

## 결정의 슬립을 고려한 금속의 미시적 소성변형거동 해석(I)

김 정석\*, 정 기조\*\*, 김 영석\*

\* 경북대학교 기계공학부

\*\* 포항제철소 기술연구소

### Analysis of microscopic plastic behaviors of metals considering slip deformation of crystals(I)

Jungsuk Kim, Keecho Chung, and Youngsuk Kim

#### Abstract

Finite element calculations are performed for crystalline solids subjected to plane strain tensile loading. Using Asaro's double slip model, shearband developments in single crystals are analyzed. The effect of various rate sensitivities and latent hardening parameters on microscopic plastic behavior was clarified. Moreover the deformation behavior of polycrystals which have grain boundaries was compared to that of single crystals.

#### 1. 서론

금속재료는 그 자신의 변형한계를 넘어 과도한 소성변형을 받으면 소성불안정 현상이 발생하고 결국에는 좁은 영역에 변형이 집중하는 전단띠(shear band)가 발생하여 파단에 이르게 된다. 따라서, 이와 같은 소성불안정이 발생한 후의 파괴거동을 각종 부품의 가공전에 예측하고 그 원인을 명확히 하여 대책을 세우기 위해서는 금속재료의 소성변형 현상을 거시적으로 뿐만아니라, 미시적으로도 평가하는 것이 중요하다.

최근 금속의 기계적 특성을 미시적인 관점에서 해석하려는 연구가 활발히 이루어지고 있는데, Asaro<sup>[1]</sup>는 이상적인 평면 2슬립계를 가지는 단결정체에 대한 해석으로 전단띠 형성을 연구했다. 이후에 Peirce 등<sup>[7]</sup>은 이 모델에 대한 평면변형 인장해석을 통해 수치적으로 변형국소화(deformation localization)현상을 기술하였다. 국내에서는 이 동영 등<sup>[11][12]</sup>이 알루미늄 판재의 압연공정 해석과 평면변형 압축해석을 통해 집합조직의 변화를 연구한바 있다.

본 연구에서는 결정체(crystalline solid)를 대상으로 Asaro의 2중 슬립 결정모델로부터 재료의 거시적인 탄소성 변형거동을 묘사할 수 있는 양형의 대변형 탄소성 유한요소해석 프로그램을 개발하여 평면변형인장하에서 재료의 변형속도 민감도 및 잠재경화 특성이 재료의 미시적 소성변형에 미치는 영향을 고찰한다. 또한 본 해석기술을 결정입계변형을 갖는 간단한 다결정체 모델에 적용하여 단결정체와 다결정체의 변형거동의 차이를 검토하였다.

#### 2. 기초이론

##### 2-1. 결정소성이론에 의한 구성식

결정의 변형에 대한 변형구배는 다음과 같이 표현된다.

$$F = F^* \cdot F^P \quad (2-1)$$

여기서  $F^*$ 와  $F^P$ 는 각각 Fig. 1과 같이 결정격자의 신장과 회전에 의한 변형구배와 슬립계에 따른 소성전단변형에 의한 변형구배이다. 결정의 슬립계는 슬립방향의 단위벡터  $s_o^{(a)}$ 와 슬립면에 수직한 단위벡터  $m_o^{(a)}$ 로 정의된다. 결정이 변형됨에 따라 결정격자를 구성하는 벡터  $s^{(a)}$ 와  $m^{(a)}$ 는 변형되고 회전한다. 이 변형과 회전은 탄성변형구배  $F^*$ 에 의해 발생되고 변형 후의 이들 벡터들은 다음과 같이 정의된다.

$$s^{*(a)} = F^* \cdot s_o^{(a)}, \quad m^{*(a)} = m_o^{(a)} \cdot (F^*)^{-1} \quad (2-2)$$

