

結晶配向性を有する多結晶体の弾性率から 単結晶弾性率を決定する方法の構築

多根正和*

1. はじめに

弾性特性は、構造材料、機能材料および生体材料において最も基本的な力学特性である⁽¹⁾⁽²⁾。特に、単結晶の弾性特性は、材料設計だけではなく、有限要素法等を用いたモデル計算⁽³⁾や Phase-field 法を用いた組織形成シミュレーション等⁽⁴⁾の計算機シミュレーションおよびモデリングにおいても必要とされる物性値である。さらに、単結晶の弾性特性は X 線および中性子回折を用いて実施される、応力負荷時の格子ひずみ測定を用いた塑性変形の解析においても用いられている⁽⁵⁾。

このように単結晶の弾性特性は材料科学において極めて重要な物理特性であるにもかかわらず、多くの材料種において明らかとなっていない。その理由として、単結晶育成が困難なことが挙げられる(単結晶の育成に要する実験的な労力もその一因であるだろう)。単結晶弾性率の測定に、一般的な測定法である超音波パルスエコー法や超音波共鳴法を用いる場合、通常は数 mm 角程度の単結晶試料が必要である⁽⁶⁾⁽⁷⁾。しかし、多くの材料種においてそのような単結晶を育成することは困難である。例えば、Mg 合金においては、単結晶育成の困難さのため、多くの組成や結晶相において単結晶弾性率が明らかにされていない。

単結晶育成の困難さを回避するため、微細結晶で構成された多結晶試料を利用して、単結晶の弾性率を求めるためのいくつかの手法がこれまでに提案されている。最もよく知られている手法は、X 線、中性子線、および放射光施設を用いる方法である。この方法では、多結晶試料に対して応力負荷を行い、構成している結晶粒の複数の結晶面の格子ひずみを測定し、それを解析することによって、単結晶弾性率を決定する⁽⁸⁾。そのため、精度の良い測定を行うために、中性子線

もしくは放射光施設の利用がなされている。この手法は、主に立方晶系単結晶の弾性率の推定に利用されており、結晶の対称性が低く独立な弾性スティフネスの数が多い他の結晶系に対する適用例は少ない。これらの点は手法の汎用性を考える上で重要である。最近では、ナノインデンテーション法、結晶方位分布解析および有限要素解析を組み合わせることによって、多結晶を構成している複数の結晶粒の荷重-変位曲線を調べることにより、単結晶弾性率を推定する方法も提案されている⁽⁹⁾。この方法も、立方晶系の単結晶に対して適用されているが、他の結晶系には適用例がない。さらに、結晶粒毎の荷重-変位曲線の測定が必要であるため、ナノスケールの結晶で構成された多結晶体への適用は不向きである。このことも、手法の汎用性を考える上で重要である。先に述べた 2 つの手法は、応力負荷(変形)時の結晶粒内のひずみを直接的に測定することによって単結晶弾性率を決定するというアイデアに基づいている。

著者は、これまでの研究において、従来法とは異なる単結晶弾性率の決定手法として、結晶配向性を有する多結晶体の巨視的(平均的な)弾性率の測定と多結晶を構成している結晶粒の結晶配向分布の解析により、単結晶弾性率を決定するという新規な手法を提案している。この方法は、多結晶体の巨視的な弾性特性(応力-ひずみ関係)から、それを構成している単結晶の弾性特性を求めるため、結晶の粒内ひずみ測定をベースとした従来法とは異なるアイデアに基づいている。新規に提案した手法は、多結晶の弾性率から単結晶弾性率を解析する方法の違いに起因して、inverse Voigt-Reuss-Hill (iVRH) 近似⁽¹⁰⁾および inverse Self-consistent (iSC) 近似⁽¹¹⁾と名付けられている。これまでに、これらの手法を用いて、単結晶育成が困難なため単結晶弾性率が決定されなかった Mg-Zn-Y 合金の長周期積層型規則 (LPSO) 相⁽¹⁰⁾⁽¹²⁾、純 Ti の ω 相⁽¹³⁾ および AZ31Mg 合金⁽¹¹⁾ の単結晶の弾性特性を

