

材料物性特論 6月7日課題

問題は、引張軸が[001]、[111]、[145]のときにシュミット因子が大きいすべり系を探すこと、また、それらのうち大きいものから5つを選んで平均を求めて、多結晶の場合のテイラー因子と比較することでした。

引張軸が対称性のよい方向の場合には、図を描いた方がよいです。実際に描いてみると、等価な幾何学的関係を有するすべり系が複数あり、そのうちのひとつで代表できるので、計算も簡単です。しかし、引張軸の方位が対称が悪い方向である場合には、すべてのすべり系について一つ一つシュミット因子を計算することになります。ここでは、BASICを組んで任意の引張軸方位に対するすべり系とシュミット因子を出すことにします。プログラムは下のとおりです。

なお、本プログラムは、(仮称) 10進法 BASIC を用いています。これは

<http://hp.vector.co.jp/authors/VA008683/>

よりダウンロードでき、取り扱いの解説もあります。

```
!
! Tensile axis
!
LET HT = 0
LET KT = 0
LET LT = 1
LET T = (HT^2 + KT^2 + LT^2)^.5
PRINT "Tensile axis direction = [ ";HT;" ";KT;" ";LT;" ]"
!
! (111) slip plane
!
LET HP = 1
LET KP = 1
LET LP = 1
LET theta = ACOS((HT*HP + KT*KP + LT*LP)/T/3^.5)
PRINT "( ";HP;" ";KP;" ";LP;" ) :"; theta = ";theta/PI*180;"deg"
! slip direction
! [-110], [1-10], [-101], [10-1], [0-11], [01-1]
FOR HS = -1 TO 1
  FOR KS = -1 TO 1
    FOR LS = -1 TO 1
      LET R = HP*HS + KP*KS + LP*LS
      IF R = 0 THEN GOTO 1 ELSE GOTO 2
```

```

1
    LET fai = ACOS((HT*HS + KT*KS + LT*LS)/T/2^.5)
    LET Schmidfactor = COS(theta)*COS(fai)
    IF Schmidfactor > 1e-10 THEN GOTO 3 ELSE GOTO 2
3
    PRINT "[";HS;" ";KS;" ";LS;" ] : "; fai =";fai/PI*180;"deg, Schmid factor =";Schmidfactor
2
    NEXT LS
    NEXT KS
NEXT HS
!
! (1-1-1) slip plane
!
LET HP = 1
LET KP = -1
LET LP = -1
LET theta = ACOS((HT*HP + KT*KP + LT*LP)/T/3^.5)
PRINT "(";HP;" ";KP;" ";LP;" ) : "; theta = ";theta/PI*180;"deg"
! slip direction
! [110], [-1-10], [101], [-10-1], [0-11], [01-1]
FOR HS = -1 TO 1
    FOR KS = -1 TO 1
        FOR LS = -1 TO 1
            LET R = HP*HS + KP*KS + LP*LS
            IF R = 0 THEN GOTO 4 ELSE GOTO 6
4
            LET fai = ACOS((HT*HS + KT*KS + LT*LS)/T/2^.5)
            LET Schmidfactor = COS(theta)*COS(fai)
            IF Schmidfactor > 1e-10 THEN GOTO 5 ELSE GOTO 6
5
            PRINT "[";HS;" ";KS;" ";LS;" ] : "; fai =";fai/PI*180;"deg, Schmid factor =";Schmidfactor
6
            NEXT LS
            NEXT KS
NEXT HS
!
! (1-11) slip plane
!
LET HP = 1

```

```

LET KP = -1
LET LP = 1
LET theta = ACOS((HT*HP + KT*KP + LT*LP)/T/3^.5)
PRINT "( ";HP;" ";KP;" ";LP;" ) : "; theta = ";theta/PI*180;"deg"
! slip direction
! [110], [-1-10], [10-1], [-101], [011], [011]
FOR HS = -1 TO 1
  FOR KS = -1 TO 1
    FOR LS = -1 TO 1
      LET R = HP*HS + KP*KS + LP*LS
      IF R = 0 THEN GOTO 7 ELSE GOTO 9
7
      LET fai = ACOS((HT*HS + KT*KS + LT*LS)/T/2^.5)
      LET Schmidfactor = COS(theta)*COS(fai)
      IF Schmidfactor > 1e-10 THEN GOTO 8 ELSE GOTO 9
8
      PRINT "[ ";HS;" ";KS;" ";LS;" ] : "; fai = ";fai/PI*180;"deg, Schmid factor = ";Schmidfactor
9
    NEXT LS
  NEXT KS
NEXT HS
!
! (11-1) slip plane
!
LET HP = 1
LET KP = 1
LET LP = -1
LET theta = ACOS((HT*HP + KT*KP + LT*LP)/T/3^.5)
PRINT "( ";HP;" ";KP;" ";LP;" ) : "; theta = ";theta/PI*180;"deg"
! slip direction
! [1-10], [-110], [101], [-10-1], [011], [011]
FOR HS = -1 TO 1
  FOR KS = -1 TO 1
    FOR LS = -1 TO 1
      LET R = HP*HS + KP*KS + LP*LS
      IF R = 0 THEN GOTO 10 ELSE GOTO 12
10
      LET fai = ACOS((HT*HS + KT*KS + LT*LS)/T/2^.5)
      LET Schmidfactor = COS(theta)*COS(fai)