현재의 변형상태에서의 속도구배  $L$ 은

$$L = F^* \cdot F^{-1} = \dot{F}^* \cdot (F^*)^{-1} + F^* \cdot \dot{F}^P \cdot (F^P)^{-1} \cdot (F^*)^{-1} \quad (2-3)$$

이 되고, 이 속도구배는 변형속도텐서  $D$ 와 회전텐서  $\Omega$ 를 이용해 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$L = D + \Omega \quad (2-4)$$

$$D = D^* + D^P, \quad \Omega = \Omega^* + \Omega^P \quad (2-5)$$

$s^{*(a)}$ 와  $m^{*(a)}$ 로 정의되는 현재상태의 소성변형은 슬립계의 전단에 의해서만 발생된다고 생각하고, 각 슬립계에 대한 대칭텐서와 반대칭텐서를 다음과 같이 정의한다.

$$P^{(a)} = \frac{1}{2} (s^{*(a)} m^{*(a)} + m^{*(a)} s^{*(a)}), \quad W^{(a)} = \frac{1}{2} (s^{*(a)} m^{*(a)} - m^{*(a)} s^{*(a)}) \quad (2-6)$$

식 (2-3)와 식(2-5)로부터,

$$L^P = D^P + \Omega^P = F^* \cdot \dot{F}^P \cdot (F^P)^{-1} \cdot (F^*)^{-1} \quad (2-7)$$

이고,  $\dot{\gamma}^{(a)}$ 를 각 슬립계에서의 전단속도라 하면,

$$D^P + \Omega^P = \sum_a \dot{\gamma}^{(a)} s^{*(a)} m^{*(a)} \quad (2-8)$$

$$D^P = \sum_a \dot{\gamma}^{(a)} P^{(a)}, \quad \Omega^P = \sum_a \dot{\gamma}^{(a)} W^{(a)} \quad (2-9)$$

이 된다.

결정의 탄성변형을 속도형으로 표현하고, 위식들을 이용해 유도한 구성식<sup>[2]</sup>은 다음과 같이 나타내진다.

$$\tau^\nabla = L : D - \sum_a \dot{\gamma}^{(a)} R^{(a)} \quad (2-10)$$

$$R^{(a)} = L : P^{(a)} + \beta^{(a)} \quad (2-11)$$

$$\beta^{(a)} = W^{(a)} \cdot \tau - \tau \cdot W^{(a)} \quad (2-12)$$

여기서,  $\tau^\nabla$ 는 Kirchhoff응력의 Jaumann derivative이다.

한편, 전단변형을 속도  $\dot{\gamma}^{(a)}$ 에 대한 구성식으로서 Pan and Rice<sup>[6]</sup>과 Peirce 등<sup>[5]</sup>이 사용한 다음의 지수법칙을 이용한다.

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{a}^{(a)} \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{1/m-1} \quad (2-13)$$

여기서,  $g^{(a)}$ 는 각 결정의 현재 변형경화상태를 나타내는 전 슬립량의 함수로서, 그에 관한 발전 방정식은 다음과 같다.<sup>[7]</sup>

$$\dot{g}^{(a)} = \sum_{\beta} h_{a\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (2-14)$$

$$h_{a\beta} = qh(\gamma) + (1 - q)h(\gamma)\delta_{a\beta} \quad (2-15)$$

$$h(\gamma) = h_o \sec h^2 \left( \frac{h_o \gamma}{\tau_s - \tau_o} \right) \quad (2-16)$$

여기서  $q$ 는 경화지수로서 자기경화( self hardening)에 대한 잠재경화(latent hardening)의 비율을 나타내며,  $h_o$ 는 초기경화를,  $\tau_s$ 는 포화응력,  $\tau_o$ 는  $g^{(a)}(0)$ 의 값을 각각 나타낸다.

