Note

Young's Modulus of Single Crystalline Iron and Elastic Stiffness

Setsuo TAKAKI¹⁾, Takuro MASUMURA^{1)*} and Toshihiro TSUCHIYAMA^{1,2)}

1) Research Center for Steel, Kyushu University

2) Department of Materials Science and Engineering, Kyushu University

Abstract: Elastic stiffness c_{11} , c_{12} and c_{44} are key parameters in the analysis of elastic deformation behaviors. In order to determine the values of these parameters, Young's modulus of single crystal; E_{100} , E_{110} and E_{111} are needed as well as Young's modulus E_p and Poisson's ratio ν in poly-crystal. In this paper, the values of Young's modulus in single crystalline iron are summarized and then elastic stiffness was estimated for pure iron under the conditions; $E_p=208.2$ GPa and $\nu=0.291$ that are reliable values for isotropic poly-crystalline iron. As a result, it is found that Young's modulus of single crystalline iron should be as follows: $E_{100}=127.8$ GPa, $E_{110}=214.3$ GPa, $E_{111}=276.6$ GPa. From these values, elastic stiffness of iron is calculated at $c_{11}=228.1$ GPa, $c_{12}=135.0$ GPa, $c_{44}=113.2$ GPa. Diffraction Young's modulus of iron can be estimated on the basis of Kröner model by applying the values of elastic stiffness. It is also confirmed that the average value of diffraction Young's modulus agrees with the value of Young's modulus E_p (208.2 GPa) of ideal poly-crystalline iron.

Keywords: Young's modulus; diffraction Young's modulus; Poisson's ratio; single crystal; elastic stiffness; Kröner model; ideal poly-crystal; iron.

Received on Dec. 16, 2019 ; Accepted on Mar. 25, 2020

* Corresponding author. E-mail : masumura@zaiko.kyushu-u.ac.jp, Address : Kyushu University, 744 Motoooka Nishi-ku Fukuoka 819-0395

単結晶鉄におけるヤング率と弾性スティフネス

高木 節雄¹⁾・増村 拓朗^{1)*}・土山 聡宏^{1,2)}

Young's Modulus of Single Crystalline Iron and Elastic Stiffness
Setsuo TAKAKI, Takuro MASUMURA and Toshihiro TSUCHIYAMA

1. 緒言

金属材料における弾性スティフネス c_{11} , c_{12} , c_{44} は、弾性変形に関連した様々な現象を解析するうえで重要なパラメーターである。とくに、X線や中性子線による回折データを用いて転位解析を行う modified Williamson-Hall 法¹⁾においては、転位のらせん成分を求めるうえでこれらのデータは不可欠である²⁾。 c_{11} , c_{12} , c_{44} の値を求めるための具体的な方法については後述するが、これらの値を求めるためには、多結晶体のヤング率とポアソン比に加えて、単結晶のヤング率 (E_{100} , E_{110} , E_{111}) が分かっている必要はない。凝固温度から室温まで相変態のない金属については比較的容易に単結晶が得られ、これらの値を実験的に求めることができるが、凝固後の冷却中に固相変態が起こる鉄については単結晶のヤング率を求めることは容易ではない。実際には、集合組織を有する材料の結晶方位分布とヤング率の関係に基づいて見積もる方法^{3,4)}、あるいは中性子回折等の方法で得られた回折ヤング率から見積もる方法⁵⁾などがある。これらの方法で得られた単結晶のヤング率を Table 1 に示している。単結晶のヤング率は、 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ の順に大きくなる傾向にあるが、それぞれの値については研究者によってわずかに異なっている。

一方で、多結晶体のヤング率 E_p ならびにポアソン比 ν については、Speich らは、それぞれ $E_p = 208.2$ GPa ならびに $\nu = 0.291$ という値を報告している⁶⁾。彼らは、結晶方位分布が完全に等方的な鉄粉と多結晶鉄の回折強度を比較して多結晶鉄の結晶方位分布が等方的であることを確認しており、上記の値は理想的な多結晶鉄の弾性定数を示している

Table 1. Young's modulus (GPa) in single crystalline iron.

