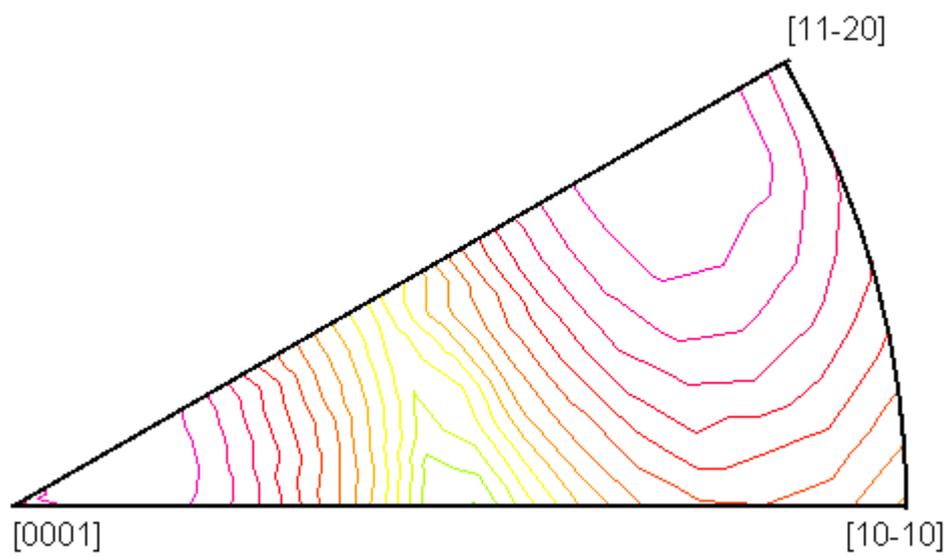


HCP Schmid Factor Calc 3ソフトウェア

Ver3.03



マグネシウム {2112}<2-1-13>SlipSystem

2023年10月19日

HelperTex Office

1. 概要
2. ソフトウェアの使い方
3. Data Input 動作確認
 3. 1 Plane 入力
 3. 1. 1 HCP金属のシュミット因子計算 (fcc)
 3. 2 Direction 入力
 3. 3 方位入力
 3. 4 Euler 角度入力
4. テストデータ入力
5. LaboTexのVolume Fraction 結果の入力
6. HCP Schmid 方位図
 6. 1 Schmid 方位図の使い方
7. MTEXによるHCP Schmid 因子計算
 7. 1 MTEXの導入
8. newODF (SmartLab) のVolume Fraction 取り込み
 8. 1 SmartLab VFデータのExport
 8. 2 データの読み込み
9. A-Type-B-TypeのVolume Fraction

1. 概要

単結晶試料に対し外力 F を与えた場合、すべり方向に対し、 $F \cos \lambda$ が加わる。

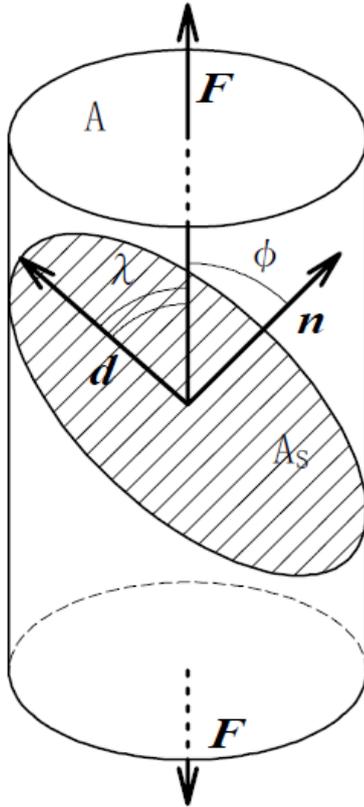
断面積を A とした場合、すべり面の面積は $A / \cos \phi$ で計算される。

この時のせん断応力は

$$F / A \cos \phi \cos \lambda = \sigma \cos \phi \cos \lambda$$

$$S = \cos \phi \cos \lambda$$

をシュミット因子 (Schmid 因子) という。



横浜国立大学岡安先生資料より

HCP金属では、 $\{11-22\} \langle -1-123 \rangle$ などのすべり方位があります。

この評価を行ってみます。

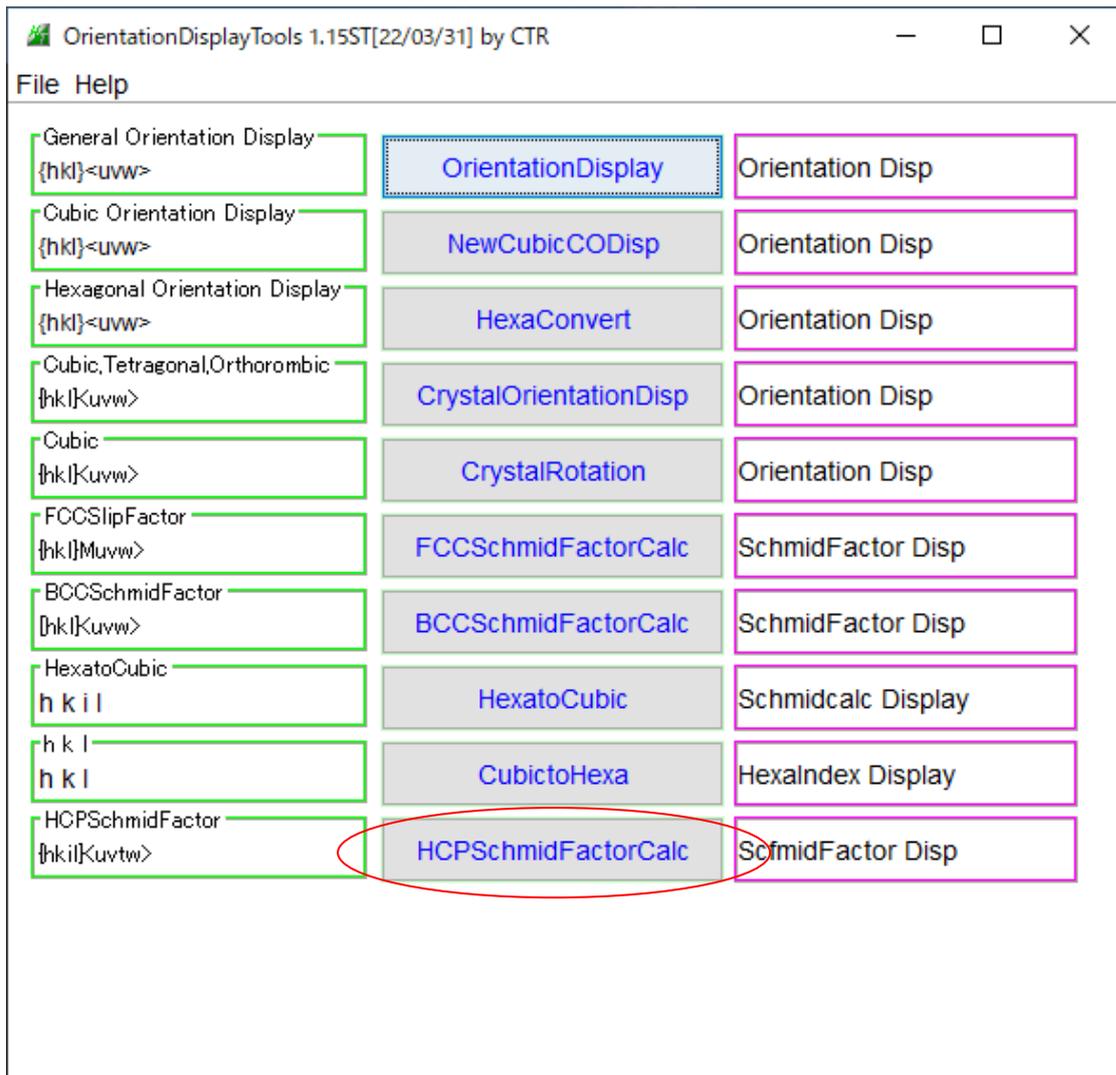
計算は、HexatoCubicソフトウェアと同じで、Slipと共にHCPからCubicに変換し、ベクトルの外積として計算が行われます。