* 大阪大学産業科学研究所; 准教授(〒567-0047 茨木市美穂ヶ丘 8-1)

Extraction of Single-crystalline Elastic Constants from Polycrystalline Samples with Crystallographic Texture; Masakazu Tane (The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, Ibaraki)

Keywords: *elastic properties, single crystal, crystallographic texture, micromechanics, polycrystal*

2017年6月23日受理[doi:10.2320/materia.56.541]

明らかにしてきた。本稿では、考案した iVRH 近似および iSC 近似について紹介する。

2. inverse Voigt–Reuss–Hill 近似

多結晶体の弾性率から単結晶弾性率を決定するための手法である iVRH 近似を説明するにあたり、まず初めに、単結晶弾性率から多結晶弾性率を推定する方法について説明する。単結晶の全ての独立な弾性スティフネスの成分が既知であれば、それらの値と多結晶体を構成する結晶の配向分布の情報から、多結晶体の巨視的な弾性スティフネスを計算することができる。この計算のための最も簡便な手法は Voigt–Reuss–Hill (VRH) 近似である。iVRH 近似は VRH 近似をベースとして構築された手法であり、VRH 近似とは逆に多結晶体の弾性スティフネスから単結晶の弾性スティフネスを推定することができる。

次に、iVRH 近似のベースとなる Voigt 近似の詳細について説明する。応力負荷により、多結晶体を構成する結晶粒に均一なひずみが発生すると仮定すると、多結晶体の巨視的な弾性スティフネステンソル $C_{ijkl}^{pc(V)}$ は、単結晶の弾性スティフネスと結晶配向分布 $f(\alpha, \beta, \phi)$ を用いて、次式で与えられる (14)–(16)：

$$C_{ijkl}^{pc(V)} = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha, \beta, \phi) C_{ijkl}^{sc'}(\alpha, \beta, \phi) \sin \alpha \, d\alpha d\beta d\phi \quad (1)$$

ここで、 $C_{ijkl}^{sc'}(\alpha, \beta, \phi)$ は結晶粒の座標系 \mathbf{x}' と単結晶の座標系 \mathbf{x} との間のオイラー角 α, β および ϕ により、単結晶の弾性スティフネス C_{ijkl}^{sc} を結晶粒の座標系に座標変換した結晶粒 (単結晶) の弾性スティフネスである。オイラー角の N 極は多結晶座標の x_3 軸方向である。式 (1) における結晶配向分布 $f(\alpha, \beta, \phi)$ には次式が成立する。

$$\frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha, \beta, \phi) \sin \alpha \, d\alpha d\beta d\phi = 1 \quad (2)$$

式 (1) は多結晶の弾性スティフネス $C_{ijkl}^{pc(V)}$ が単結晶の弾性スティフネス C_{ijkl}^{sc} の線形結合で表されることを意味する。

inverse Voigt (iVoigt) 近似は、多結晶の弾性スティフネス $C_{ijkl}^{pc(\text{meas})}$ と結晶配向分布 $f(\alpha, \beta, \phi)$ が既知である場合 (実測されている場合)、式 (1) に基づいて未知数である単結晶の弾性スティフネス C_{ijkl}^{sc} を決定する方法である。この方法では、多結晶の弾性スティフネス $C_{ijkl}^{pc(V)}$ が、多結晶の弾性スティフネスの実験値 $C_{ijkl}^{pc(\text{meas})}$ と一致するように未知数である単結晶の弾性スティフネス C_{ijkl}^{sc} を決定する。多結晶と単結晶が共に六方晶系の弾性対称性を示す場合、すなわち、多結晶の弾性スティフネス $C_{ijkl}^{pc(V)}$ と単結晶の弾性スティフネス C_{ijkl}^{sc} の独立な成分の数が等しい場合、式 (1) に $C_{ijkl}^{pc(V)} = C_{ijkl}^{pc(\text{meas})}$ を代入することによって得られる連立方程式を解くことにより、 C_{ijkl}^{sc} を求めることができる (10) (12)。一方、多結晶の独立な弾性スティフネスの数が単結晶の弾性スティフネスの数よりも大きい場合、単結晶の弾性スティフネスは以下に示すような逆問題を解くことによって決定される。