## 2-2 유한요소 정식화

이상의 기초이론을 바탕으로 Fig. 2와 같은 Asaro의 2중슬립 모델을 이용해서 대변형유한요소 해석을 수행할 때 수치해석의 안정화 및 효율의 향상을 위해, 점선계수법<sup>[7]</sup>을 도입한 후 식 (2-9), (2-10), (2-13) 및 식 (2-16)을 이용해 정리하면, 다음 식<sup>[8]</sup>이 얻어진다.

$$\tau^{\nabla} = C:D - \sum_a R^{(a)} f^{(a)} \quad (2-17)$$

$$C = L - \sum_a R^{(a)} F^{(a)} \quad (2-18)$$

위에서 얻어진 방정식들을 탄소성 대변형 유한요소 방정식에 대입하고 Updated Lagrange법을 적용하면 다음의 유한요소 방정식을 얻을 수 있다.

$$[K] \{v_N\} = \{f\} + \{g\} \quad (2-19)$$

$$[K] = \int_V \{ [B]^T ([C] - [F]) [B] + [E]^T [Q] [E] \} dV \quad (2-20)$$

$$\{f\} = \int_{S_i} [\phi]^T \{P\} dS \quad (2-21)$$

$$\{g\} = \int_V \sum_a f^{(a)} [B]^T [R^{(a)}] dV \quad (2-22)$$

## 3. 해석 모델

Araro의 결정소성이론에 대한 구성식 식 (2-18)를 이용해서 FCC금속을 대상으로 평면변형 인장을 수치적으로 해석하기위해 단결정 모델의 경우 유한요소를 각각의 단결정으로 간주하고 동일한 슬립방향을 부여했다. 따라서 단결정체는 집합조직으로인해 이방성이 심한 재료로 취급된다. 다결정의 경우는 몇 개의 유한 요소로 1개의 결정립을 구성하고 각 결정립을 이루는 요소에는 같은 슬립 방향을 부여하고, 결정립 마다 다른 슬립방향을 부여했다. 이 때 임의성을 위해 난수를 발생시켜 초기 슬립방향을 부여하였다. 요소는 4각형의 대각선을 4개의 삼각형으로 분할한 crossed triangle요소를 사용했다. Tabel.1은 수치해석에 사용된 재료상수들이고 ,단결정모델은 변형의 대칭성으로 인하여 1/4모델을 고려하였다. Fig. 3과 Fig. 4는 각각 단결정 및 다결정 모델을 나타낸다.

#### 4. 해석 결과

결정소성이론으로부터 유도된 구성식을 바탕으로 유한요소법을 적용해서 결정체의 변형국소화 현상을 시뮬레이션하고, 변형률속도 민감도 및 잠재 경화지수의 영향을 고찰했다. 이 때 단결정의 경우는 자연스런 국부neck 발생을 유도하기위해 자유표면에 초기두께결함을 부여했다.

