

# 나노금속재료의 인장불안정에 대한 모델링

김형섭

## Modelling the Tensile Instability of Nanocrystalline Metallic Materials

H. S. Kim

### Abstract

In this paper, the effect of grain refinement on room temperature ductility of copper was addressed. Recent experimental results have shown that this material, as well as a number of other single-phase metals that are ductile when coarse-grained, lose their ductility with decreasing grain size in the sub-micrometer range. A recently developed model in which such materials are considered as effectively two-phase ones (with the grain boundaries treated as a linearly viscous second phase) was applied to analyze stability of Cu against ductile necking. As a basis, Hart's stability analysis that accounts for strain rate sensitivity effects was used. The results confirm the observed trend for reduction of ductility with decreasing grain size. The model can be applied to predicting the grain size dependence of ductility of other metallic materials as well.

**Key Words** : Nanocrystalline Metals, Constitutive Model, Dislocation Glide, Grain Boundary Diffusion Mechanism, Ductility, Grain Size Effect

### 1. 서론

나노기술이 전 세계적으로 큰 관심을 끌면서 나노재료에 대한 연구가 매우 활발하다. 재료분야에서도 일반적인 조대한 재료에서 알려진 기계적 성질과 결정립도 사이의 관계로부터 재료 미세화에 따른 물성의 향상이 기대되고 있다. 즉, 일반적인 조대한 금속재료에서는 결정립이 미세화되면 강도가 증가하고 (Hall-Petch 관계) 연성이 증가한다. 그러나 결정립미세화에 따른 강도의 증가에는 또한 그 한계가 있다. 결정립미세화의 결과로서, 공공확산을 위한 경로가 감소하여 결정과 결정립계를 따

른 확산이 지배하는 물질전달이 중요하게 되고, 따라서 확산기구가 전위의 미끄러짐이 지배하는 소성유동기구보다 우세해진다. 또한, 전위미끄러짐기구는 보통 10 nm 정도의 임계결정립도 [1] 이하에서는 작용하지 않게 된다. 이 경우에는 응력  $\sigma$ 은, 결정립내 및 결정립계를 통한 물질의 확산기구 [2]에 지배되어, 평균결정립도  $d$ 와 역의존성 (inverse dependence)을 보인다. 나노결정재료에서 응력과 결정립도의 역의존성 또는 Hall-Petch 거동에서 벗어나 그 기울기가 변화하는 결과는 여러 실험결과 [3,4]에서 나타나고 있다.

한편, 강도가 증가함에 따라 재료의 연성은 감소하지만, 서브마이크로미터 이하의 영역에서는 연성의 감소가 없거나 증가함 [5,6]이 알려져 있다. 특히, ECAP [7]와 같은 심한소성가공을 받은 재료에서는 결정립미세화에 따른 초소성을 얻으려는 시도 [8]가 계속 되고 있다.

이 연구에서는 나노결정재료를 포함한 재료의 결정립도에 따른 가공경화 거동을 정확히 표현할 수 있는 구성모델 [9,10]을 구리에 적용하여 문헌의 결과 (응력-결정립도)와 비교하고 네킹의 시작 변형률로 표시되는 상온 연성을 예측하고자 한다.

## 2. 구성모델

참고문헌 [1,9-11]에서 제안된 단일상 재료의 변형거동을 위한 상혼합모델에 기초한 구성모델은 결정립계가 하나의 다른 상으로 취급될 수 있다는 발상 [12]에서 비롯된다. 결정립계상의 소성변형률속도는 다음과 같다.

$$\dot{\epsilon} = 2 \frac{\Omega \sigma_{GB}}{kT} \frac{D_{GB}}{d^2} \quad (1)$$

여기서  $\sigma_{GB}$ 는 결정립계상에 작용하는 응력,  $T$ 는 온도,  $k$ 는 볼츠만상수,  $D_{GB}$ 는 결정립계확산의 자기확산계수이다.