一例として、立方晶系の単結晶によって構成され、柱状晶

組織等によって巨視的に六方晶の弾性対称性を有する多結晶の弾性スティフネスから、単結晶の弾性スティフネスを決定する場合について考える。この場合、式 (1) の多結晶の弾性スティフネス $C_{ijkl}^{pc(V)}$ は次式で与えられる (11)。

$$C_{ijkl}^{pc(V)} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} f'(\alpha) C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \quad (3)$$

ここで、 $f'(\alpha)$ は軸対称の繊維状集合組織 (fiber texture) における結晶配向分布であり、

$$f'(\alpha) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha, \beta, \phi) \, d\phi d\beta \quad (4)$$

で与えられる。 $C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha)$ は、単一のオイラー角 α を有する結晶粒で構成され、巨視的に六方晶系の弾性対称性を示す多結晶の弾性スティフネスである。

$$C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} C_{ijkl}^{sc'}(\alpha, \beta, \phi) \, d\phi d\beta \quad (5)$$

単一のオイラー角 α を有する多結晶の弾性スティフネス $C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha)$ に注目した場合、式 (5) は立方晶系単結晶の C_{ijkl}^{sc} と $C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha)$ の行列表記からなる $\mathbf{c}^{sc} = (c_{11}^{sc}, c_{12}^{sc}, c_{44}^{sc})^T$ および $\mathbf{c}^{fb(V)} = (c_{11}^{fb(V)}, c_{33}^{fb(V)}, c_{12}^{fb(V)}, c_{13}^{fb(V)}, c_{44}^{fb(V)})^T$ を用いて次式で表される。

$$\mathbf{c}^{fb(V)} = \mathbf{M}_V(\alpha) \mathbf{c}^{sc} \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{M}_V(\alpha)$ は、 α を変数とする 5×3 行列である (11)。

配向角 α に分布が存在する場合、多結晶の弾性スティフネス $\mathbf{c}^{pc(V)}$ は次式で与えられる。

$$\mathbf{c}^{pc(V)} = \overline{\mathbf{M}}_V \mathbf{c}^{sc} \quad (7)$$

$$\overline{\mathbf{M}}_V = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{M}_V(\alpha) f'(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \quad (8)$$

ここで、式 (7) は式 (3) に対応している。

iVoigt 近似では、単結晶の弾性スティフネス \mathbf{c}^{sc} を未知数として計算される多結晶の弾性スティフネス $c_{ij}^{pc(V)}$ と多結晶の弾性スティフネスの実験値 $c_{ij}^{pc(\text{meas})}$ との差

$$F_{sc}(c_{11}^{sc(V)}, c_{12}^{sc(V)}, c_{44}^{sc(V)}) = \sum_{ij=11,22,\dots,66} \left\{ \frac{c_{ij}^{pc(V)} - c_{ij}^{pc(\text{meas})}}{c_{ij}^{pc(\text{meas})}} \right\}^2 \quad (9)$$

を最小化する \mathbf{c}^{sc} を決定する。ここで、総和 (summation) は斜方晶系弾性体の 9 個の独立な弾性スティフネスに適用される。

Reuss 近似では、六方晶系の弾性対称性を有する多結晶の弾性コンプライアンス $\mathbf{s}^{pc(R)}$ は、立方晶系の弾性コンプライアンス $\mathbf{s}^{sc(R)} (= \mathbf{s}_{ij}^{sc(R)})$ を用いて次式で与えられる (17)。

$$\mathbf{s}^{pc(R)} = \overline{\mathbf{M}}_R \mathbf{s}^{sc(R)} \quad (10)$$

$$\overline{\mathbf{M}}_R = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{M}_R(\alpha) f'(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \quad (11)$$

