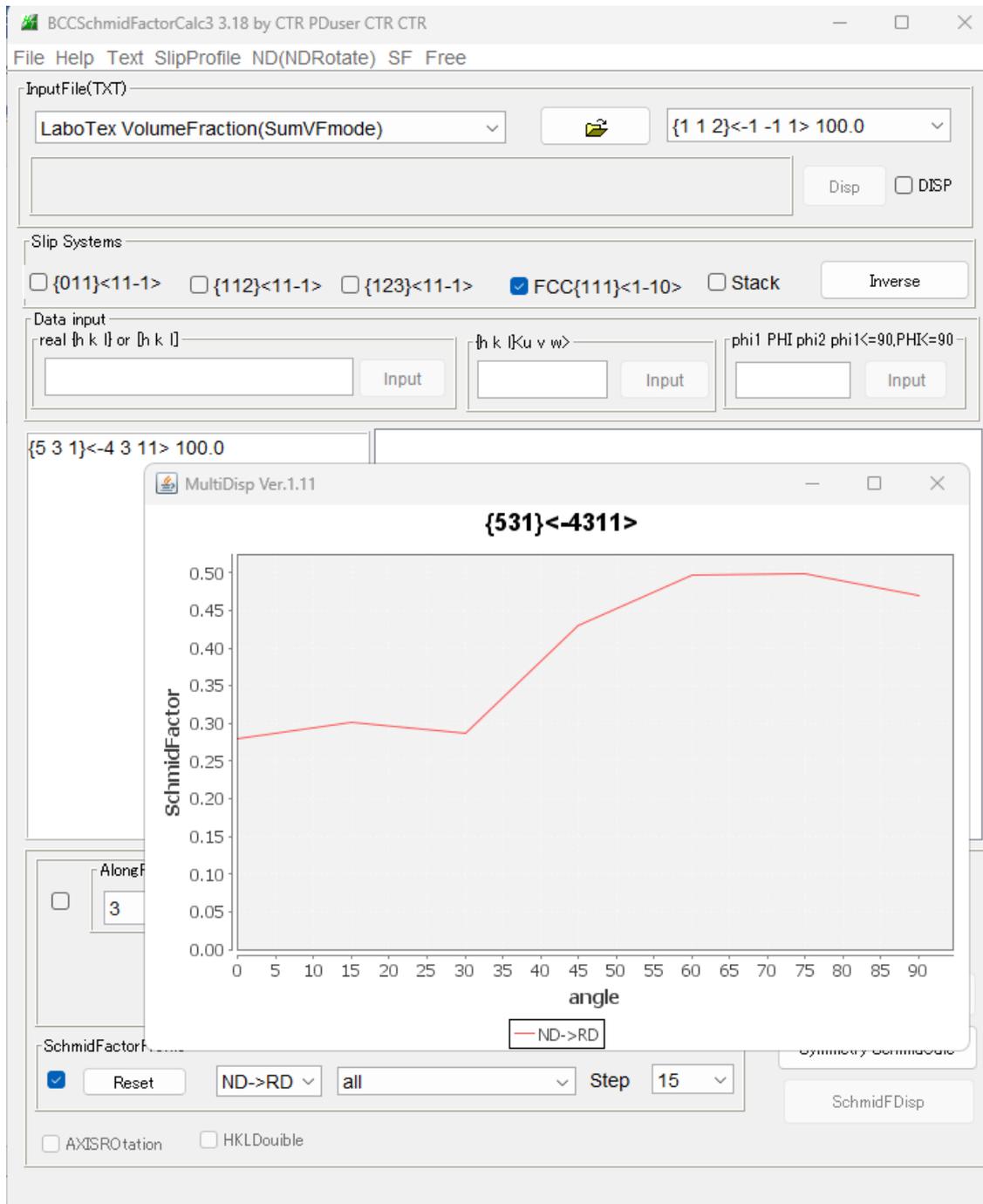
SlipDisp

Schmidcalc

**Symmetry SchmidCalc**

SchmidFDisp

2. 2. 6 ND方向からRD方向への引っ張りSchmid因子



18

STARTANGLE=0.0  
STOPANGLE=90.0  
STEPANGLE=15.0

OBJFILE={531}<-4311>

COMMENT

AXIS=ND->RD

DATA-NUMBER=7

	(111)[0-11]	(111)[-101]	(111)[-110]	(-1-11)[011]	(-1-11)[101]	(-1-11)[-110]	(-111)[0-11]	(-111)[101]	(-111)[110]	(-1-11)[011]	(-1-11)[-101]	(-1-11)[110]
0.0	-0.21	-0.4199	-0.21	-0.3266	-0.4899	0.1633	0.0233	-0.07	-0.0933	0.14	-0.14	0.2799
15.0	-0.1067	-0.228	-0.1214	-0.3446	-0.4085	0.0639	-0.0141	0.1025	0.1166	0.2239	-0.078	0.3018
30.0	0.0271	0.0249	-0.0022	-0.2512	-0.2518	7.0E-4	0.0094	0.2854	0.276	0.2876	0.0087	0.2789
45.0	0.1554	0.271	0.1157	-0.0712	-0.0618	-0.0094	0.0873	0.4296	0.3422	0.3139	0.0967	0.2172
60.0	0.2439	0.4445	0.2006	0.147	0.1106	0.0365	0.199	0.4965	0.2975	0.2959	0.1626	0.1333
75.0	0.2689	0.4988	0.23	0.345	0.2192	0.1259	0.3144	0.4682	0.1538	0.2383	0.1886	0.0497
90.0	0.2237	0.4194	0.1957	0.4698	0.2349	0.2349	0.4027	0.3523	-0.0503	0.1566	0.1678	-0.0112