	Nagashima ³⁾	Kitagawa ⁴⁾	Hutchings ⁵⁾
E_{100}	132.1	129.5	125.0
E_{110}	220.8	216.5	210.5
E_{111}	284.4	278.9	272.7

と考えて良いであろう。本研究では、多結晶鉄のヤング率とポアソン比についてはこれらの値を採用し、単結晶のヤング率の値が弾性スティフネス c_{ij} に及ぼす影響を調査した。さらに、弾性スティフネス c_{ij} の値を用いて理想多結晶体のヤング率を理論的に求め、 $E_p = 208.2$ GPa となるような正確な単結晶のヤング率を決定することで、これまでに報告されたどのデータが最も妥当であるかを検討した。

2. 単結晶鉄のヤング率と弾性スティフネスの関係

結晶面が $\{hkl\}$ の方位パラメーター Γ は次式で与えられる。

$$\Gamma = (h^2k^2 + k^2l^2 + l^2h^2) / (h^2 + k^2 + l^2)^2 \quad (0 \leq \Gamma \leq 1/3) \quad \dots (1)$$

単結晶のヤング率 E_{hkl} の逆数と Γ の間には Fig.1 に示すような直線関係があり、両者の関係は一般的に次式で表される。

$$1/E_{hkl} [\text{GPa}^{-1}] = a - b \times \Gamma \quad \dots (2)$$

弾性コンプライアンスを s_{11} , s_{12} , s_{44} とした場合、パラメーター a と b については次のような関係が成り立つ。

$$s_{11} = a \quad \dots (3)$$

$$2s_{11} - 2s_{12} - s_{44} = b \quad \dots (4)$$

また、等方多結晶体の圧縮率 κ については、ヤング率 E と

Fig. 1. Relation between orientation parameter Γ and the reciprocal of Young's modulus E_{hkl} in single crystalline iron.

2019年12月16日受付 2020年3月25日受理 (Received on Dec. 16, 2019; Accepted on Mar. 25, 2020)

1) 九州大学鉄鋼リサーチセンター (Research Center for Steel, Kyushu University)

2) 九州大学大学院工学研究院材料工学部門 (Department of Materials Science and Engineering, Kyushu University)

* Corresponding author. E-mail : masumura@zaiko.kyushu-u.ac.jp, Address : Kyushu University, 744 Motoooka Nishi-ku Fukuoka 819-0395

ポアソン比 ν の値が分かっているならば次式で求めることができる。本研究では、ポアソン比はSpeichらが報告した $\nu=0.291$ を用いた。 E については、3章で述べる直接平均化法で求めた等方多結晶体のヤング率 E_{th} を用いた。

$$\kappa = 3(1-2\nu)/E \quad (5)$$

また、 κ と s_{11} , s_{12} の間には次式が成立する。

$$\kappa = 3(s_{11} + 2s_{12}) \quad (6)$$

したがって、式(3), (4), (6)の連立方程式を解くことによって s_{11} , s_{12} , s_{44} の値がすべて求められ、これらの値を用いて次式により弾性スティフネス c_{11} , c_{12} , c_{44} を決定できる。

$$c_{11} = (s_{11} + s_{12}) / (s_{11} - s_{12}) / (s_{11} + 2s_{12}) \quad (7)$$

$$c_{12} = -s_{12} / (s_{11} - s_{12}) / (s_{11} + 2s_{12}) \quad (8)$$

$$c_{44} = 1 / s_{44} \quad (9)$$

Fig.1のデータから得られるパラメーター a と b , ならびに以上のようにして得られた弾性スティフネス c_{11} , c_{12} , c_{44} の値をまとめてTable 2に示す。当然の結果ではあるが、研究者によって単結晶のヤング率の値が異なっているために弾性スティフネスにも差が生じている。

3. 理想多結晶モデルに基づいたヤング率の見積もり

結晶方位が完全に等方的な多結晶体(理想多結晶体)を作製することは容易ではないが、理想的なモデルを構築することは可能である。本研究では、球面座標における分割面積が等しくなるように2040点の結晶方位ベクトルを均等に配置して理想多結晶体モデルとした⁷⁾。2040点の結晶粒についてはすべて方位パラメーター Γ の値は分かっており、その平均値は、結晶方位が完全に等方的な多結晶体の Γ 値(0.200)⁸⁾に一致することを確認している。本稿では、多結晶体における個々の物性値を直接平均化して多結晶体の物性値を求める方法を直接平均化法ということにする。

Table 2. Values of parameter a and b (GPa⁻¹) and elastic stiffness c_{ij} (GPa) in iron.

	a	b	c_{11}	c_{12}	c_{44}
Nagashima	0.00757	0.01215	235.2	138.9	116.3
Kitagawa	0.00772	0.01240	230.6	136.2	114.1
Hutchings	0.00800	0.01300	223.9	132.9	111.6

ポアソン比に関して、多結晶鉄の回折ポアソン比⁵⁾を用いて直接平均化法で得た値は0.292であり⁷⁾、この値はSpeichらが実験的に求めた0.291⁶⁾にほぼ一致している。この結果は、Speichらが使用した多結晶鉄の結晶方位分布がほぼ等方的であったことを示唆している。