ここで、 $\overline{\mathbf{M}}_R$ は α を変数とする 5×3 行列である (11)。inverse Reuss (iReuss) 近似では、iVoigt 近似の場合と同様に、Reuss 近似によって得られる多結晶の弾性スティフネス $c_{ij}^{pc(R)} (= \{s_{ij}^{pc(R)}\}^{-1})$ と多結晶の弾性スティフネスの実験値 $c_{ij}^{pc(\text{meas})}$ との差が最小となるように、立方晶系単結晶の弾性スティフネス $c_{ij}^{sc(R)} (= \{s_{ij}^{sc(R)}\}^{-1})$ を決定する。

VRH 近似においては、多結晶の弾性率は Voigt 近似と Reuss 近似の平均値によって与えられる (14)。iVRH 近似に

においても，単結晶の弾性スティフネスは iVoigt 近似と iReuss 近似の平均値で与えられる⁽¹¹⁾．

$$c_{ij}^{\text{sc(H)}} = \frac{c_{ij}^{\text{sc(V)}} + c_{ij}^{\text{sc(R)}}}{2} \quad (12)$$

3. inverse Self-consistent 近似

まず，単結晶弾性率から多結晶弾性率を計算する方法である Self-consistent 近似を説明し，次に多結晶弾性率から単結晶弾性率を決定するための iSC 近似について説明する．

有効媒体近似⁽¹⁸⁾と Eshelby の介在物理論⁽¹⁹⁾に基づいた Self-consistent 近似では，多結晶の弾性スティフネスの行列表記 (\mathbf{c}^{pc}) は次式で与えられる⁽²⁰⁾⁻⁽²²⁾．

$$\mathbf{c}^{\text{pc}} = \langle \mathbf{c}^{\text{sc}(i)} \mathbf{A}^{(i)} \rangle \langle \mathbf{A}^{(i)} \rangle^{-1} \quad (13)$$

ここで， $\mathbf{A}^{(i)}$ は $\bar{\mathbf{e}}^{\text{sc}(i)} = \mathbf{A}^{(i)} \bar{\mathbf{e}}^{\text{pc}}$ で定義されるひずみ集中係数である． $\bar{\mathbf{e}}^{\text{pc}}$ は多結晶体の平均ひずみであり， $\bar{\mathbf{e}}^{\text{sc}(i)}$ は結晶粒内のひずみである． $\mathbf{c}^{\text{sc}(i)}$ は単結晶の弾性スティフネス \mathbf{c}^{sc} をオイラー角 α, β および ϕ によって結晶粒の座標系に座標変換した結晶粒 (単結晶) の弾性スティフネスである．Eshelby の等価介在物理論⁽¹⁹⁾により，ひずみ集中係数は次式で与えられる．

$$\mathbf{A}^{(i)} = [\mathbf{I} + \mathbf{S}^{(i)} (\mathbf{c}^{\text{pc}})^{-1} (\mathbf{c}^{\text{sc}(i)} - \mathbf{c}^{\text{pc}})]^{-1} \quad (14)$$

ここで， \mathbf{I} は単位行列であり， $\mathbf{S}^{(i)}$ は多結晶の弾性スティフネス \mathbf{c}^{pc} と結晶粒の形状に依存する Eshelby テンソル⁽¹⁶⁾⁽²³⁾ の行列表記である． $\langle \mathbf{X} \rangle$ は多結晶を構成する結晶粒の結晶配向分布 $f(\alpha, \beta, \phi)$ を考慮した行列 \mathbf{X} の配向平均である．多結晶の弾性スティフネス \mathbf{c}^{pc} を得るためには，Self-consistent 計算によって式(13)および式(14)を満足する \mathbf{c}^{pc} を決定する．