### 3. BCC-Cubic単結晶の場合

FCCと操作は同一

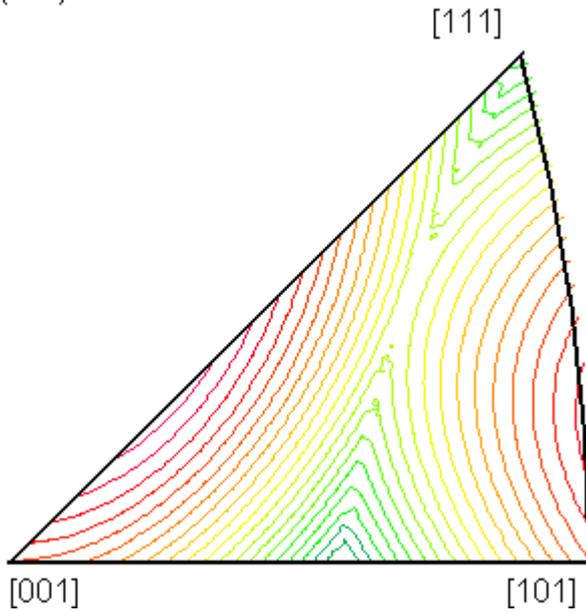
Slip Systemが異なる。

単一選択、複数選択が可能

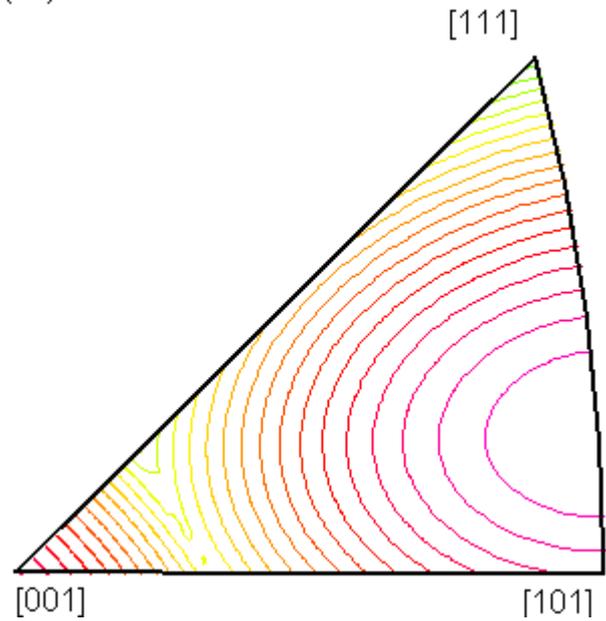
Slip Systems

{011}<11-1>    {112}<11-1>    {123}<11-1>    FCC{111}<1-10>    Stack  

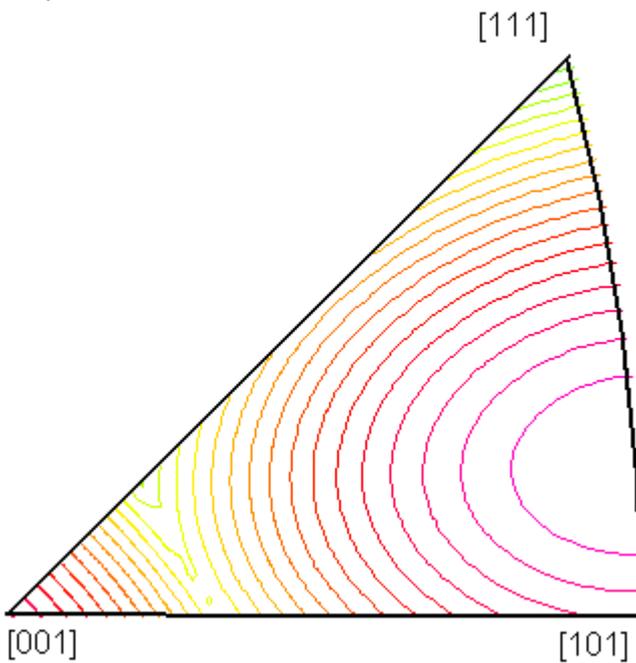