결정립내부상에서는 전위미끄러짐기구와 결정립내 및 결정립계 확산지배기구를 모두 고려한다. 이 경우 결정립내부상의 소성변형률속도는 다음과 같다.

$$\dot{\epsilon}_{GI} = \dot{\epsilon}_{disl}(\sigma_{GI}) + \dot{\epsilon}_{Coble} + \dot{\epsilon}_{N-H} \quad (2)$$

결정립내부상의 소성변형률속도에 기여하는 전위미끄러짐은 전위밀도진화모델 [13]로 표시할 수 있다. 전위밀도는 변형률속도 및 결정립도에 의해 영향을 받아 진화하는 내부변수이고, 소성변형률속도는 다음과 같이 표시된다.

$$\dot{\epsilon}_{disl} = \dot{\epsilon}_0 \left( \frac{\sigma_{GI}}{\sigma_0} \right)^{m_i} Z^{-m_i/2} \Theta(d - d_c) \quad (4)$$

여기서,  $Z$ 는 초기밀도로 정규화된 무차원전위밀도,  $\dot{\epsilon}_0$ ,  $\sigma_0$ ,  $m_i$ 는 주어진 온도에서의 상수 [14]이다. 문헌 [1]에 의해  $d_c = 8$  nm을 선택하였다.

소성변형에 따른 전위밀도의 진화식은 다음과 같다.

$$\frac{dZ}{dt} = \dot{\epsilon}_{disl} \left[ C + C_1 \sqrt{Z} - C_2 \left( \frac{\dot{\epsilon}_{disl}}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{-1/n} Z \right] \quad (5)$$

여기서  $t$ 는 시간,  $C$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $\dot{\epsilon}_0$ 는 상수이고,  $n$ 은 주어진 온도에서 일정한 상수이다. 우리의 주 관심사인 결정립도효과는 결정립도  $d$ 에 반비례하는  $C$ 를 통하여 고려된다.

결정립내부와 결정립계 두 상에서 변형률은 거시적 변형률로서 같다고 가정하면, 응력은 혼합률식 (6)으로 결정된다.

$$\sigma = f\sigma_{GB} + (1-f)\sigma_{GI} \quad (6)$$

여기서  $f$ 는 결정립계상의 부피분율이다.

식 (1)-(7)은 두 상의 복합체로 가정된 단일상의 구성모델식이다. 이 구성모델을 구리에 적용하였다. 그림 1은 일정한 변형률속도의 1축 인장변형에 대한 응력-변형률 곡선으로서 문헌의 실험결과와의 일치는 만족할 만하다.

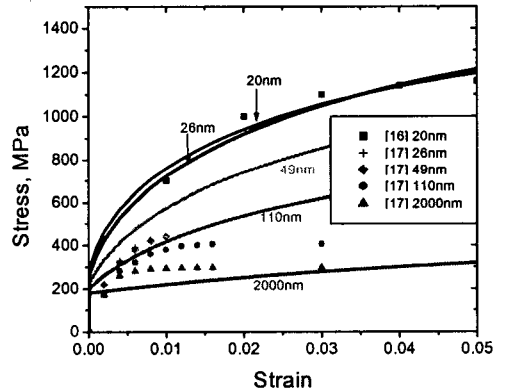


Fig. 1 Calculated and experimental stress-strain curves for Cu at the strain rate of  $10^{-3}$  /s

## 3. 인장 연성 해석

Koch와 Malow [21]는 나노결정재료의 연성결과들을 수집하여, 초미세 단일상의 재료에서 인장연성이 거의 없고 조대한 결정에서 연성을 나타내던 금속들이 결정립이 미세해짐에 따라 인장연성이 감소함을 발견하였다. 이런 경향은 최근의 Al합금 [22]에서도 나타난다.

저자는 최근의 연구결과 [27]에서 네킹의 시작점을 고려함으로써 연성에 미치는 결정립도의 효과를 이론적으로 해석하였다. 본 해석에서 이용한 Hart의 네킹조건 [28]은 다음과 같다.

$$\theta \leq \sigma(1 - 1/m) \quad (8)$$

여기서 가공경화를  $\theta = (\partial \sigma / \partial \epsilon)_\epsilon$ , 변형률속도민감도

$1/m = (\partial \log \sigma / \partial \log \dot{\epsilon})_\epsilon$ 이다. Hart의 인장불안정 조건으로부터 우리는, 확산이 소성거동을 지배하는 초미세 재료에서는  $m=1$ 에 접근하여 인장변형이 항상 안정하고 네킹시작변형율은 무한대가 되어 초소성이 일어날 것을 예상할 수 있다. 즉, 재료는 네킹에 의해서는 파괴가 일어나지 않고 다른 기구에 의해 연성이 제한될 것이다.