Self-consistent 近似においては，多結晶内の結晶粒は楕円体として近似され，多結晶の弾性スティフネスと等価な弾性スティフネスを有する均質な媒体に埋め込まれる．このようなモデルに対して，式(14)におけるひずみ集中係数 $\mathbf{A}^{(i)}$ を計算することにより，結晶粒の結晶配向性，弾性異方性および形状を反映した結晶粒間の弾性相互作用を考慮することができる．この点は，結晶粒間の弾性相互作用の影響を直接的に考慮しない VRH 近似と比較して優れている．

iSC 近似においては，式(13)において計算された多結晶の弾性スティフネス c_{ij}^{pc} とその実験値 $c_{ij}^{\text{pc(meas)}}$ との差を最小化するように，単結晶の弾性スティフネス \mathbf{c}^{sc} を決定する．iSC 近似および iVRH 近似を用いて，単結晶の弾性スティフネスを決定するためには，多結晶の独立な弾性スティフネスの数が単結晶の独立な弾性スティフネスの数と等しいか，それより大きい必要がある．

4. inverse Voigt-Reuss-Hill および inverse self-consistent 近似の精度検証

(1) 柱状晶組織を有する多結晶銅

単結晶弾性率が既知である純銅単結晶 (立方晶系) を対象として，iVRH および iSC 近似の単結晶弾性率の決定精度を検証する．また，純銅は比較的強い弾性異方性を示すことが知

られていることから，その弾性異方性が単結晶弾性率の決定精度に及ぼす影響についても考察する．

図 1 に iVRH および iSC 近似を適用する，一方向凝固によって作製された柱状晶組織を有する多結晶銅の光学顕微鏡観察写真を示す．図 1(a) および (b) はそれぞれ，多結晶銅の凝固方向に垂直および平行な断面の観察写真である．結晶粒は凝固方向に伸長しており，一方向凝固により柱状晶組織が形成されていることがわかる．また，X 線極点図を用いた解析により，凝固方向に結晶の $\langle 100 \rangle$ が強く配向し，凝固方向に垂直な方向への結晶配向はほぼランダムであることが明らかとなった⁽¹¹⁾．このような集合組織を反映し，巨視的にはおおそ六方晶系の弾性対称性を有する多結晶銅試料の全ての独立な弾性スティフネスを超音波共鳴法と電磁超音波共鳴法を組み合わせた手法⁽²⁴⁾を用いて測定した．得られた弾性スティフネスと X 線極点図の情報に基づき，iVRH および iSC 近似を用いて単結晶銅の弾性スティフネスを求めた⁽¹¹⁾．

図 2 (a) に iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶銅の弾性スティフネス c_{11} を示す．iSC 近似においては，多結晶内の銅結晶粒の形状を，アスペクト比 a_3/a_1 を 1, 2, 3, 5, 10, もしくは ∞ とする回転楕円体に近似した．プロットおよびエラーバーはそれぞれ 11 個の測定値から得られた平均値と標準偏差を表す．比較として，単結晶銅試料を用いて直接的に得られた弾性スティフネスの文献値 (Ref. 25) と iVoigt 近似および iReuss 近似によって得られた弾性スティフネスを示す．iSC 近似によって得られた c_{11} は，アスペクト比 a_3/a_1 の増加に伴って増加し，文献値との差はアスペクト比 ∞ を仮定した場合に最も小さい． c_{12} においても，図 2(b) に示すように，文献値 (Ref.) と iSC 近似との差は a_3/a_1 の増加に伴って減少する．これは，図 1 に示す多結晶銅の結晶粒の形状に対応したアスペクト比において，最も精度良く弾性スティフネスを決定可能であることを意味する．図 2(c) に示すように， c_{44} における文献値 (Ref.) と iSC 近似との差は a_3/a_1 に依存せず非常に小さい．ここで，iVRH 近似に着目すると，図 2(a)-(c) に示すように，全ての弾性スティフネスの成分において iVRH 近似と文献値と