この計算方法はHexatoCubicを参考にして下さい。

極点図からODF解析を行い、方位のVolume Fractionの計算から材料全体のSchmid因子が計算できます。

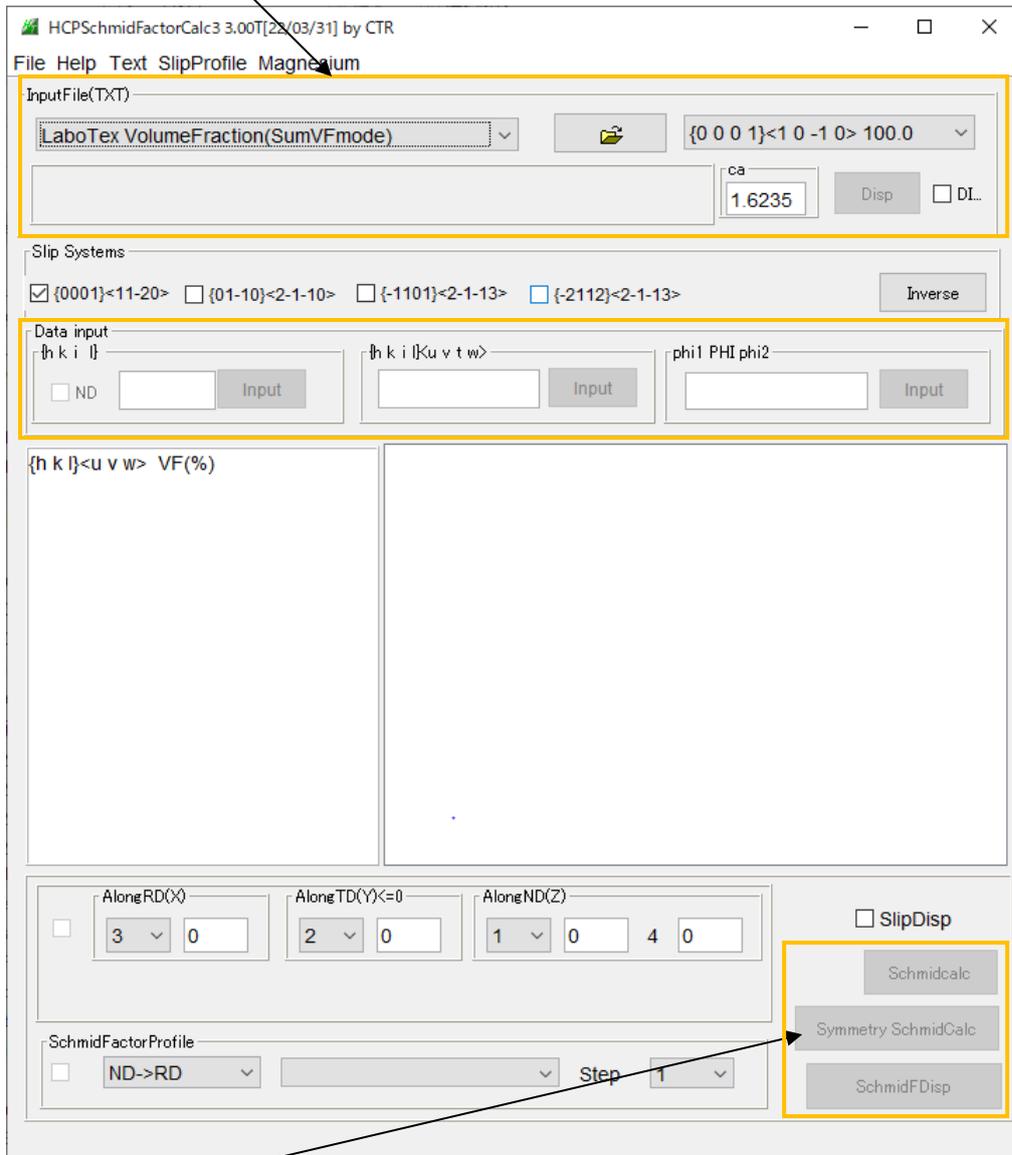
2. ソフトウェアの使い方

ODFPoleFigure の ToolKit->OrientationDisplayToos



予め、MaterialDataで材料を選択後、使用してください。

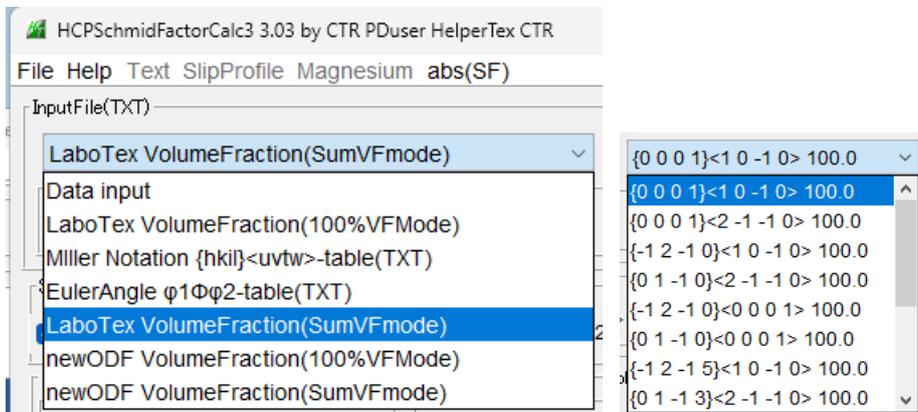
データ入力部分



計算部分

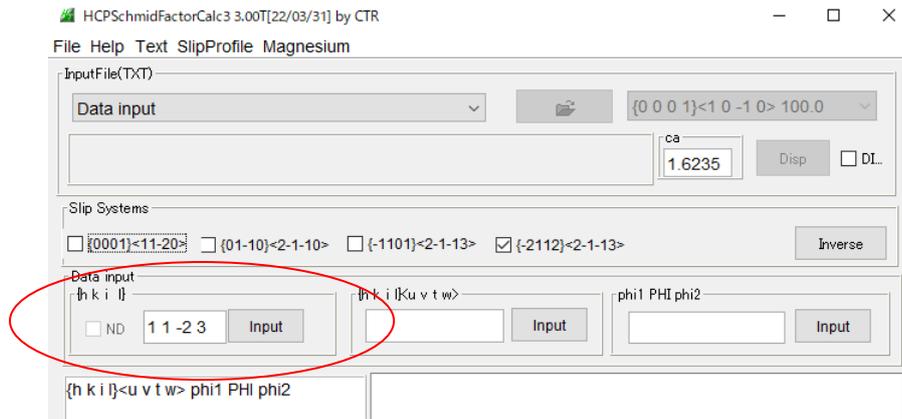
データ入力モード

デモデータ部分

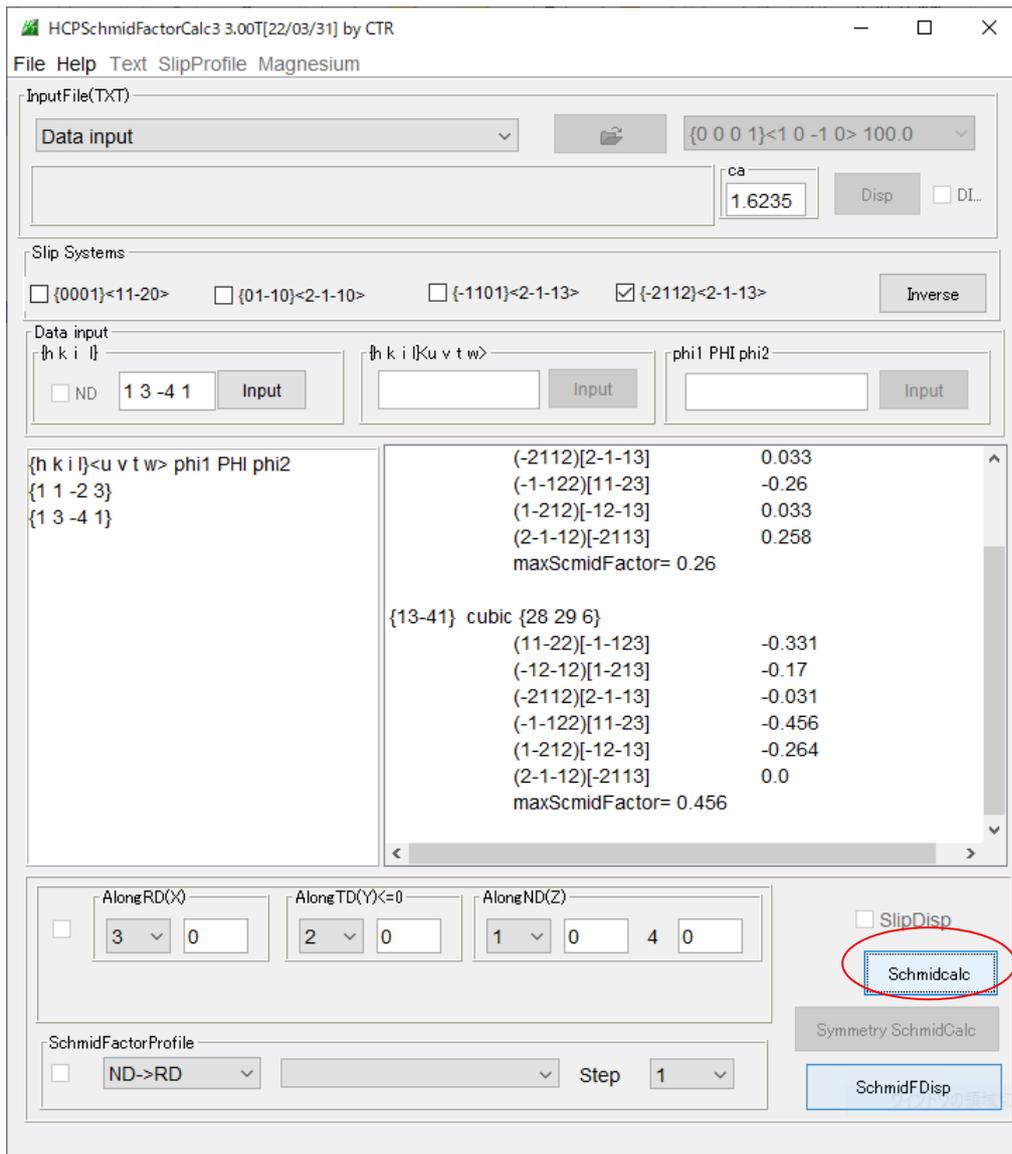


3. Data Input 動作確認

3.1 Plane 入力 (Plane から法線方向を計算し Schmid 因子を計算)



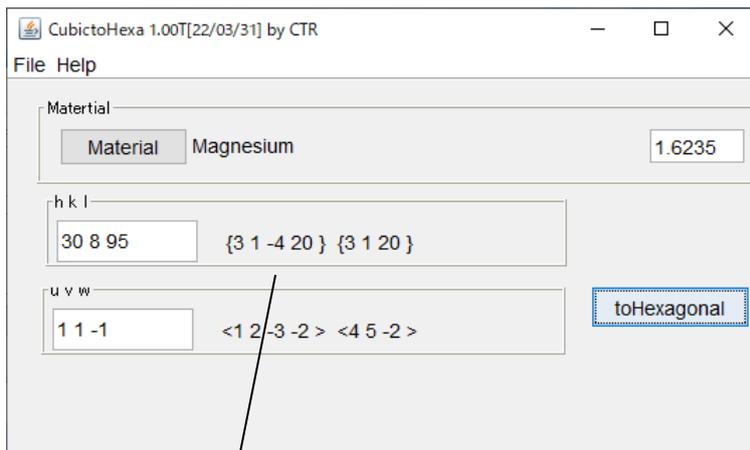
続けて、1 3 -4 1 も入力し、Schmidcalc