본 모델을 이용하여 변형률속도점프시험을 해석해보면 (그림 2), 결정립도에 따른 순간적인 (instantaneous) 변형률속도민감도  $1/m$ 를 결정할 수 있다.

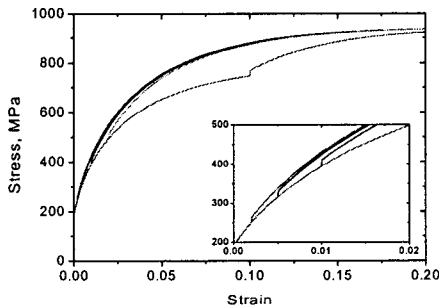


Fig. 2 Simulated strain rate jumps from  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  to  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$  at different strains (0.002, 0.005, 0.01, 0.02, 0.1) for Cu with the grain size of 100 nm at room temperature

수치적인 실험결과로 (그림 2)부터  $1/m$ 의 변형률의 존성은 크지 않음을 알 수 있다.

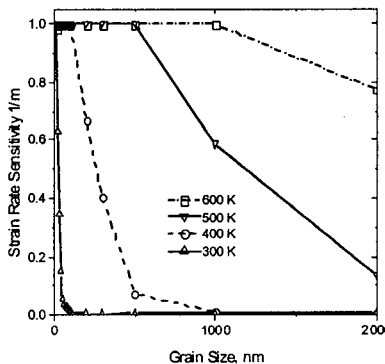


Fig. 3 Grain size dependence of the strain rate sensitivity parameter  $1/m$  at various temperatures.

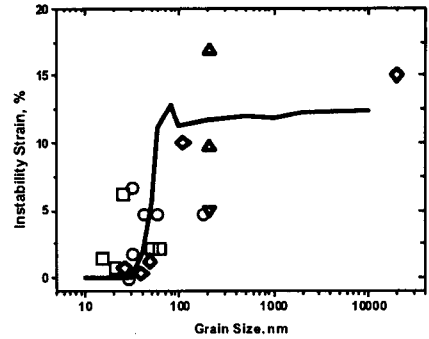


Fig. 4 Room temperature ductility of Cu as a function of the grain size: literature data (symbols) vs. model prediction (solid line) Symbols: Ref. [23], Ref. [24], Ref. [25], Ref. [17], Ref. [26].

그림 3의 계산된  $1/m$  값을 Hart의 조건에 대입하면, 결정립도에 따른 네킹시작변형률의 변화를 구할 수 있다. 그림 4의 결과를 보면, 실험적으로 관찰되는 결정립 미세화에 따른 인장연성은 정량적으로 모델의 결과와 잘 일치함을 알 수 있다. 구리의 경우 상온에서 결정립미세화에 따른 연성의 저하는 응력, 변형에 따른 응력의 변화 뿐 아니라 응력의 속도의존성에 관계하는 여러 가지 매개변수의 값에 따라 달라질 수 있다. 또한, 네킹시작변형률에 미치는 결정립도의존성이 온도에 따라서도 달라질 것인데, 이는 현재 연구 중이다.

#### 4. 결론

단일상의 재료를 결정립내상과 결정립계상으로 구성된 두 상의 혼합체로 보는 상혼합모델을 이용하여 나노결정 재료의 기계적 성질을 해석할 수 있는 구성모델을 제안하였다. 본 모델은 나노재료가 상온에서 연성이 저하되는 현상을 잘 설명하고 있다.

#### 후기

본 연구는 한국과학재단 목적기초연구 (2000-1-30100-007-3) 지원으로 수행되었음. 본 연구는 독일의 TU-Clausthal에 방문연구 동안 이루어졌으며, 방문연구 기간 중 유용한 토론을 해 준 Y. Estrin 교수에게 감사사를 드린다.