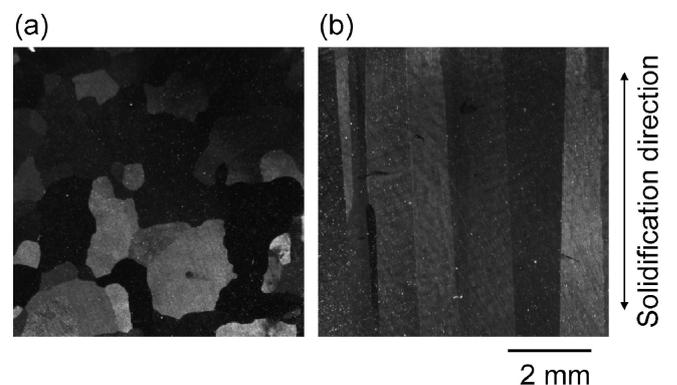


図 1 一方向凝固法によって作製された多結晶銅の微細組織の光学顕微鏡観察写真：凝固方向に (a) 垂直および (b) 平行な断面．(Reprinted from Ref. 11 with permission from Elsevier.)

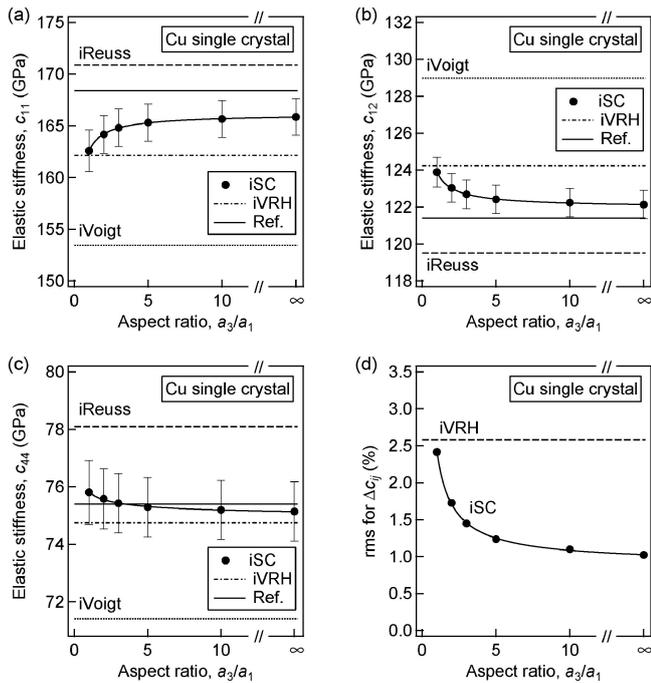


図2 iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶銅の弾性スティフネス: (a) c_{11} , (b) c_{12} および (c) c_{44} . iSC 近似では, 多結晶内の銅結晶粒の形状を, アスペクト比 a_3/a_1 を 1, 2, 3, 5, 10, もしくは ∞ とする回転楕円体に近似した. 比較として, 単結晶銅試料を用いて直接的に測定された弾性スティフネスの文献値 (Ref. 25) と iVoigt 近似および iReuss 近似によって得られた弾性スティフネスを図中に示す. (d) iSC 近似と文献値⁽²⁵⁾の弾性スティフネスの差の二乗平均平方根 (rms) 値および iVRH 近似と文献値の差の rms 値. (Reprinted from Ref. 11 with permission from Elsevier.)

の差は, iSC 近似と文献値との差よりも大きい. これは, 単結晶銅の弾性スティフネスの決定において, iVRH 近似よりも iSC 近似の方が優れていることを意味する. 図 2(d) に iSC 近似および iVRH 近似により得られた単結晶銅の弾性スティフネスと文献値⁽²⁵⁾との差の二乗平均平方根 (rms) 値を示す. iSC 近似における rms 値は, アスペクト比の増加に伴って減少し, すべてのアスペクト比において iVRH 近似の rms 値よりも小さい. これも iSC 近似の優位性を示す結果である. また, iSC 近似において, アスペクト比 ∞ での rms 値は 1% 程度であり, 非常に高い精度で単結晶弾性率を決定可能であることがわかる.