{011}<11-1>



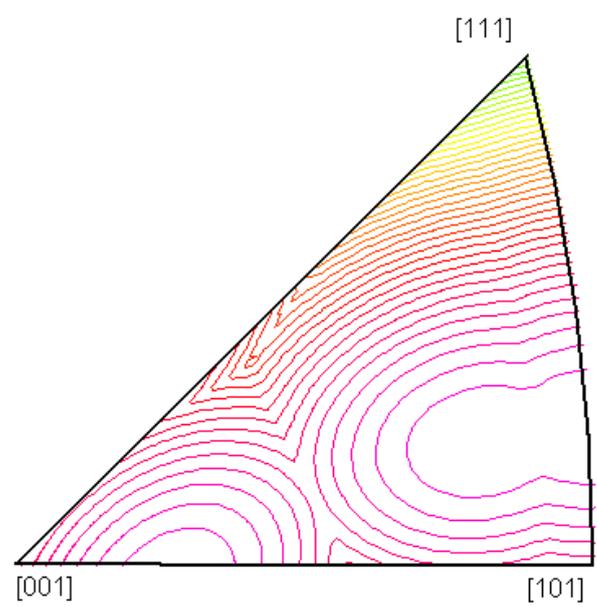
{112}<11-1>



{123}<11-1>



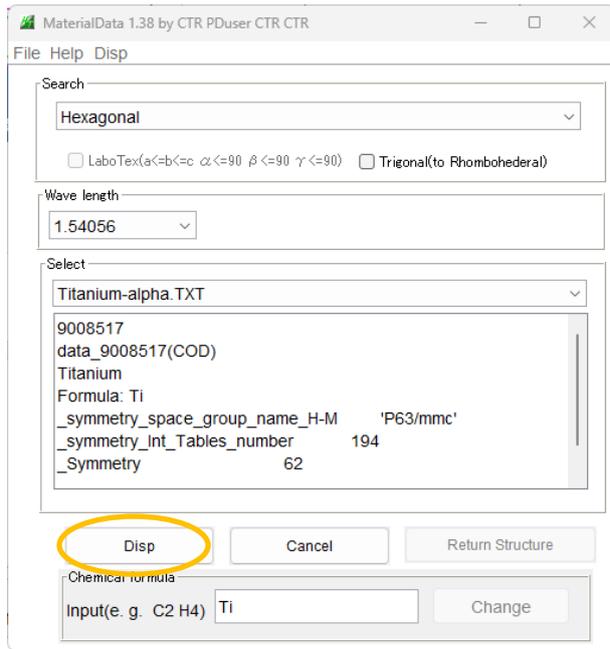
{011}<11-1>+{112}<11-1>+{123}<11-1>



#### 4. HCP単結晶の場合

Hexagonalの場合、システムの結晶系を解析する場合、予め材料の変更する。

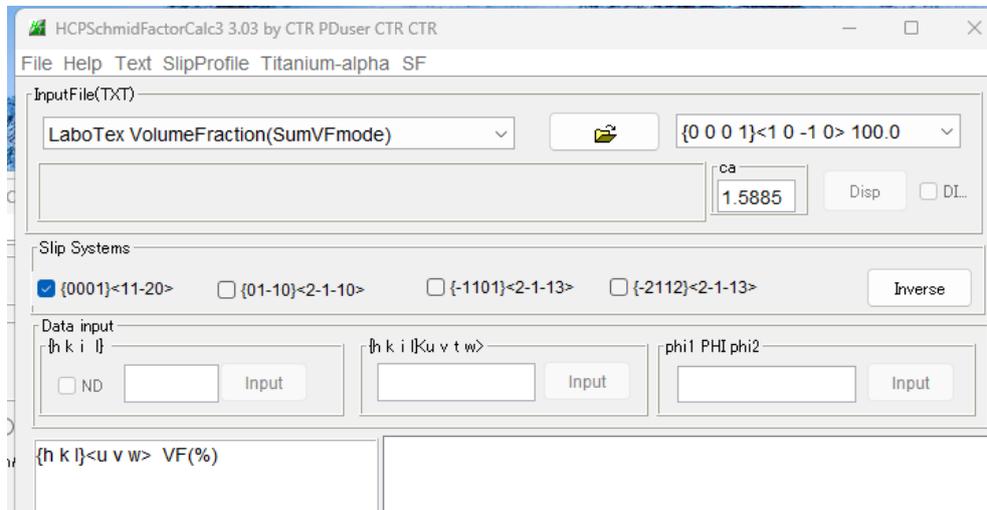