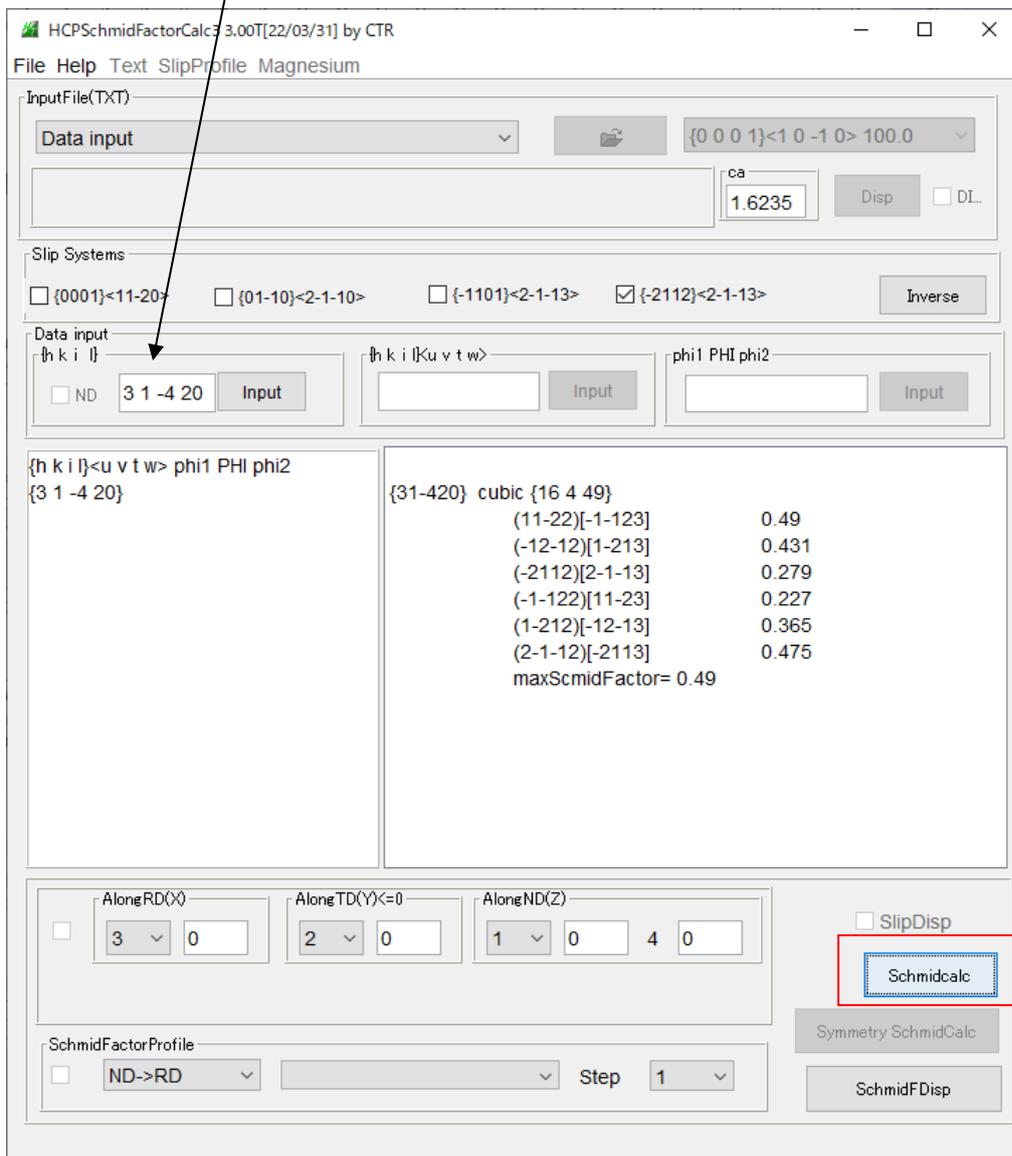
HexaPlane から Cubic Plane (= Direction) に変換し計算
すべり方位毎に計算し、最大値を求める。

3. 1. 1 HCP金属のシュミット因子計算

Cubicの方位{30 8 95}からHCP-Plane入力のためPlaneを計算



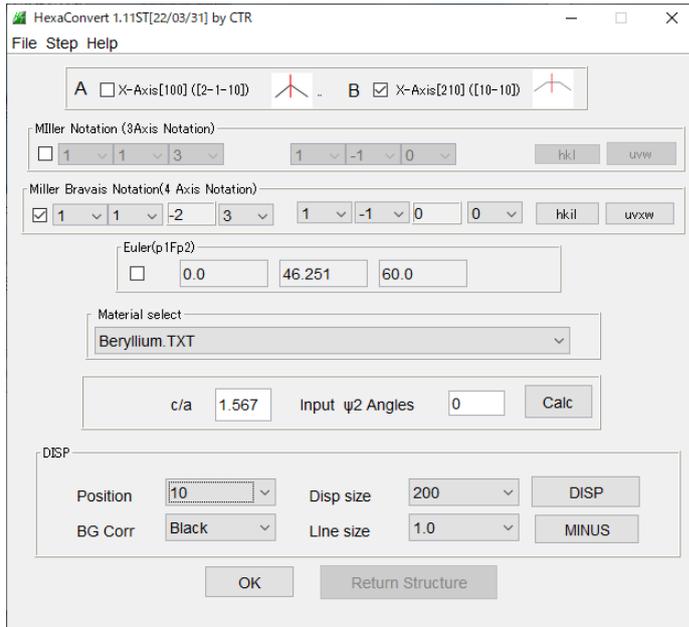
HCPのPlaneを入力



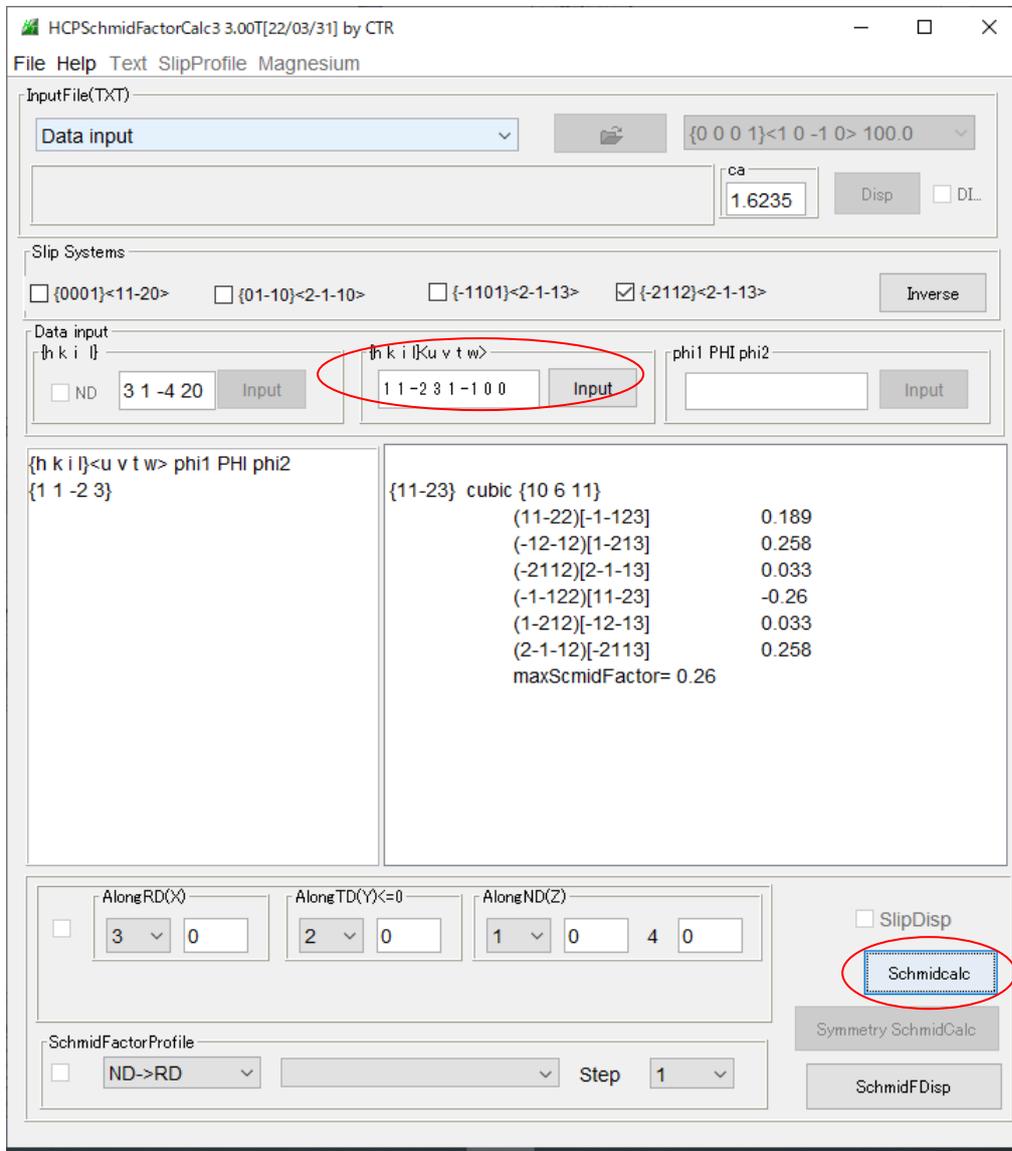
文献と同一の値が得られます。

3. 2 Direction入力

3. 3 方位入力



方位の P l a n e のみ入力される



3. 4 e u l e r 角度入力

HCPSchmidFactorCalc3 3.00T[22/03/31] by CTR

File Help Text SlipProfile Magnesium

InputFile(TXT)

Data input {0 0 0 1}<1 0 -1 0> 100.0

ca 1.6235 Disp DI...