ここで, iSC 近似の優位性について, 単結晶の弾性異方性を反映した多結晶内の弾性不均質性に着目して考察する. 多結晶内の弾性不均質性を評価するにあたり, iVoigt 近似と iReuss 近似との差に着目する. 図 2(a)-(c) に示すように iVoigt 近似と iReuss 近似によって計算される c_{ij} の値の差は, 大きい. Voigt 近似と Reuss 近似との間の差は, 多結晶体内の弾性不均質性の増加に伴って増加する⁽²⁶⁾ ことから, iVoigt 近似と iReuss 近似との差は多結晶銅中の弾性不均質性が強いことを意味している. この弾性不均質性により, 結晶

粒間に強い弾性相互作用が働く. このため, 多結晶銅の弾性スティフネスは結晶粒の形状に影響を受け, 結果的に, 結晶粒のアスペクト比は単結晶の弾性スティフネスの決定に影響を与える. iSC 近似では, このような結晶粒の形状を反映した結晶粒間の弾性相互作用を考慮することができるが, iVRH 近似では, 弾性相互作用は考慮されない. そのため, 単結晶の弾性異方性を反映し, 弾性不均質性の強い多結晶銅に対しては, iVRH 近似と比較して iSC 近似の方が有効である.

(2) 押出加工によって作製された純 Mg 多結晶

iVRH および iSC 近似を押出加工によって作製された純 Mg 多結晶に適用する. ここで, 純 Mg 多結晶においては, 押出方向に垂直な方向に結晶の [0001] 方位が配向し, 巨視的に六方晶系の弾性対称性を示す. また, 結晶粒を回転楕円体に近似した際のアスペクト比は 1.8 程度であり, その長軸はランダムに配向している⁽¹¹⁾. 純 Mg 単結晶は六方晶系の弾性対称性を示し, 比較的弱い弾性異方性を示すという特徴を有しており, この弱い弾性異方性が単結晶弾性率決定に与える影響についても考察する.

iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶 Mg の弾性スティフネス c_{11} を図 3(a) に示す. 比較として, 単結晶 Mg 試料を用いて直接的に測定された弾性スティフネスの文献値 (Ref. 27) と iVoigt 近似および iReuss 近似によって得られた弾性スティフネスを図中に示す. iSC 近似によって得られた c_{11} は, アスペクト比 a_3/a_1 にほとんど依存せず, 全てのアスペクト比において文献値と非常に良く一致する. このことは, 図 3(b) に示すように, c_{66} においても同様であり, アスペクト比の考慮は単結晶弾性率にほとんど影響を与えない. また, iVRH 近似に着目すると, 図 3(a) および (b) に示すように, 2 つの弾性スティフネスの成分において iVRH 近似と文献値との差も非常に小さい.

iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶 Mg の弾性スティフネスと文献値⁽²⁷⁾との差の rms 値を図 3(c) に示す. iSC 近似における rms 値は, アスペクト比にほとんど依存せず, iVRH 近似の rms 値とほぼ同様である. 両近似法の rms 値は 1% 程度であり, 高い精度で単結晶弾性率を決定可能であることがわかる. このように, 単結晶 Mg の場合においては, 多結晶銅の場合とは異なり, iSC 近似と iVRH 近似の間に単結晶弾性率の決定精度に大きな差はない.

純 Mg 単結晶の弾性スティフネスの決定において, iSC 近似と iVRH 近似との差が小さいことに対して, 多結晶 Mg の弾性不均質性に着目して考察する. 図 3(a) および (b) に示すように, 単結晶銅の場合とは異なり, iVoigt 近似と iReuss 近似によって計算される c_{ij} の値の差は, 極めて小さい. これは, 多結晶銅と比較して, 単結晶の弾性異方性に起因した多結晶 Mg 内の弾性不均質性が極めて小さいことを意味している. この弾性的な均質性により, 結晶粒間の弾性相互作用が小さい. このため, iSC 近似において, 結晶粒のアスペクト比は単結晶の弾性率の決定に影響を与えない. このように, 単結晶の弾性異方性が弱く, 多結晶の弾性不均質性が小さい多結晶においては, iSC 近似よりも計算が簡便な