Fig. 5는 국소화를 지연시키는 변형률속도 민감도의 영향을 나타내고 있다. 다른 변형률속도 민감도  $m$ 에 대해서 구한 무차원화된 하중-변위곡선들은 최대하중까지는 동일한 것을 알 수 있다. 곡선 I( $m=0.0005$ )는 변형률속도 민감도가 아주 작아 구성식을 변형률속도 독립형으로 간주해도 될 재료에 대한 것으로서, 최대하중이 지나자마자 급격한 하중 감소현상이 생기고 전단띠가 형성된다. 이 전단띠는 작은량의 변위가 증가되더라도 충분히 발전한다. 작은 변형률속도 민감도  $m = 0.0005$ 일 때의 곡선 II는 곡선 I에 비해 전단띠 형성은 지연되나, Fig. 6에서 보이는 것처럼 현상학적인 전단띠의 발전은 곡선 I와 같다. 곡선 III의 경우는 전단띠의 생성이 보이지 않는다. 즉, 변형률속도 민감도  $m$ 이 클수록 전단띠 발생을 지연하는 경향이 있음을 잘 나타내고 있다. 이중 곡선 II는 Chang and Asaro<sup>[3]</sup>가 수행한 대칭의 슬립방향을 가지는 알루미늄 합금결정에 대한 실험으로 얻어진 하중-변위곡선과 정량적으로나 정성적으로 잘 일치하고 있다. Fig. 7은 인장에 따른 슬립 방향의 회전을 나타내는 것으로 그림으로부터 전단띠가 발생한 두 경우에 대해서 전단띠가 모두 인장축으로부터 약  $40^\circ$  정도 기울어 발생한 것을 알 수 있다. 더욱이, 두 경우 모두 전단띠를 가로지르는 방향변화는  $5\sim 7^\circ$  정도으로써, Lemonds 등<sup>[9]</sup>이 등방경화재료( $q=1.0$ )에 대해 해석한 것보다 좀 크게 나타났다. 이것은 잠재경화지수  $q$ 의 영향인 것으로 보이고, 등방경화재료에 대한 해석은 Lemonds 등<sup>[9]</sup>의 결과와 일치하고, Chang and Asaro<sup>[3]</sup>의 실험결과와도 일치한다. Fig. 5의 곡선 I과 곡선 II의 경우에는 갑작스런 하중 감소가 발생하고 있는데, 이것은 기하학적으로 슬립이 발생하기 쉬운 방향으로 결정격자의 회전과 전단띠 내에서 단일 슬립만이 발생하는 슬립형태로의 천이에 기여하는 것으로 생각된다. 한편, Tvergaard<sup>[4]</sup>는 전단띠 형성에 있어서 유한요소 분할의 영향에 대해서 연구한바 있는데, 요소분할이 적당하지 않으면 전단띠 형성이 지연될 뿐만 아니라, 전단띠가 형성되지 않을 수도 있다고 지적하였다.

Fig. 8은 잠재경화 특성을 나타내는 것으로서, 모든 경우에 대해서  $m = 0.005$ 를 부여했다. 곡선 I는  $q = 1.0$ 으로써, 등방경화특성을 나타내고, 최대하중을 지난 얼마후에 하중 감소가 보인다. 곡선 II는  $q = 1.2$ 으로써 다른 결정의 슬립에 의해 경화되는 잠재경화의 영향을 받아 곡선 I의 경우보다 더 경화된 것을 알 수 있고, 최대하중이 지난 후 역시 하중감소를 보이고 있다. 그러나,  $q = 1.4$ 인 곡선 III의 경우 상대적으로 더 많이 경화되어 하중 감소가 보이지 않고 있다. Fig. 9는  $U/L_0 = 0.15$ 일 때의 변형된 유한요소형상을 나타낸다. (a)와 (b)의 경우에는 전단띠가 형성되어 국소화가 발생한 것이 보이나 (c)의 경우는 전단띠가 보이지 않는다. 따라서, 높은 잠재경화는 전단띠 형성을 지연시키고 이로 인해 변형국소화가 발생하지 않는 경향이 있음을 알 수 있다.

Fig. 10과 Fig. 11은 각각 같은 조건하에서 평면변형인장을 수행했을 때의 단결정 모델과 다결정 모델에 대한 하중-변위곡선과 변형된 유한요소형상을 나타낸다. 단결정의 경우도 전체모델에 대해서 계산을 수행하였고, 동일한 경계조건에서 두 경우의 특성을 비교하기위해 자유표면 중간부분에 변형국소화가 발생되도록 완만한 초기두께결함을 부여했다. Fig. 11(a)와 같이 단결정의 경우는 모델의 중간부분에 변형국소화 경향이 나타나지만, 다결정의 경우는 좀 다른 변형양상을 나타내고 있다. 다

결정체는 각 결정립마다 다른 슬립방위를 가짐으로, 현 상태에서 분해전단응력이 가장 작은 결정립에서 슬립이 발생하고, 뒤이어 각 결정립마다 각기 다른 분해전단응력에서 슬립이 발생하게 된다. 따라서, 자유표면의 여러 부분에서 국소화 현상이 나타날 수 있다. 또한 결정립계가 존재함으로 결정립 내의 슬립변형이 방해받게 되어 Fig. 10과 같이 단결정체에 비해서 상대적으로 연화된 것을 알 수 있고, 갑작스런 하중감소 및 이에 따른 전단띠도 나타나지 않는다. 이처럼 결정립으로 구성된 다결정체의 변형거동은 결정립들의 상호작용 및 결정립의 크기 등에 의해 많이 의존하는 것을 알 수 있다.