DataBaseTools->MaterialData



Disp

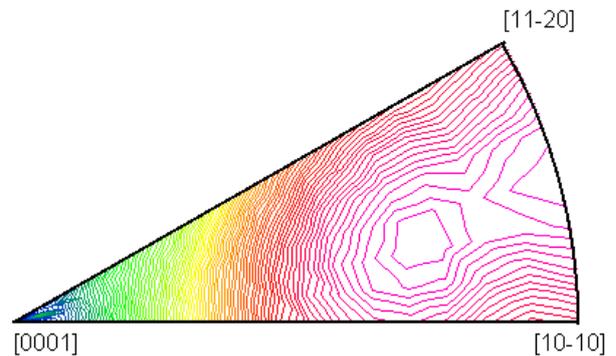
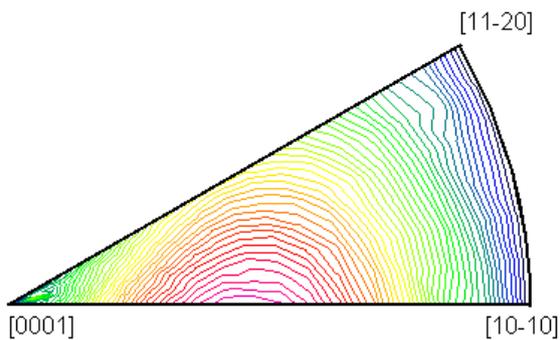
FCCと操作は同一

Slip Systemが異なる。



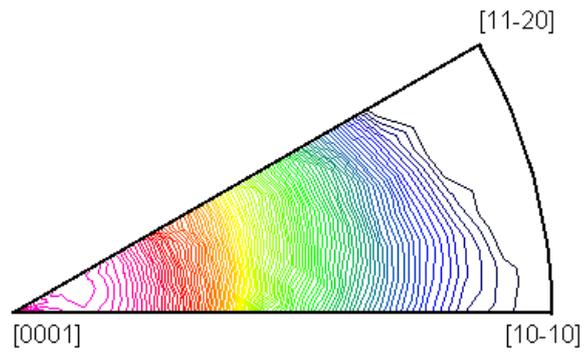
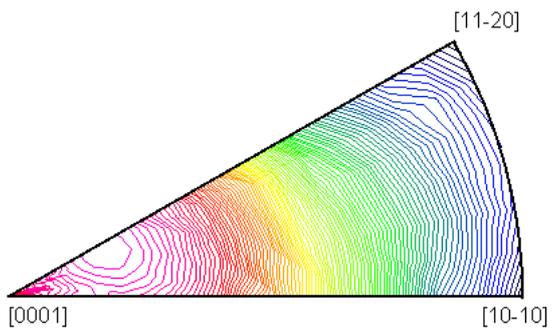
{0001}<11-20>