```

```

        IF Schmidfactor > 1e-10 THEN GOTO 11 ELSE GOTO 12
11
        PRINT "[";HS;" ";KS;" ";LS;" ]: "; " fai =";fai/PI*180;"deg, Schmid factor =";Schmidfactor
12
        NEXT LS
        NEXT KS
        NEXT HS
END

```

以上のプログラムで計算した結果は、以下のとおりです。

引張軸が[001]のとき。

```

Tensile axis direction = [ 0 0 1 ]
( 1 1 1 ): theta = 54.7356103172453 deg
[-1 0 1]: fai = 45 deg, Schmid factor = .408248290463863
[ 0 -1 1]: fai = 45 deg, Schmid factor = .408248290463863
( 1 -1 -1 ): theta = 125.264389682754 deg
[-1 0 -1]: fai = 135 deg, Schmid factor = .408248290463863
[ 0 1 -1]: fai = 135 deg, Schmid factor = .408248290463863
( 1 -1 1 ): theta = 54.7356103172453 deg
[-1 0 1]: fai = 45 deg, Schmid factor = .408248290463863
[ 0 1 1]: fai = 45 deg, Schmid factor = .408248290463863
( 1 1 -1 ): theta = 125.264389682754 deg
[-1 0 -1]: fai = 135 deg, Schmid factor = .408248290463863
[ 0 -1 -1]: fai = 135 deg, Schmid factor = .408248290463863

```

シュミット因子が 0.4082 となるすべり系は上記のとおりであり、テイラー因子は $M_{001} = 2.449$ となります。

引張軸が[111]のとき。

```

Tensile axis direction = [ 1 1 1 ]
( 1 1 1 ): theta = 3.14761966640435E-6 deg
( 1 -1 -1 ): theta = 109.471220634491 deg
[-1 -1 0]: fai = 144.735610317245 deg, Schmid factor = .272165526975909
[-1 0 -1]: fai = 144.735610317245 deg, Schmid factor = .272165526975909
( 1 -1 1 ): theta = 70.5287793655096 deg
[ 0 1 1]: fai = 35.2643896827548 deg, Schmid factor = .272165526975904

```

[1 1 0]: fai = 35.2643896827548 deg, Schmid factor = .272165526975904
 (1 1 -1): theta = 70.5287793655096 deg
 [0 1 1]: fai = 35.2643896827548 deg, Schmid factor = .272165526975904
 [1 0 1]: fai = 35.2643896827548 deg, Schmid factor = .272165526975904

シュミット因子が 0.2722 となるすべり系は上のおりであり、テイラー因子は $M_{111} = 3.674$ となります。

引張軸が[001]方位と[111]方位のときのシュミット因子の平均を取ると $\bar{M} = 3.062$ で、多結晶の場合の値とよく合います。また授業で述べたように、これらの方位の単結晶では変形初期から多重すべりとなりその応力-ひずみ曲線は、結晶粒径が大きい多結晶とよく似ています。

引張軸が[145]のとき。

Tensile axis direction = [1 4 5]
 (1 1 1): theta = 27.0171232178502 deg
 [-1 0 1]: fai = 64.1233099391722 deg, Schmid factor = .388807895679873
 [-1 1 0]: fai = 70.8933946491306 deg, Schmid factor = .291605921759906
 [0 -1 1]: fai = 83.7360472800726 deg, Schmid factor = 9.72019739199695E-2
 (1 -1 -1): theta = 135.454747506002 deg
 [-1 -1 0]: fai = 123.061896134725 deg, Schmid factor = .38880789567987
 [-1 0 -1]: fai = 130.893394649131 deg, Schmid factor = .466569474815841
 [0 1 -1]: fai = 96.2639527199272 deg, Schmid factor = 7.77615791359731E-2
 (1 -1 1): theta = 79.7365721080066 deg
 [-1 0 1]: fai = 64.1233099391722 deg, Schmid factor = 7.77615791359739E-2
 [0 1 1]: fai = 10.8933946491309 deg, Schmid factor = .17496355305594
 [1 1 0]: fai = 56.9381038652754 deg, Schmid factor = 9.72019739199665E-2
 (1 1 -1): theta = 90.0000000000002 deg

上の計算結果より、シュミット因子が大きい順にすべり系を5つ並べると、 $[\bar{1}0\bar{1}](1\bar{1}\bar{1})$ の 0.4666、 $[\bar{1}\bar{1}0](1\bar{1}\bar{1})$ と $[\bar{1}01](111)$ の 0.3888、 $[\bar{1}10](111)$ の 0.2916、 $[011](1\bar{1}1)$ の 0.1750 です。これらのシュミット因子の平均は 0.3422 であり、この逆数とテイラー因子とすれば、 $M_{145} = 2.923$ となります。

この計算は、 $\frac{1}{M_{145}} = \frac{1}{5} \sum_{i=1}^5 \frac{1}{M_i}$ を実行していることとなります。