Slip Systems

{0001}<11-20> {01-10}<2-1-10> {-1101}<2-1-13> {-2112}<2-1-13> Inverse

Data input

{h k l} {h k l|k u v t w} phi1 PHI phi2

ND Input Input Input

{h k l}<u v t w> phi1 PHI phi2

{1 1 -2 3}

{11-23} cubic {10 6 11}

(0001)[-2110]-0.249

(0001)[1-210]-0.249

(0001)[11-20]0.498

maxScmidFactor= 0.498

AlongRD(X) AlongTD(Y)<=0 AlongND(Z)

3 0 2 0 1 0 4 0

SlipDisp

Schmidcalc

Symmetry SchmidCalc

SchmidFactorProfile

ND->RD Step 1

SchmidFDisp

e u l e r 角度から P l a n e を計算し、C u b i c の方位を求め S c h m i d 因子を計算

4. テストデータ入力

HCPSchmidFactorCalc3 3.00T[22/03/31] by CTR

File Help Text SlipProfile Magnesium

InputFile(TXT): LaboTex VolumeFraction(SumVFmode)  {0 0 0 1}<1 0 -1 0> 100.0

Slip Systems: {0001}<11-20> {01-10}<2-1-10> {-1101}<2-1-13> {-2112}<2-1-13>

Data input: ND Input Input Input

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

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

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

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

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

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

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

{-1 2 -1 5}<1 0 -1 0> 100.0

{0 1 -1 3}<2 -1 -1 0> 100.0

HCPSchmidFactorCalc3 3.00T[22/03/31] by CTR

File Help Text SlipProfile Magnesium

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

ca: 1.6235 Disp DL

Slip Systems: {0001}<11-20> {01-10}<2-1-10> {-1101}<2-1-13> {-2112}<2-1-13>

Data input: ND Input Input phi1 PHI phi2: 0 46.25 60 Input

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

{0001} cubic {0 0 1}

(11-22)[-1-123]	0.447
(-12-12)[1-213]	0.447
(-2112)[2-1-13]	0.447
(-1-122)[11-23]	0.447
(1-212)[-12-13]	0.447
(2-1-12)[-2113]	0.447
maxScmidFactor=	0.447

{hkl}<uvw>	VF	Schmid	VF*Schmid
{0 0 0 1}<2 -1 -1 0>	100.0	0.447	0.447

vfsum= 1.0
SchmidFactor(VFsummode)=0.447

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

SlipDisp

SchmidFactorProfile: ND->RD all Step 1

5. LaboTexのVolume Fraction結果の入力 (B-Type)

Quantitative Analysis - Model Functions Method - Project: Demo Sample:HCPTTEST4 Job:2

Crystal Symmetry: D_6 (Hexagonal) | Sample Symmetry: Orthorhombic | Grid Cells for Output ODF: 5.0*5.0 | Step: 0.50 | Diagram Range +/-: 45.0

Component No. 3: 100.0% (Misfit, Good, Backer, Diff. plots)

No	Texture Component	On	Distribution	FWHM Φ	FWHM Φ	FWHM Φ	Volume Fraction	Show Sym. Eq.
1	{ 0 1 0 } < 0 0 1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	32 %	{ 0 1 0 } < 0 0 1 >
2	{ 0 0 1 } < 2 1 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	32 %	
3	{ -1 2 5 } < 2 1 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	32 %	
4	{ -1 2 5 } < 2 1 0 >	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	20 %	
5	{ 0.0, 45., 0. } goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
6	{ 0.0, 18.43, 0.0 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
7	{ 0., 35.26, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
8	{ 0., 25.24, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
9	{ 15.23, 47.12, 68.20 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	
10	{ 0., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10 %	

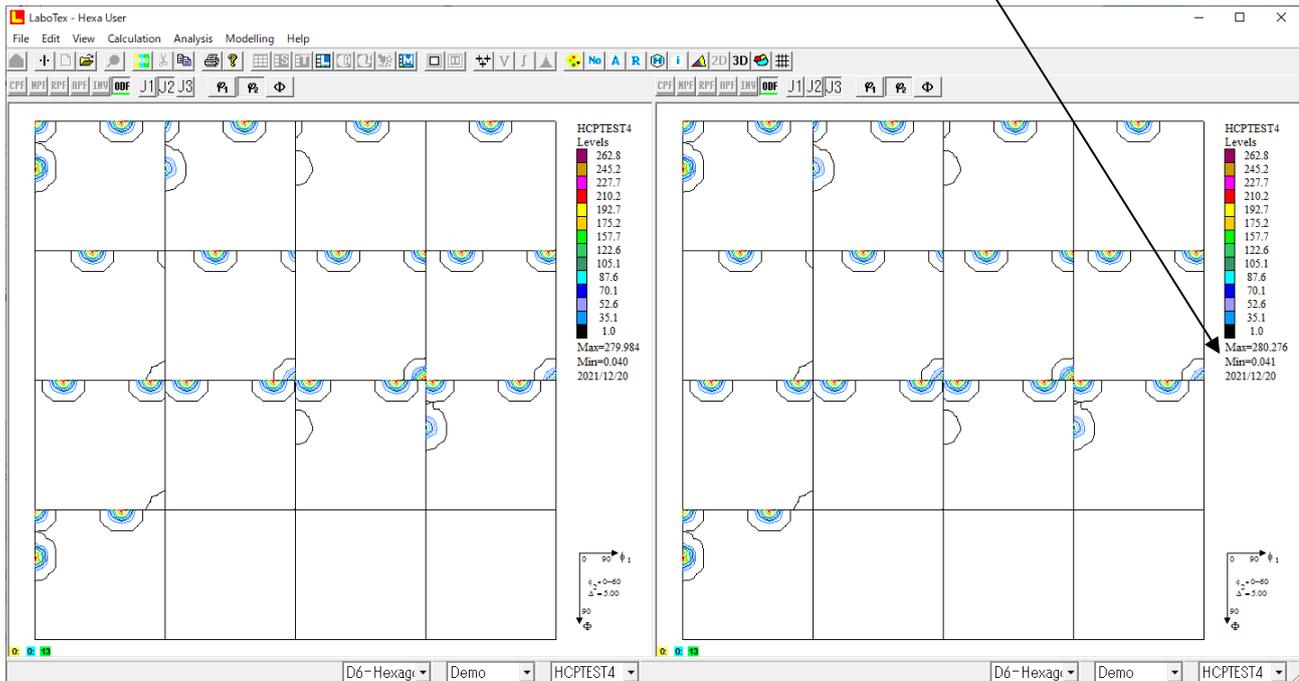
Background: 4

Max. Iteration Number: 1,000 | Max. Fit Error % (*1000): 100 | Iteration: 319 | Fit Error% (*1000): 95

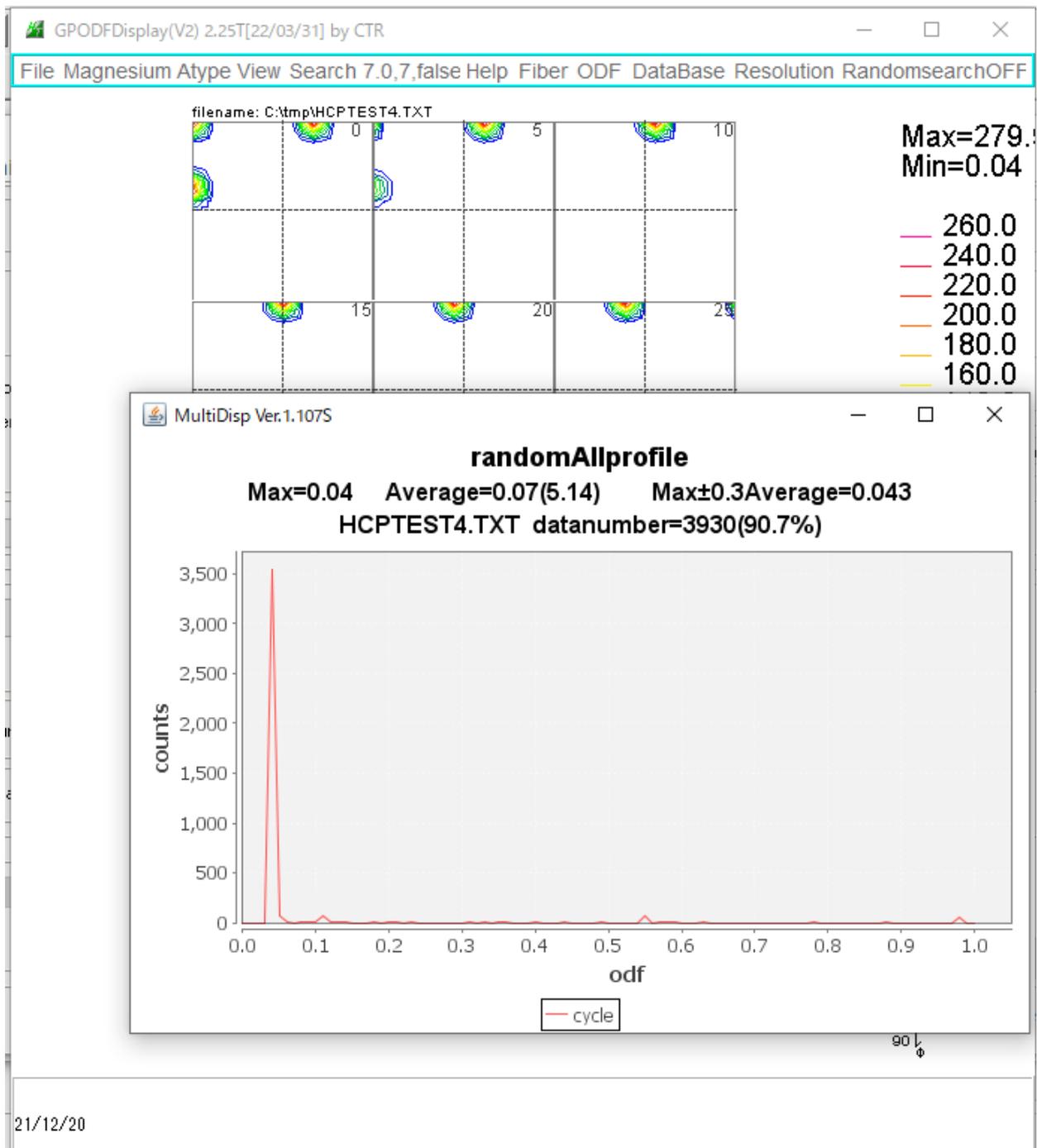
Buttons: Change Initial Parameters, Fix Angles, Fix Fractions, Start Volume Fraction Calculation, View Report, Exit and Show, Exit