## 참 고 문 헌

- (1) Wang, N., Z. Wang, K.T. Aust, and U. Erb : *Acta Mater.*, 43 (1995) 519.
- (2) H.J. Frost, and M.F. Ashby : *Deformation Mechanism Maps, The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics*, Pergamon Press, Oxford (1982) 21.
- (3) G.E. Fougere, J.R. Weertman, and R.W. Siegel : *Scripta Metall. Mater.*, 26 (1992) 1879.
- (4) K. Lu, W.D. Wie, and J.T. Wang : *Scripta Metall. Mater.*, 24 (1990) 2319.
- (5) N.J. Petch : *J. Iron and Steel Inst.* 174 (1953) 25.
- (6) G.E. Dieter : *Mechanical Metallurgy*, McGraw-Hill Book Co., London (1988).
- (7) M. Furukawa, Z. Horita, M. Nemoto, and T.G. Langdon : *J. Mater. Sci.*, 36 (2001) 2835.
- (8) R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, and I.V. Alexandrov : *Prog. Mater. Sci.*, 45 (2000) 103.
- (9) H.S. Kim, Y. Estrin, and M.B. Bush : *Acta Mater.*, 48 (2000) 493.
- (10) H.S. Kim, Y. Estrin, and M.B. Bush : *Mater. Sci. Eng.*, 316A (2001) 195.
- (11) H.S. Kim, M.B. Bush, and Y. Estrin : *Mater. Sci. Eng.*, 276A (2000) 175.
- (12) J.E. Carsley, J. Ning, W.M. Milligan, S.A. Hackney, and E.C. Aifantis : *Nanostruct. Mater.*, 5 (1995) 441.
- (13) Y. Estrin : *Unified Constitutive Laws of Plastic Deformation*, ed. A.S. Krausz, and K. Krausz, Academic Press, New York (1996) 69-106.
- (14) Y. Estrin, and H.A. Mecking : *Acta Metall.*, 32 (1984) 57.
- (15) H. Gleiter : *Prog. Mater. Sci.*, 33 (1989) 224.
- (16) C.J. Youngdahl, P.G. Sanders, J.A. Eastman, and J.R. Weertman : *Scripta Mater.*, 37 (1997) 809.
- (17) P.G. Sanders, J.A. Eastman, and J.R. Weertman : *Processing and Properties of Nanocrystalline Materials*, edited by C. Suryanarayana, J. Singh, and F.H. Froes, TMS (1996) 379-405.
- (18) R. Suryanarayana, C.A. Frey, S.M.L. Sastry, B.E. Waller, S.E. Bates, and W.E. Buhro : *J. Mater. Res.*, 11 (1992) 439.
- (19) G.W. Nieman, J.R. Weertman, and R.W. Siegel : *J. Mater. Res.*, 6 (1991) 1012.
- (20) P.G. Sanders, J.A. Eastman, and J.R. Weertman : *Acta Mater.*, 45 (1997) 4019.
- (21) C.C. Koch, and T.R.J. Malow : *Metastable and Nanocryst. Mater.*, 2-6 (1999) 565.
- (22) T. Mukai, M. Kawazoe, and K. Higashi : *Nanostruct. Mater.*, 10 (1998) 755.
- (23) G.W. Nieman, J.R. Weertman, and R.W. Siegel : *NanoStruct. Mater.*, (1992) 185.
- (24) B. Günther, A. Baalman, and H. Weiss : in *Physical Phenomena in Granular Materials*, edited by G.D. Cody, T.H. Geballe, and P. Sheng, Materials Research Society, Pittsburgh, PA, (1990) 611.
- (25) V.T. Gertsman, M. Hoffmann, H. Gleiter, and R. Birringer : *Acta Metall. Mater.*, 42 (1994) 3539.
- (26) R.Z. Valiev, E.V. Kozlov, Yu.F. Ivanov, J. Lian, A.A. Nazarov, and B. Baudelet : *Acta Mater.*, 42 (1994) 2467.
- (27) H.S. Kim, and Y. Estrin : *Appl. Phys. Lett.*, (2001) submitted.
- (28) E.W. Hart : *Acta Metall.*, 15 (1967) 351.
- (29) H.S. Kim, and M.B. Bush, *Nanostructured Mater.* 11 (1999) 361.