{01-10}<2-1-10>

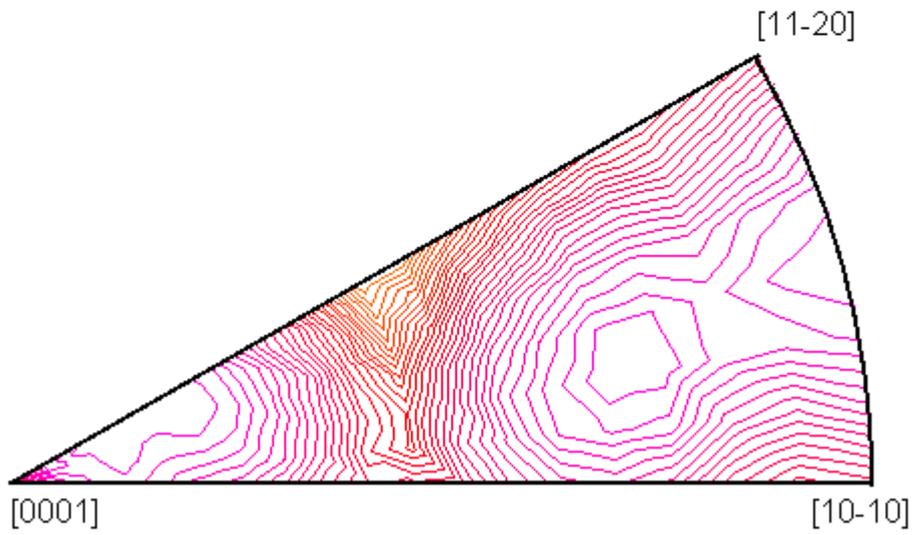


$\{-1101\}\langle 2-1-13\rangle$

$\{-2112\}\langle 2-1-13\rangle$

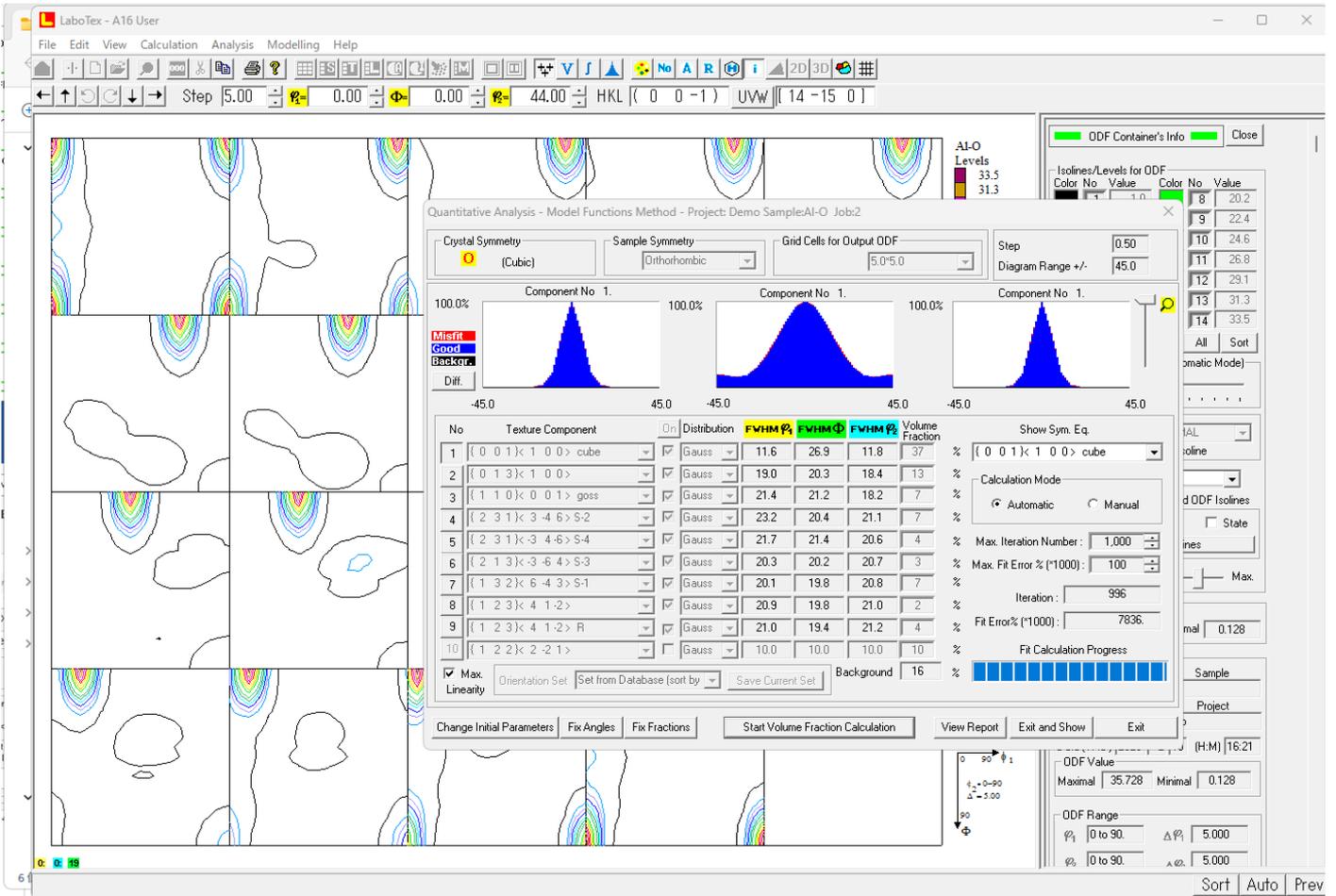


$\{0001\}\langle 11-20\rangle + \{01-10\}\langle 2-1-10\rangle + \{-1101\}\langle 2-1-13\rangle + \{-2112\}\langle 2-1-13\rangle$