## 5. 결론

결정소성이론을 바탕으로 미시적인 관점으로부터 금속의 변형을 해석할 수 있는 유한요소 알고리즘을 확립했고, 이를 통해 단결정 및 다결정체의 평면변형인장 해석을 통해 재료의 미시적 소성변형 거동을 파악하였다. 결정의 슬립을 고려함으로써, 소성변형과 더불어 슬립방향의 회전 및 변형국소화에 미치는 변형속도 민감도의 영향을 평가할 수 있으며 그 결과는 기존의 실험결과와 잘 일치하였다. 결정립계를 포함한 다결정모델을 제시했고, 앞으로 다결정체에 대한 구체적인 해석으로부터 결정립계의 영향, 결정립의 상호작용 및 결정립의 크기 등을 평가할 수 있을 것이다.

## 후기

본 연구는 학술진흥재단의 신소재학술연구 조상비 지원으로 수행되었다.

## 참고문헌

1. R.J.Asaro, 1979, "Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals", *Acta Metall.*, Vol.27, pp.445
2. D.Peirce, R.J.Asaro and A. Needleman, 1981, "Elastic plastic constitutive laws for single crystals", Brown University Report MRL E-130
3. Y.W.Chang and R.J.Asaro, 1981, "An experimental study of shear localization in aluminum-copper single crystals", *Acta Metall.*, Vol.29, pp.241
4. V.Tvergard, A.Needleman and K.K.Lo, 1981, "Flow localization in the plane strain tensile test", *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.29, pp.115
5. D.Peirce, R.J.Asaro and A. Needleman, 1982, "An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals", *Acta Metall.*, Vol.30, pp.1087
6. J.Pan and J.R.Rice, 1983, "Rate sensitivity of plastic flow and imperfection for yield surface vertices", *Int. J. Solids Struct.*, Vol.19, pp.973
7. D.Peirce, R.J.Asaro and A.Needlema, 1983, "Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids", *Acta Metall.*, Vol.31, pp.1951
8. D.Peirce, A.Needleman, R.J.Asaro and J.Lemods, 1985, "Finite element analysis of crystalline solids", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.52, pp.689
9. J.Lemond, R.J.Asaro and A. Needleman, 1985, "A numerical study of localized deformation in Bi-crystals", *Mechanics of Materials*, Vol.4, pp.417
10. Y.Tomita, 1990, "수치탄소성해석", 양현당, pp.185
11. 권재욱, 정효태, 오규환, 이동녕, 1994, "유한요소법을 이용한 면심입방정금속의 변형 집합조직 예측", *한국소성가공학회지*, Vol.3, pp.229
12. 최창희, 홍승현, 권재욱, 오규환, 이동녕, 1995, "다층압연된 알루미늄의 불균질압연집합조직", *한국소성가공학회지*, Vol.4, pp.353

E	Elastic modulus	$1000 \times \tau_y$
$\nu$	Poisson's ratio	0.3
$\tau_y$	Constant	60.84MPa
$\dot{\alpha}$	Reference rate	0.001
$\tau_o = g^{(a)}(0)$		$\tau_y$
$\tau_s$	Saturation strength	$1.8 \tau_o$
$h_o$	Initial hardening rate	$8.9 \tau_o$