入力極点図から計算した ODF

VolumeFraction 結果の ODF



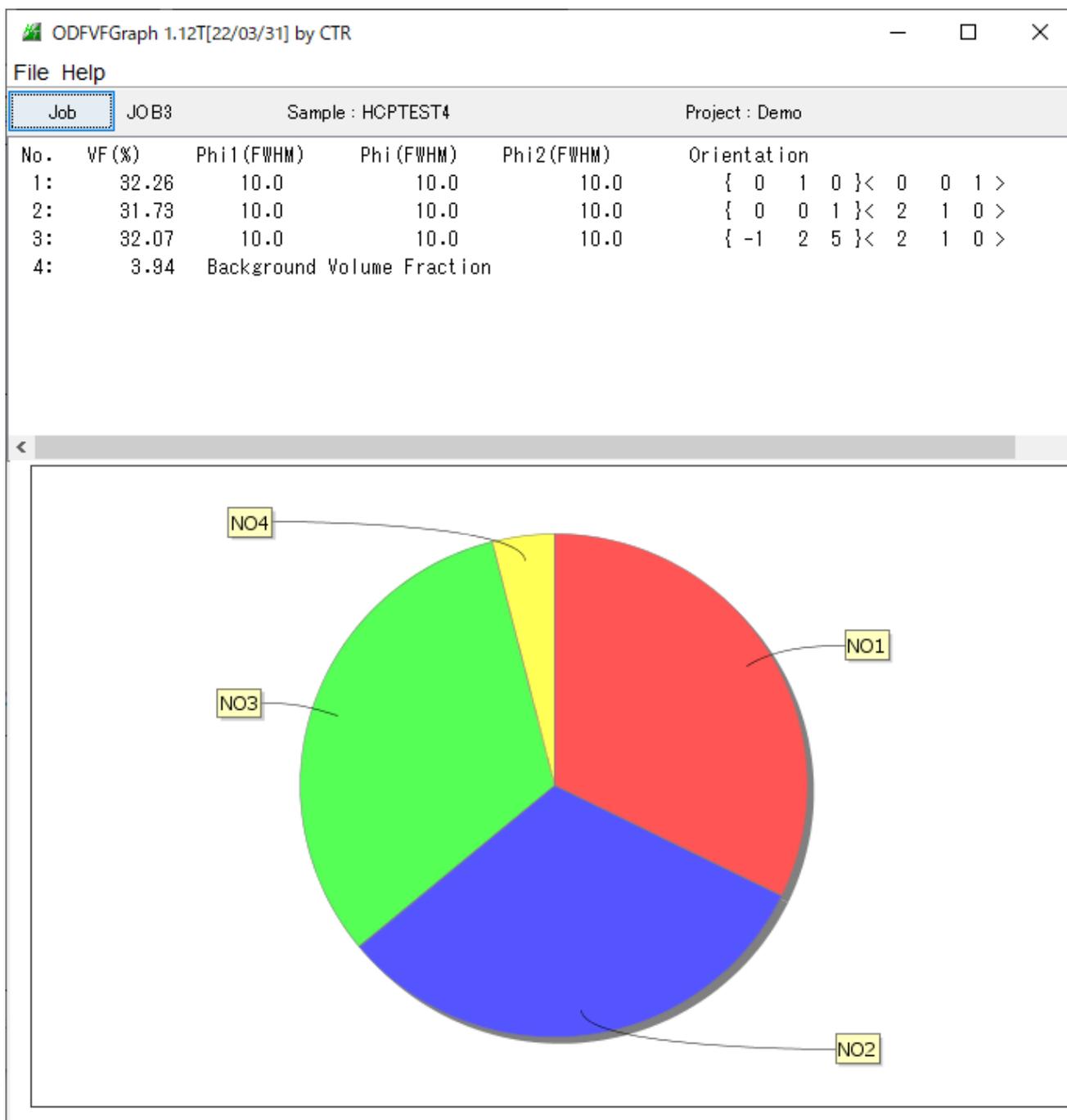
ODFの最小値が0.041%、randomが4%含まれている可能性があります。
Volume Fraction計算前のODF図をExportし確認



21/12/20

- r a n d o mはODF値1.0以下の最大値として計算されます。
- 0.04 → 4%含まれています。
- b a c k g r o u n d (その他の方位) は全てr a n d o mである。

Volume Fraction 結果



この結果から Schmid 因子を計算する。

S c h m i d 因子計算

その他の成分を除いて計算を行う。

InputFile(TXT)

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

C:\LaboTex2\USER\Hexa.LAB\D6-Hexagonal.LAB\Demo.LAB\HCPTEST4.LAB\Job03\HCPTEST4.POD ca 1.6235 Disp

Slip Systems

{0001}<-11-20> {01-10}<-2-1-10> {-1101}<-2-1-13> {-2112}<-2-1-13> Inverse

Data input

{h k i l} ND Input {h k i l|k u v t w} Input phi1 PHI phi2 0 46.25 60 Input

{0 1 -1 0}<0 0 0 1> 32.0
{0 0 0 1}<1 0 -1 0> 31.0
{-1 2 -1 5}<1 0 -1 0> 32.0

(11-22)[-1-123] 0.384
(-12-12)[1-213] 0.387
(-2112)[2-1-13] 0.384
(-1-122)[11-23] 0.178
(1-212)[-12-13] -0.024
(2-1-12)[-2113] 0.178
maxScmidFactor= 0.387

{h k i l}<u v t w>	VF	Schmid	VF*Schmid
{0 1 -1 0}<0 0 0 1>	32.0	0.335	0.107
{0 0 0 1}<1 0 -1 0>	31.0	0.447	0.138
{-1 2 -1 5}<1 0 -1 0>	32.0	0.387	0.124

vfsum= 0.95
SchmidFactor(VFsummode)=0.389

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

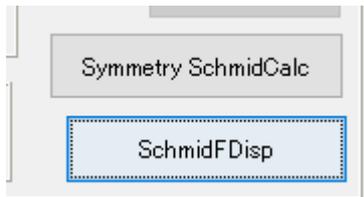
SlipDisp Schmidcalc Symmetry SchmidCalc SchmidFDisp

SchmidFactorProfile ND->RD all Step 1

各方位からC u b i c方位を計算し、S c h m i d因子を求める。

最大S c h m i d因子とV F%から全体のS c h m i d因子を計算する。

計算の確認



```

TextDisplay 1.14S C:\CTR\work\SchmidLowBCC\SchmidFactor.txt
File Help
|
{01-10} cubic {7 12 0}
  (11-22)[-1-123]      -0.335
  (-12-12)[1-213]     -0.335
  (-2112)[2-1-13]      0.0
  (-1-122)[11-23]     -0.335
  (1-212)[-12-13]     -0.335
  (2-1-12)[-2113]      0.0
  maxScmidFactor= 0.335

{0001} cubic {0 0 1}
  (11-22)[-1-123]      0.447
  (-12-12)[1-213]     0.447
  (-2112)[2-1-13]      0.447
  (-1-122)[11-23]     0.447
  (1-212)[-12-13]     0.447
  (2-1-12)[-2113]      0.447
  maxScmidFactor= 0.447

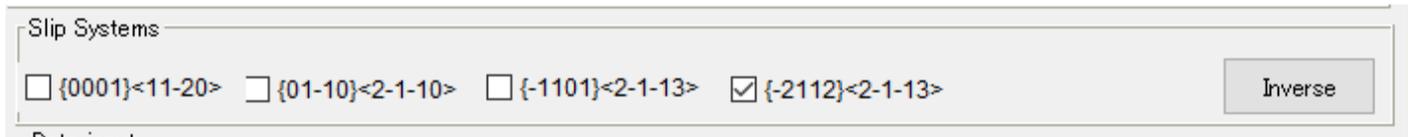
{-12-15} cubic {0 2 3}
  (11-22)[-1-123]      0.384
  (-12-12)[1-213]     0.387
  (-2112)[2-1-13]      0.384
  (-1-122)[11-23]     0.178
  (1-212)[-12-13]     -0.024
  (2-1-12)[-2113]      0.178
  maxScmidFactor= 0.387

{hkil}<uvtw>          VF          Schmid          VF*Schmid
{0 1 -1 0}<0 0 0 1>    32.0          0.335          0.107
{0 0 0 1}<1 0 -1 0>    31.0          0.447          0.138
{-1 2 -1 5}<1 0 -1 0>  32.0          0.387          0.124
vfsum= 0.95
SchmidFactor(VFsummode)=0.389
  