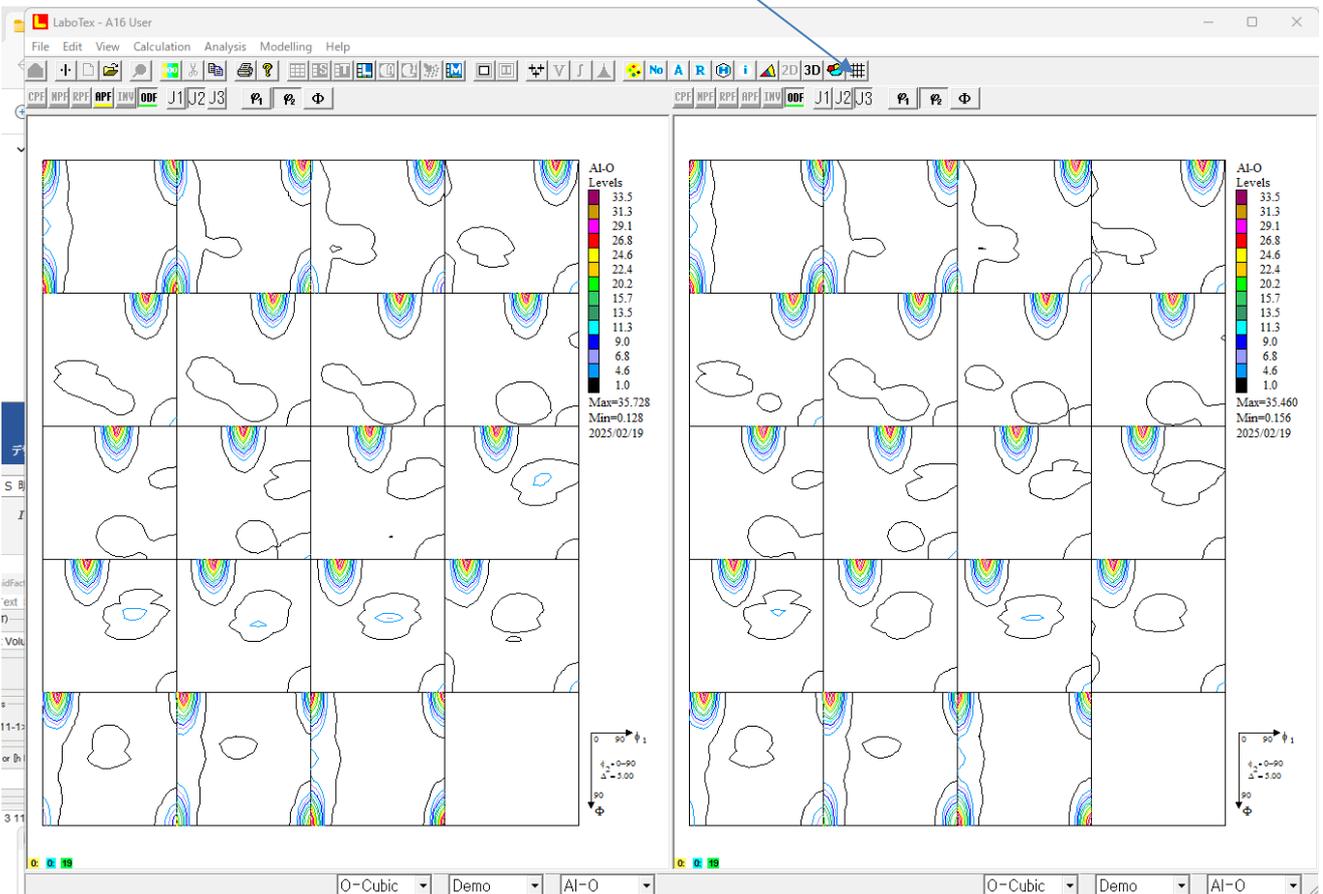


5. LaboTex VolumeFraction (VF%) の結果から

LaboTexではVF%計算結果がファイル登録されています。



VF%結果 J3



) (C:) > LaboTex2 > USER > A16.LAB > O-Cubic.LAB > Demo.LAB > AI-O.LAB > Job03

並べ替え

表示

...