Table.1 Material properties

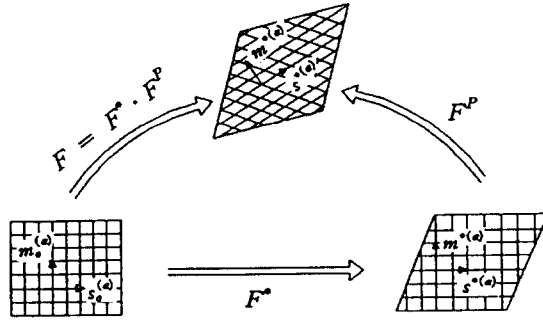


Fig.1 Kinematics of elastic-plastic deformation in crystalline solids

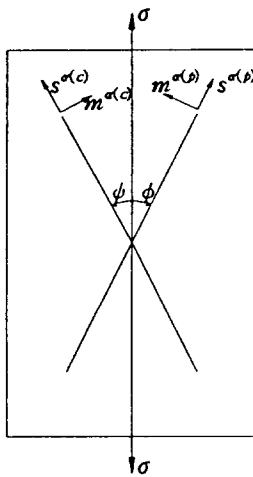


Fig.2 Asaro's double slip model

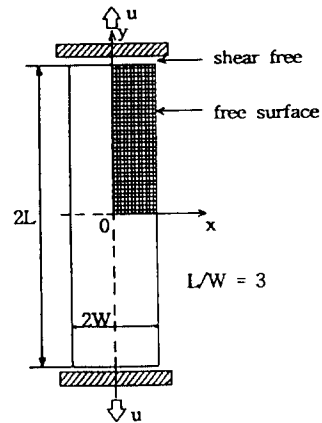


Fig.3 Analysis model for single crystals

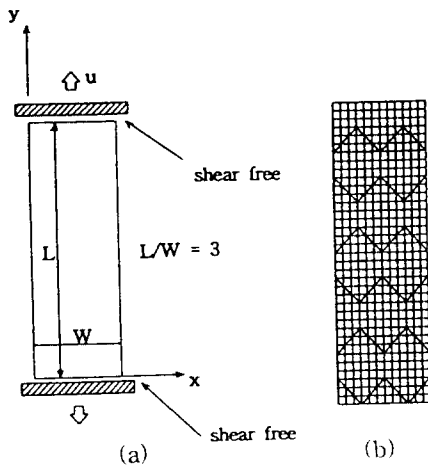


Fig.4. (a)Analysis model for poly crystals  
(b)Grain modeling for poly crystals

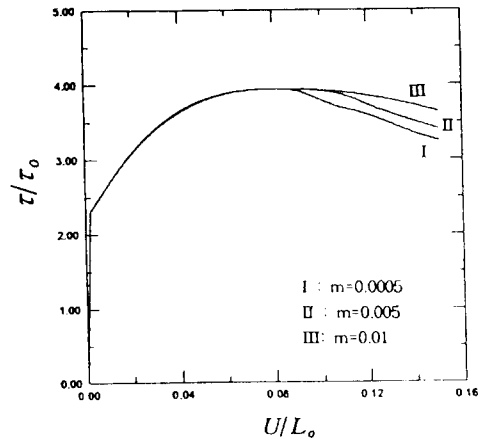
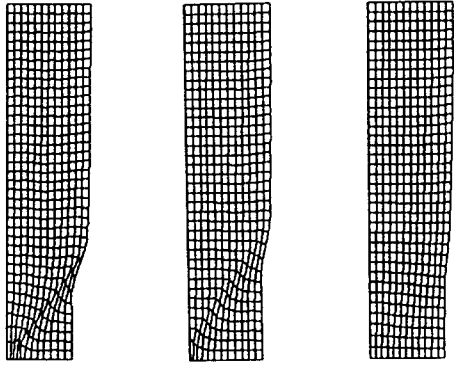
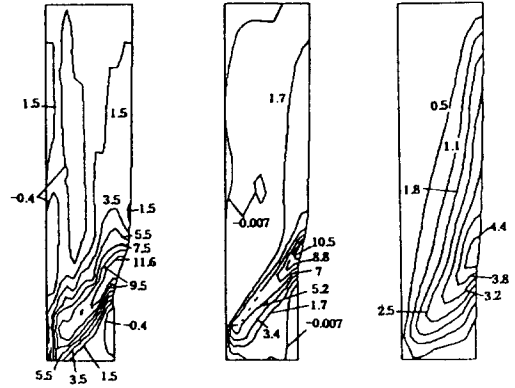