```

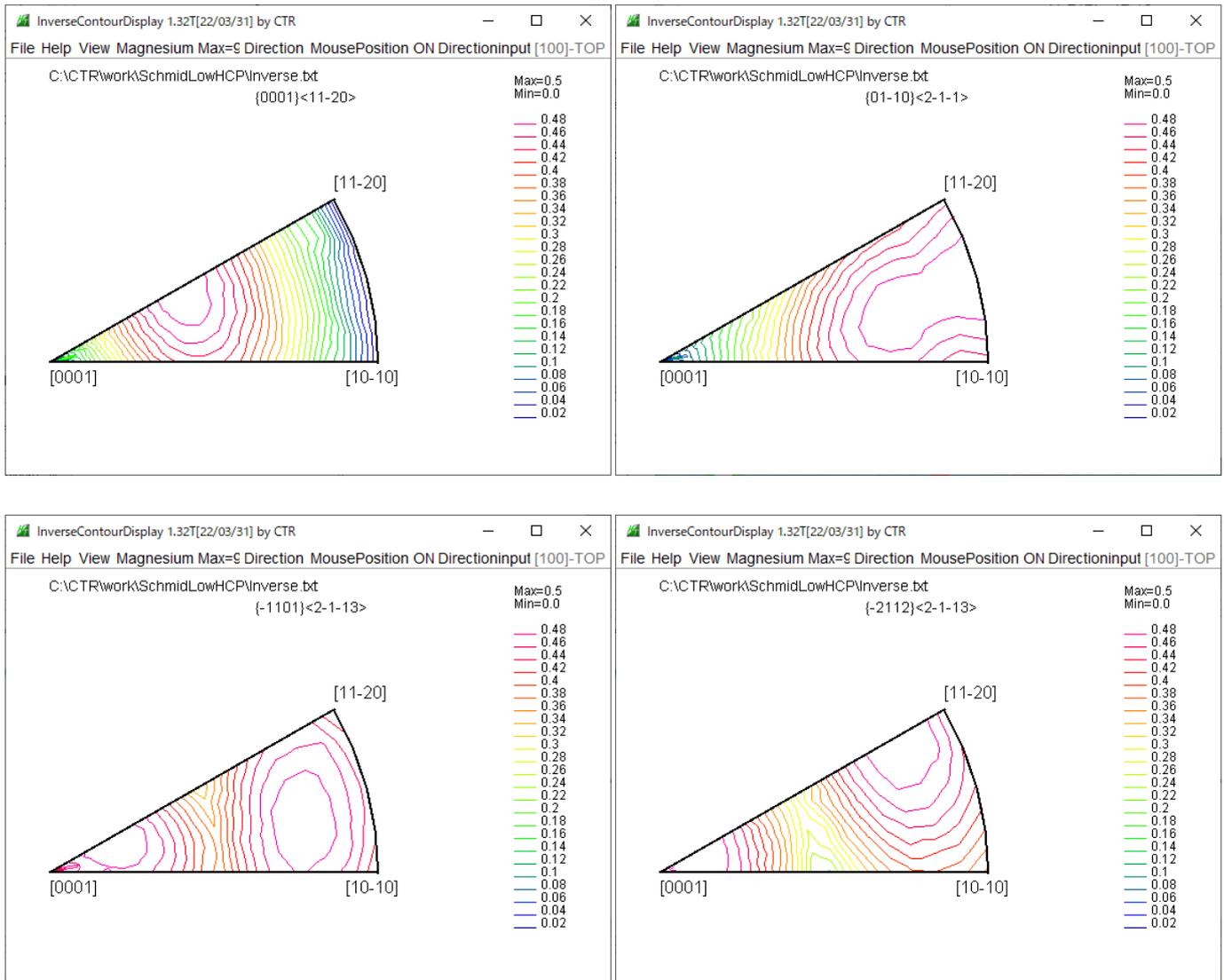
6. HCP Schmid方位図

今まで、SlipSystemは、 $\{-2112\}\langle 2-1-13\rangle$ で行っていたが、選択は以下で行われる。

複数選択も可能



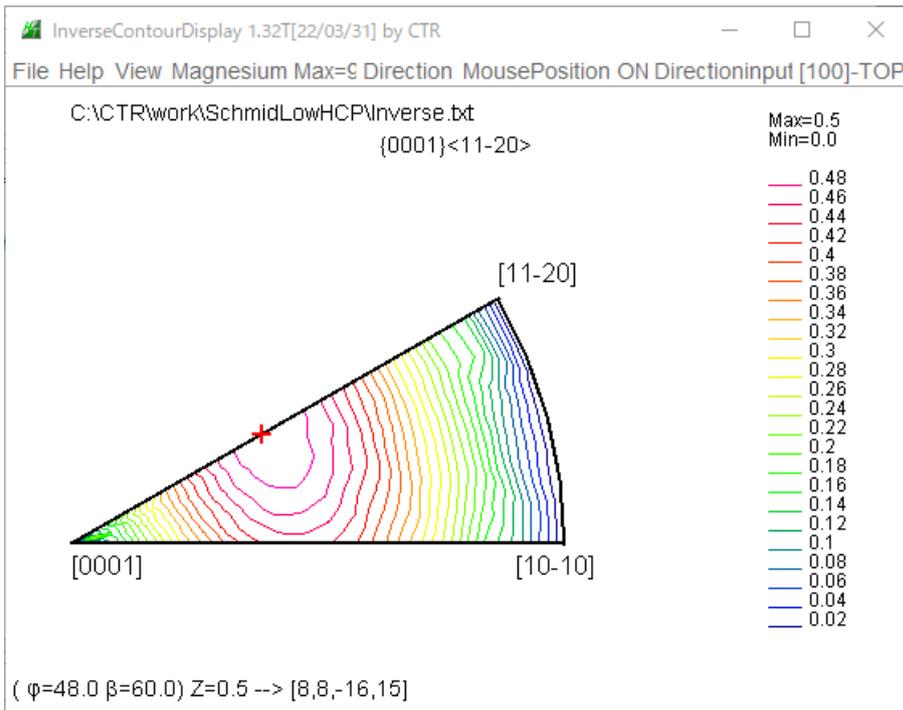
個々のSlipSystemの方位図を示します。



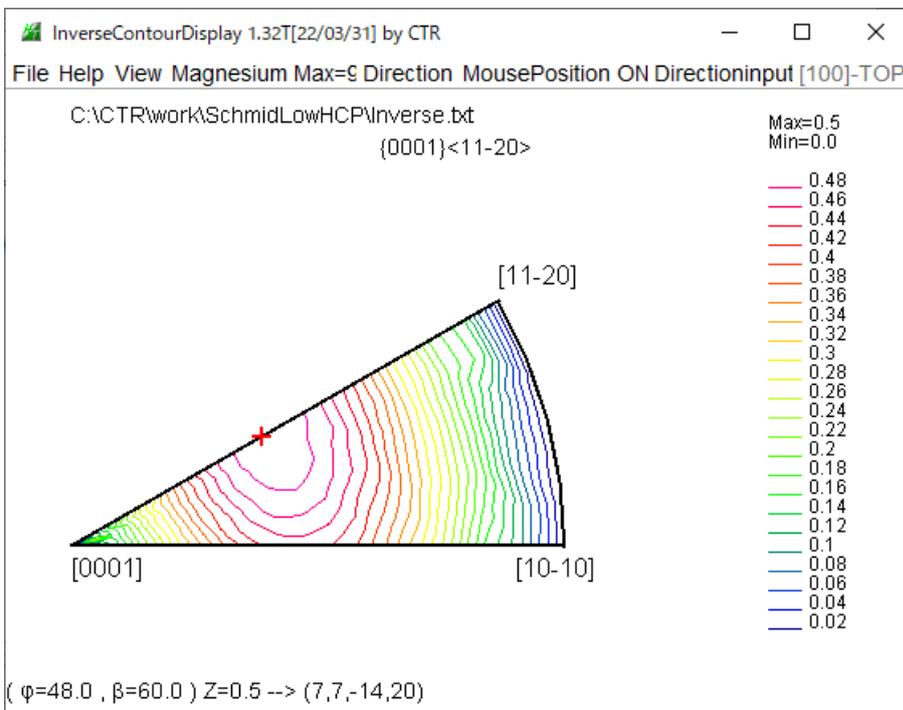
方位図の乱れは、整数化の最大整数に関係する。

6. 1 S c h m i d 方位図の使い方

マウスカーソル位置の方位をリアルタイムで表示し、クリックで固定される
D i r e c t i o n で表示

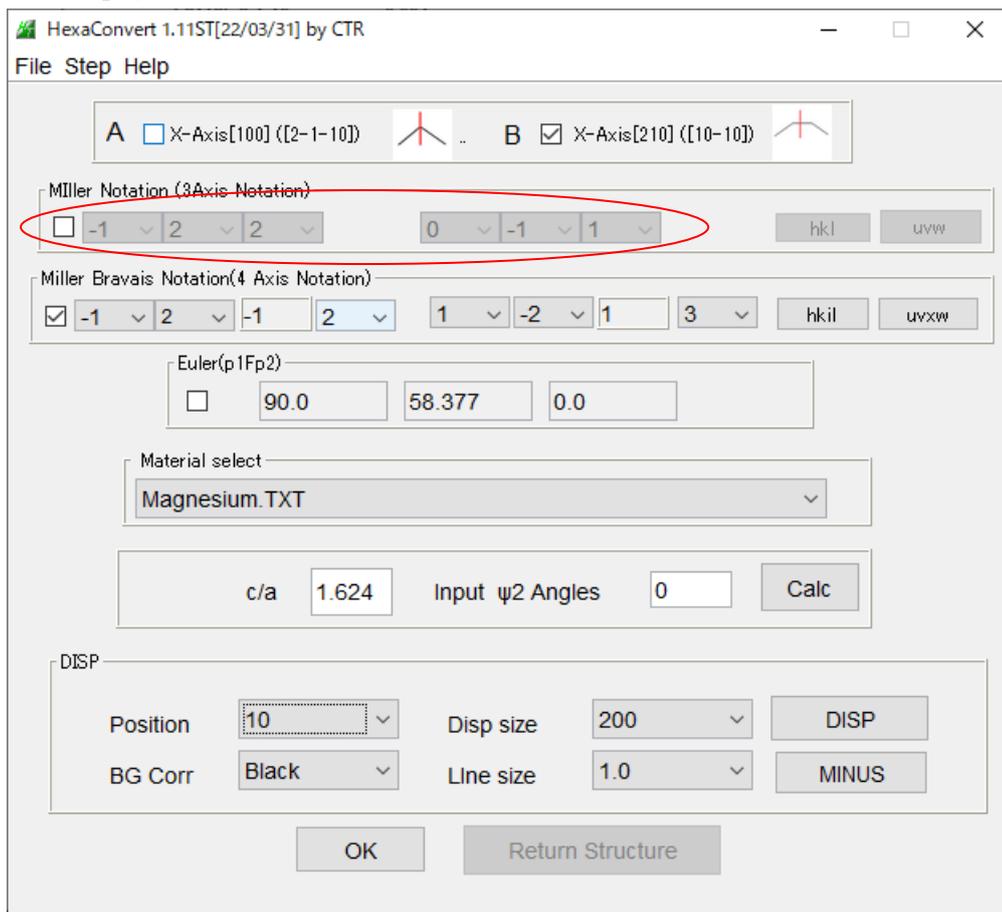


P l a n e で表示

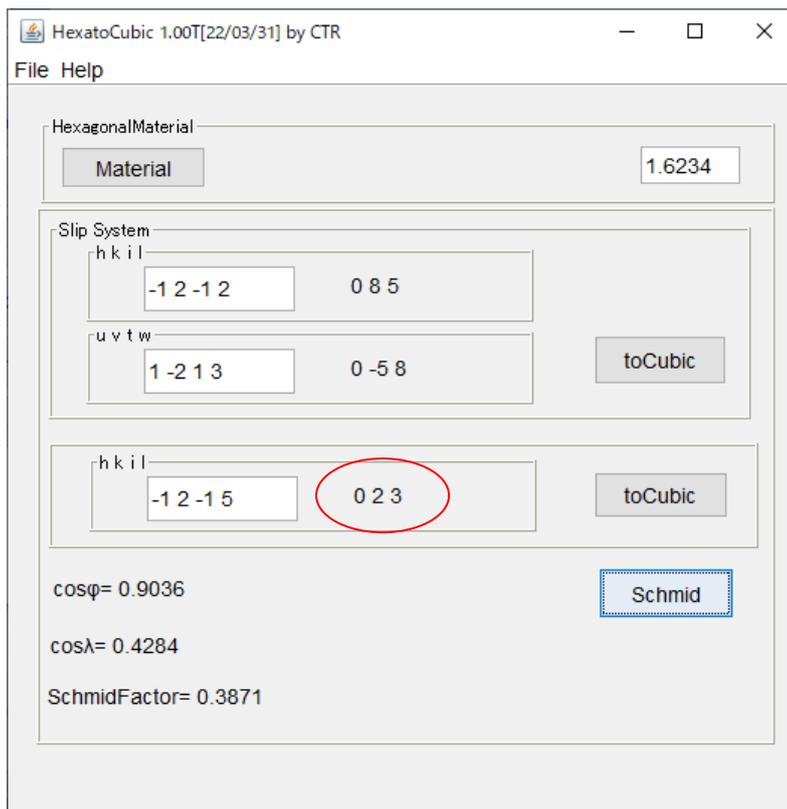


7. MTEXによるHCP Schmid因子計算 $\{-1\ 2\ -1\ 5\} \langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle$

マグネシウム Slip System $(-1\ 2\ -1\ 2) [1\ -2\ 1\ 3]$ による $\{-1\ 2\ -1\ 5\} \langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle$ を計算する



MTEXでは3指数入力



MTEXでは、Planeの方位 (ベクトル) 入力

```
>> CS = crystalSymmetry('hexagonal',[1.0,1.0,1.6235],'mineral','Mg')
```

```
CS = crystalSymmetry (show methods, plot)
```

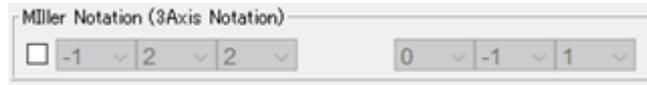
```
mineral      : Mg
```

```
symmetry     : 6/mmm
```

```
elements     : 24
```

```
a, b, c      : 1, 1, 1.6
```

```
reference frame: X | | a*, Y | | b, Z | | c*
```



```
>> n = Miller(-1,2,2,CS,'hkl')
```

```
n = Miller (show methods, plot)
```

```
mineral: Mg (6/mmm, X | | a*, Y | | b, Z | | c*)
```

```
h k i l
```

```
-1 2 -1 2
```

```
d = Miller(0,-1,1,CS,'uvw')
```

```
d = Miller (show methods, plot)
```

```
mineral: Mg (6/mmm, X | | a*, Y | | b, Z | | c*)
```

```
u v w
```

```
0 -1 1
```



```
>> r = normalize(vector3d(0,2,3))
```

```