名前

更新日時

種類

サイズ

AI-O.ODF

2025/2/19 9:31

ODF ファイル

27 KB

AI-O.POD

2025/2/19 9:33

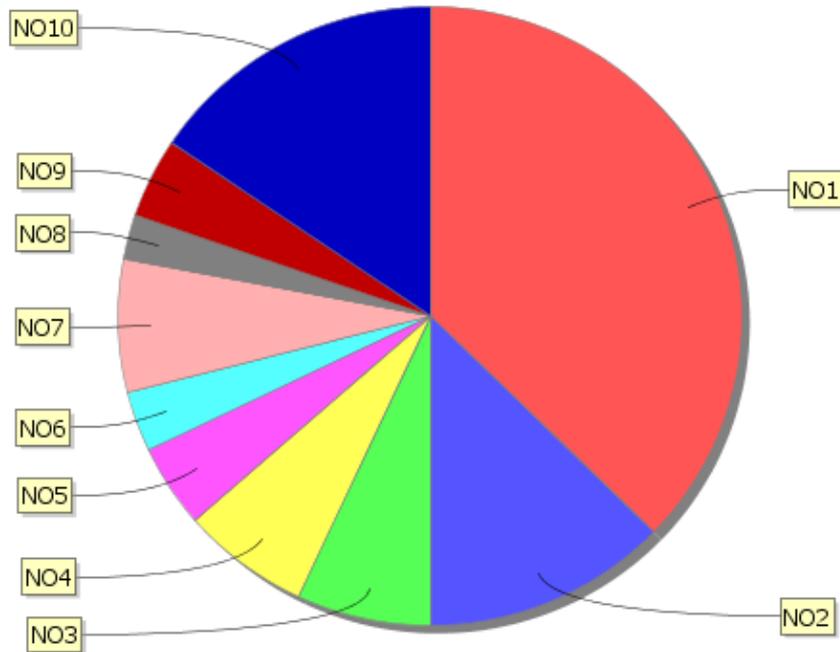
POD ファイル

2 KB

ODFVFGGraph 1.13 by CTR PDuser CTR CTR

File Help

Job	JOB03	Sample : AI-O	Project : Demo		
No.	VF (%)	Phi1 (FWHM)	Phi (FWHM)	Phi2 (FWHM)	Orientation
1:	37.29	11.6	26.9	11.8	{ 0 0 1 } < 1 0 0 > cube
2:	12.70	19.0	20.3	18.4	{ 0 1 3 } < 1 0 0 >
3:	6.95	21.4	21.2	18.2	{ 1 1 0 } < 0 0 1 > goss
4:	6.60	23.2	20.4	21.1	{ 2 3 1 } < 3 -4 6 > S-2
5:	4.33	21.7	21.4	20.6	{ 2 3 1 } < -3 4 -6 > S-4
6:	3.13	20.3	20.2	20.7	{ 2 1 3 } < -3 -6 4 > S-3
7:	6.94	20.1	19.8	20.8	{ 1 3 2 } < 6 -4 3 > S-1
8:	2.33	20.9	19.8	21.0	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 >
9:	4.15	21.0	19.4	21.2	{ 1 2 3 } < 4 1 -2 > R
10:	15.57	Background Volume Fraction			



このデータを読み込む

BCCSchmidFactorCalc3 3.18 by CTR PDuser CTR CTR

File Help Text SlipProfile ND(NDRotate) SF Free

InputFile(TXT)

LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)  { 1 0}<1 -1 2> 100.0

C:\LaboTex2\USER\A16.LAB\O-Cubic.LAB\Demo.LAB\AI-O.LAB\Job03\AI-O.POD Disp  DISP

Slip Systems

{011}<11-1>  {112}<11-1>  {123}<11-1>  FCC{111}<1-10>  Stack Inverse

Data input

real {h k l} or [h k l]  Input {h k l}Ku v w>  Input phi1 PHI phi2 phi1<=90,PHI<=90  Input

input	VF%	Schmid	VF*Schmid%
{0.00.01.0}<1.00.00.0>	37.29	0.408	0.152
{0.01.03.0}<1.00.00.0>	12.7	0.49	0.062
{1.01.00.0}<0.00.01.0>	6.95	0.0	0.0
{2.03.01.0}<3.0-4.06.0>	6.6	0.292	0.019
{2.03.01.0}<-3.04.0-6.0>	4.33	0.292	0.013
{2.01.03.0}<-3.0-6.04.0>	3.13	0.467	0.015
{1.03.02.0}<6.0-4.03.0>	6.94	0.467	0.032
{1.02.03.0}<4.01.0-2.0>	2.33	0.467	0.011
{1.02.03.0}<4.01.0-2.0>	4.15	0.467	0.019
VFsum=84.42%		VF*Schmidsum=0.324	
SchmidFactor(SumVF)=0.383			