Fig.5 Load-elongation curves for the single crystal model



(a)m=0.0005 (b)m=0.005 (c)m=0.01

Fig.6 Deformed finite element meshes at various rate sensitivities ( $U/L_o=0.15$ ,  $q=1.2$ )



(a)m=0.0005 (b)m=0.005 (c)m=0.01

Fig.7 Lattice rotations measured in degrees ( $U/L_o=0.15$ ,  $q=1.2$ )

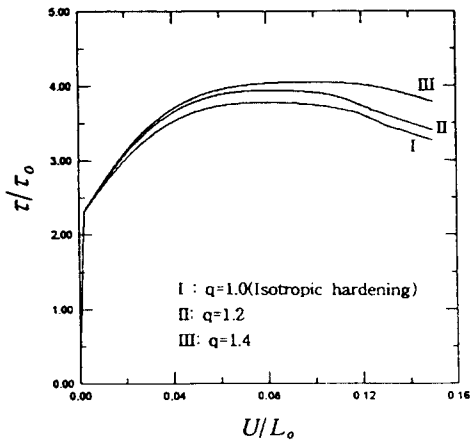
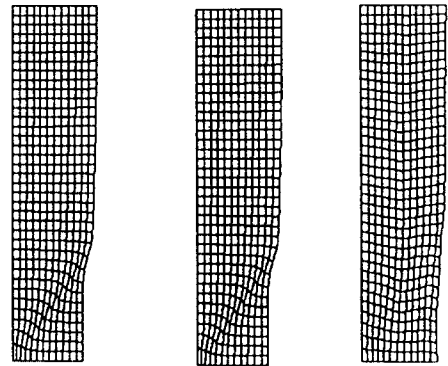


Fig.8 Load-elongation curves at various latent hardening parameter  $q$



(a)q=1.0 (b)q=1.2 (c)q=1.4

Fig.9 Deformed finite element meshes at various latent hardening parameter  $q$

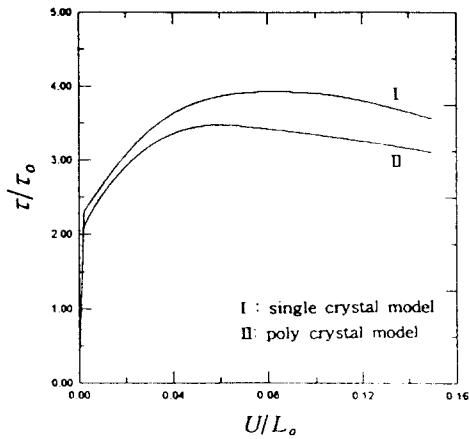
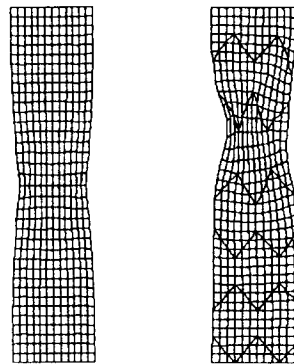


Fig.10 Load-elongation curves for single and poly crystals ( $U/L_o=0.15$ ,  $m=0.005$ ,  $q=1.2$ )



(a) (b)

Fig.11 Deformed meshes for (a)single crystals and (b)poly crystals ( $U/L_o=0.15$ ,  $m=0.005$ ,  $q=1.2$ )