多結晶体のヤング率についても、多結晶体を構成する各結晶粒の回折ヤング率 E_{hkl}^* が分かっているならば直接平均化法により理論的な値 E_{th} が求められる⁷⁾。弾性スティフネス c_{11} , c_{12} , c_{44} の値が既知の材料については、Kröner法⁸⁾によって結晶面 $\{hkl\}$ に対応した E_{hkl}^* の値を求めることが可能であり、方位パラメーター Γ と E_{hkl}^* の関係は一般的に次式で表される。

$$1/E_{hkl}^* = a^* - b^* \times \Gamma \quad (10)$$

Kröner法⁸⁾については広く知られているためここでは具体的な解析法は省略するが、Table 2に示した弾性スティフネスの値を用いて得られた a^* と b^* の値ならびに直接平均化法で得られた E_{th} の値をTable 3に示す。ここで注意すべき点は、式(5)において κ の値を決定するためにあらかじめ E の値を入力しなければならないということである。本研究では、 E に様々な値を代入して上記の計算を繰り返し、 $E=E_{th}$ となる条件を見出した。Kitagawaのデータ⁴⁾を用いた場合に208.2 GPaに最も近い値(210.2 GPa)が得られており、この結果は、単結晶鉄のヤング率としてKitagawaが提示した値が最も妥当なことを示している。ここでは、

Fig. 2. Relation between theoretically obtained Young's modulus E_{th} and the values of parameter a and b in Eq.2.

Table 3. Values of parameter a^* and b^* (GPa⁻¹) and theoretically obtained Young's modulus E_{th} (GPa) in iron.

	a^*	b^*	E_{th}
Nagashima	0.005694	0.004966	214.4
Kitagawa	0.005808	0.005067	210.2
Hutchings	0.005983	0.005287	204.7

さらに正確な値を求めるために、理想多結晶鉄のヤング率を208.2 GPaとして、単結晶のヤング率を見積もった。Fig.2にはTable 2およびTable 3に示した a および b と E_{th} の関係を示している。この図より、208.2 GPaのヤング率に対応するパラメーター a と b の値を読み取ると、それぞれ0.007824と0.012627であり、最終的に $E_{100}=127.8$ GPa, $E_{110}=214.3$ GPa, $E_{111}=276.6$ GPaという結果が得られた。これらの値を用いて再度弾性スティフネスの値を計算すると、 $c_{11}=228.1$ GPa, $c_{12}=135.0$ GPa, $c_{44}=113.2$ GPaという結果が得られた。

4. まとめ

理想多結晶鉄のヤング率を208.2 GPa, ポアソン比を0.291として単結晶鉄のヤング率を求めた結果、 $E_{100}=127.8$ GPa, $E_{110}=214.3$ GPa, $E_{111}=276.6$ GPaという値が得られた。これらの値を用いて弾性スティフネスの値を計算すると、 $c_{11}=228.1$ GPa, $c_{12}=135.0$ GPa, $c_{44}=113.2$ GPaという結果が得られた。

謝辞

本研究は、JSPS科研費JP15H05768の支援を受けて行われたものである。なお、研究の一部は、日本鉄鋼協会「鉄鋼のミクロ組織要素と特性の量子線解析研究会」のもとで実施された。

文 献

- 1) T.Ungár and A.Borbély: *Appl. Phys. Lett.*, **69**(1996), 3173.
- 2) T.Ungár, I.Dragomir, Á.Révész and A.Borbély: *J. Appl. Crystallogr.*, **32**(1999), 992.
- 3) 長島晋一：多結晶の結晶方位分布の制御と材料特性，日本金属学会，仙台，(1992)，41.
- 4) H.Kitagawa: *J. Soc. Mater. Sci., Jpn.*, **29**(1980), 691 (in Japanese).
- 5) M.T.Hutchings, P.J.Withers, T.M.Holden and T.Lorentzen: Introduction to the characterization of residual stress by neutron diffraction, CRC Press, Taylor & Francis, Oxford, (2005), 229.
- 6) G.R.Speich, A.J.Schwoeble and W.C.Leslie: *Metall. Trans.*, **3**(1972), 2031.
- 7) S.Takaki, T.Masumura and T.Tsuchiyama: *J. Soc. Mater. Sci., Jpn.*, **69**(2020), 657 (in Japanese).
- 8) 田中啓介，鈴木賢治，秋庭義明：残留応力のX線解析，養賢堂，東京，(2006)，275.