AlongRD(X)  3 0 AlongTD(Y)<=0  2 0 AlongND(Z)  1 0 4 0

SchmidFactorProfile

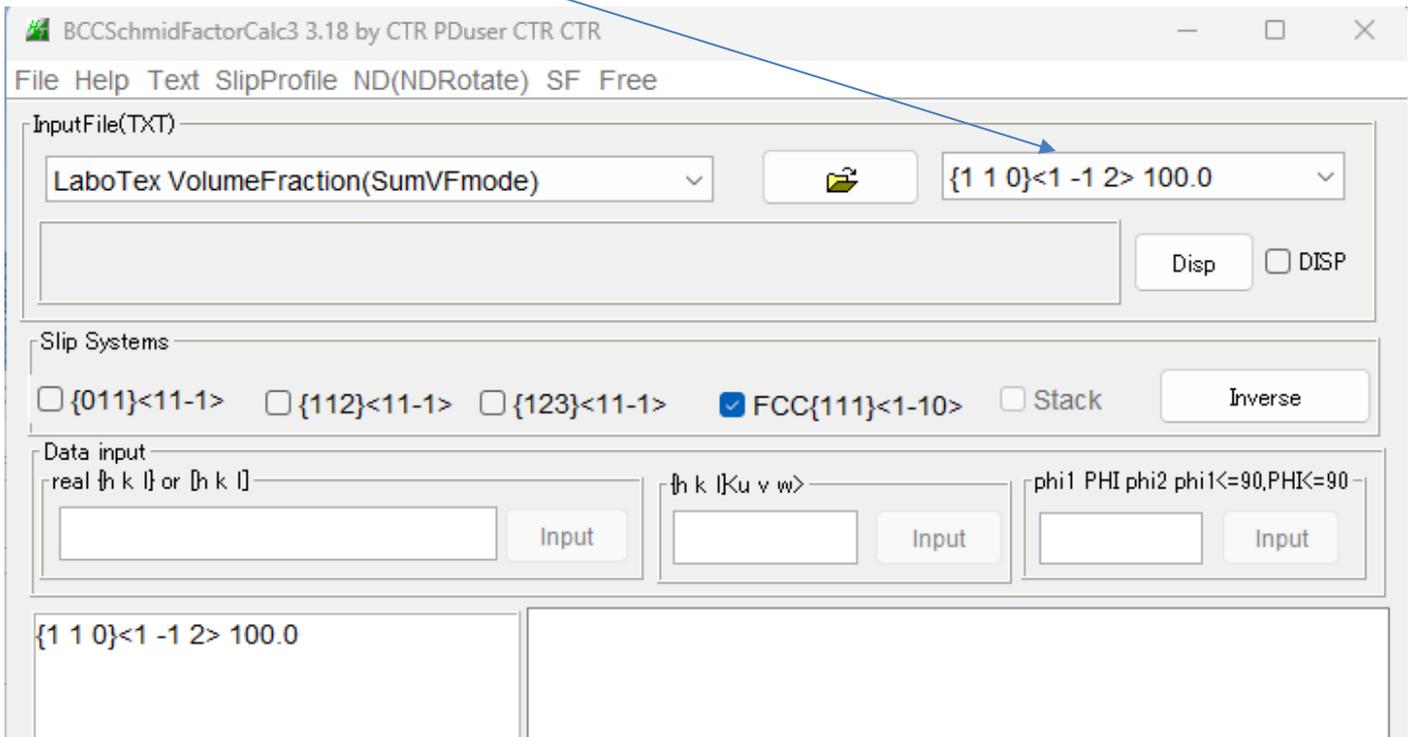
Reset ND->RD all Step 15

AXISRotation  HKLDouble

Clear  SlipDisp Schmidcalc **Symmetry SchmidCalc** SchmidFDisp

このデータから方位回転やND→RDなどのSchmid因子プロファイル表示も可能

6. 他のODFソフトウェアのVF%結果の入力から  
仮のデータを入力



データの修正と追加を手入力で行う

$\{h \ k \ l\} \langle u \ v \ w \rangle \text{ VF\%}$

$\{h \ k \ l\} \langle u \ v \ w \rangle \text{ VF\%}$

$\{h \ k \ l\} \langle u \ v \ w \rangle \text{ VF\%}$

を入力しLaboTexと同様の操作を行う。