r = vector3d (show methods, plot)
```

```
x y z
```

```
0 0.5547 0.83205
```

```
>> sS = slipSystem(d,n)
```

```
sS.SchmidFactor(r)
```

```
sS = slipSystem (show methods, plot)
```

```
mineral: Mg (6/mmm, X | | a*, Y | | b, Z | | c*)
```

```
size: 1 x 1
```

```
U V T W | H K I L CRSS
```

```
1 -2 1 3 -1 2 -1 2 1
```

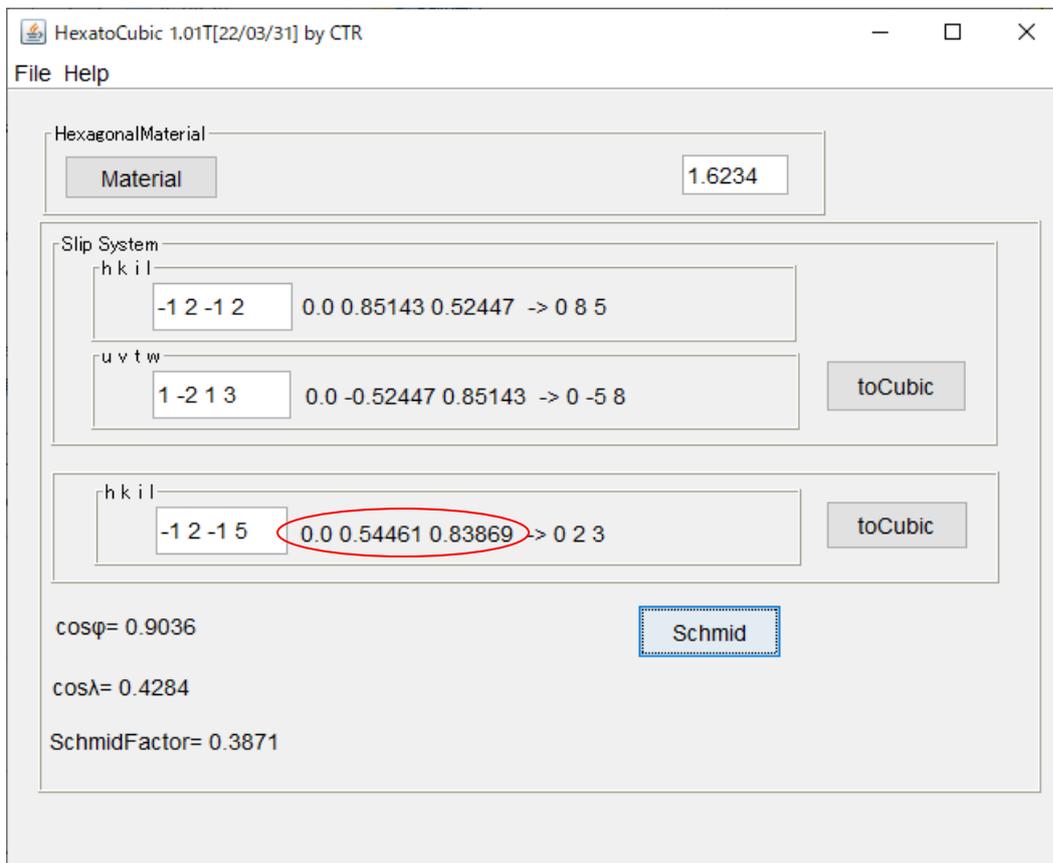
```
SchmidFactor= 0.3871
```

```
ans =
```

```
0.3794
```

この違いは、Hexagonal → Cubicの指数整数化による

P l a n e 方位の見直し



```
>> r = normalize(vector3d(0,0.54461,0.83869))
```

```
r = vector3d (show methods, plot)
```

```
x      y      z
0 0.54461 0.83869
```

```
>> sS = slipSystem(d,n)
```

```
sS.SchmidFactor(r)
```

```
sS = slipSystem (show methods, plot)
```

```
mineral: Mg (6/mmm, X | | a*, Y | | b, Z | | c*)
```

```
size: 1 x 1
```

```
U   V   T   W | H   K   I   L CRSS
1  -2   1   3  -1   2  -1   2   1
```

```
ans =
```

```
0.3872
```

期待値が得られます。

7. 1 MTEXの導入

MTEXは、MATLAB環境下で動作するEBSD，XRDのODF解析他を行えます。
CTRソフトウェアでは、XRD，EBSDデータからMTEX入力データ作成と
MTEXで解析が行われたデータ（ODF図，極点図，逆極点図）のExportデータに対し
解析を行えます。
問い合わせください。

8. newODF (SmartLab) のVolume Fraction取り込み

8.1 SmartLab VFデータのExport

ODFを計算
ODF図をエクスポート

ODF計算

計算方式: コンポーネントモデル

試料の対称性: 1/4対称

α解析開始角度(°): 0.00

α解析終了角度(°): 90.00

ODFグリッド

φ₁ステップ(°): 5.00

Φステップ(°): 5.00

φ₂ステップ(°): 5.00

パラメーター

結晶相: Ti ODFをシミュレート

最小化アルゴリズム: 遺伝的アルゴリズム

母集団: 50 個体数: 100 ターゲットχ²: 0.1

重み: 50.00 クロスオーバー: 50.00

RP因子=30.94 ステータス: 十分な数の測定極点図から計算

コンポーネント定義

ランダムな分率 0.79 最小: 0.00 最大: 1.00 フィッティング:

体積分率 (%): 78.80

コンポーネント + -
コンポーネントをDBから読み込む
コンポーネントをDBに保存

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	.	TD-Split		<input checked="" type="checkbox"/>	(0 1 3)[1 0 0]	20.5

コンポーネントプロパティ

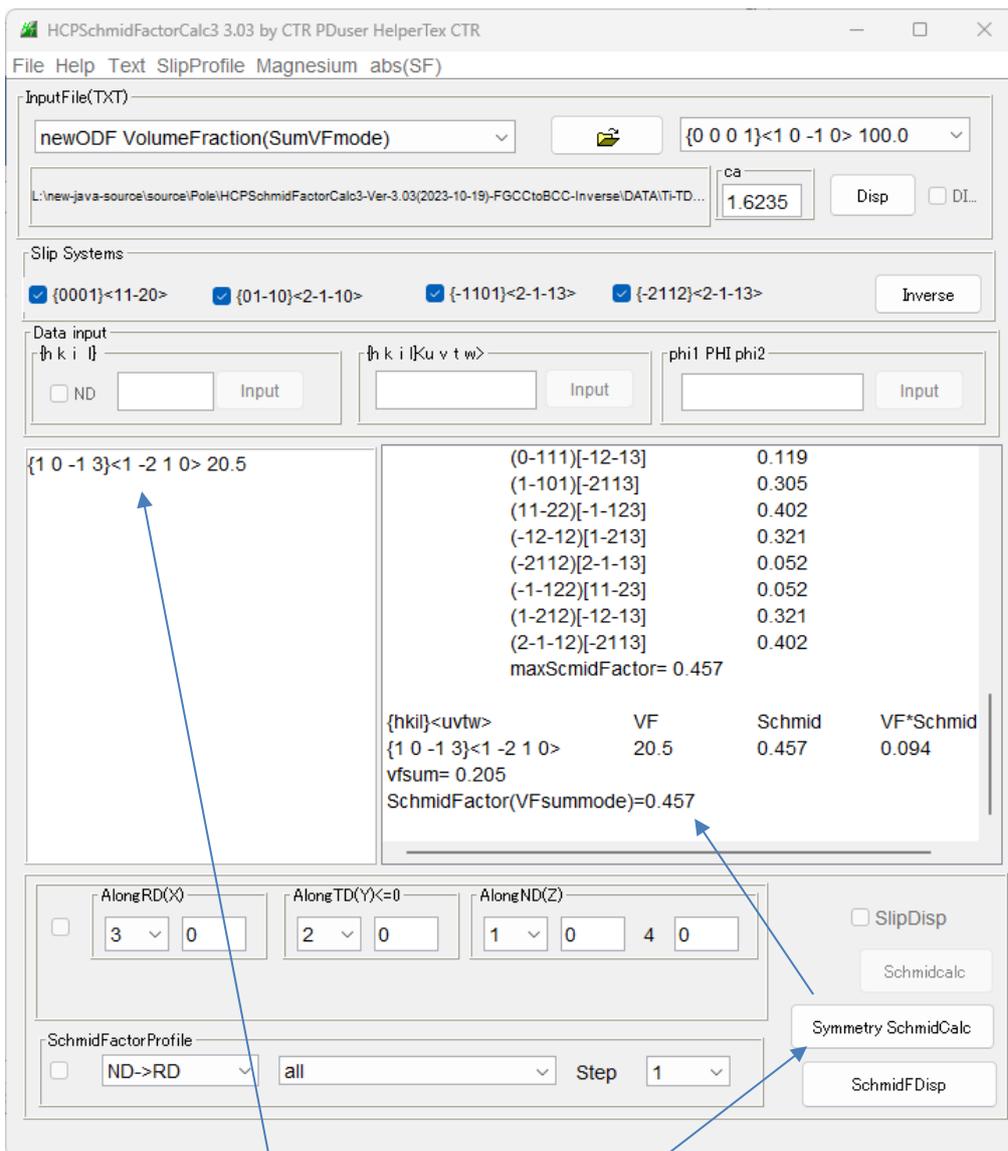
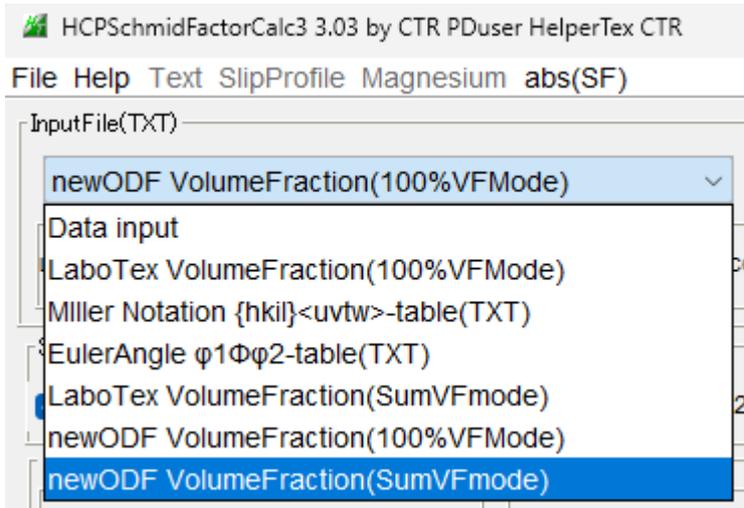
パラメーター	値	最小	最大
分率	0.21	0.00	1.00
FWHM (°)	5.61	1.00	40.00
φ ₁ (°)	0.38	0.00	90.00
Φ (°)	32.25	0.00	90.00
φ ₂ (°)	3.13	0.00	60.00

極点図補正 シミュレーション ODF計算 逆極点図シミュレーション

- 昇順に並べ替え
- 降順に並べ替え
- 並べ替えをクリア
- この列でグループ化
- グループ パネルを表示
- 列選択を表示
- ベスト フィット
- ベスト フィット (すべての列)
- フィルター エディタ...
- XPSを表示
- データをコピー
- カスタムコピー/エクスポート
- カスタマイズをリセット

N	タイプ	名称	色	極点図上に表示	方位	体積分率(%)
1	peakComponent	TD-Split	#FF99CC	チェックあり	(1 0 3)[0 -1 0]	20.5

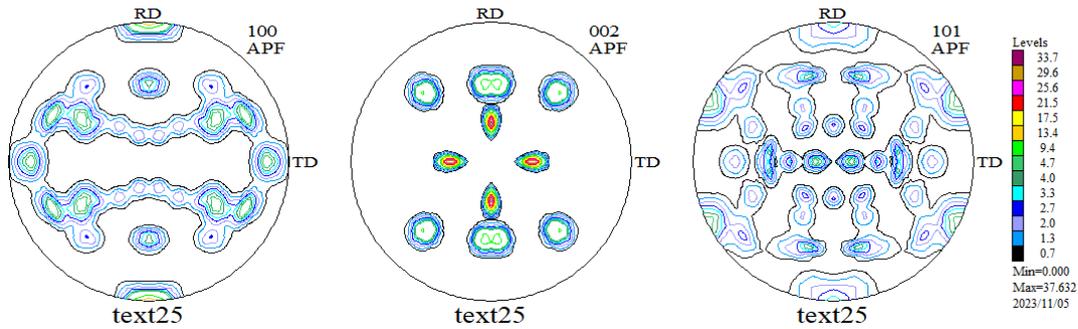
8. 2 データの読み込み



3 指数から 4 指数に変換し読み込まれ、計算が行われます。

9. A-Type-B-TypeのVolumeFraction

テストデータ



No	Texture Component	On	Distribution	FWHM φ_1	FWHM Φ	FWHM φ_2	Volume Fraction	Show Sym. Eq.
1	{ 0 1 3 } < -3 -6 2 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25	{ 0 1 3 } < -3 -6 2 >
2	{ -1 2 5 } < 2 1 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.7	10.0	10.0	27	%
3	{ 1 2 3 } < 1 1 -1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.1	22	%
4	{ 1 5 4 } < 1 -1 1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.1	10.0	10.3	26	%
5	{ 90., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	2	%
6	{ 0., 35.26, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
7	{ 0., 25.24, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
8	{ 39.23, 65.91, 26.5 } copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
9	{ 74.21, 45., 90. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
10	{ 27.03, 57.69, 18.43 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%

Max. Linearity
 Orientation Set: Set from Database (sort by) Save Current Set Background: 0

Show Sym. Eq. { 0 1 3 } < -3 -6 2 >
 Calculation Mode: Automatic Manual
 Max. Iteration Number: 1,000
 Max. Fit Error % (*1000): 100
 Iteration: 1001
 Fit Error% (*1000): 4301.
 Fit Calculation Progress: [Progress Bar]



No	Texture Component	On	Distribution	FWHM φ_1	FWHM Φ	FWHM φ_2	Volume Fraction	Show Sym. Eq.
1	{ 0 1 3 } < -3 -6 2 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25	{ 0 1 3 } < -3 -6 2 >
2	{ -1 2 5 } < 2 1 0 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	25	%
3	{ 1 2 3 } < 1 1 -1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.2	10.3	10.4	23	%
4	{ 1 5 4 } < 1 -1 1 >	<input checked="" type="checkbox"/>	Gauss	10.4	10.4	10.4	27	%
5	{ 90., 54.74, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	2	%
6	{ 52.87, 74.5, 33.69 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
7	{ 0.0, 45., 0. } goss	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
8	{ 0.0, 18.43, 0.0 }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
9	{ 39.23, 65.91, 26.5 } copper	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%
10	{ 0., 35.26, 45. }	<input type="checkbox"/>	Gauss	10.0	10.0	10.0	10	%

Max. Linearity
 Orientation Set: Set from Database (sort by) Save Current Set Background: 0

Show Sym. Eq. { 0 1 3 } < -3 -6 2 >
 Calculation Mode: Automatic Manual
 Max. Iteration Number: 1,000
 Max. Fit Error % (*1000): 100
 Iteration: 973
 Fit Error% (*1000): 2949.
 Fit Calculation Progress: [Progress Bar]

ほぼ同一結果が得られる