

3차원 전위동력학 시뮬레이션 (Mesoscopic simulation of 3D Discrete Dislocation Dynamics)

서울대학교 신찬선, 오규환
GPM2/INPG Marc C. FIVEL

3차원 전위동력학은 1980년대 말 단결정 재료의 기계적 거동을 소성변형의 기본 기구인 전위 집합의 거동을 통해 이해하기 위해 개발되었다. 1940년대 이후 이론적, 실험적으로 광범위하게 연구된 개별 전위의 성질, 즉 개별 전위 주위의 응력장과 외부 응력에 따른 전위의 움직임, 다른 전위와의 상호작용을 3차원 공간상에서 적절히 표현하여 외부변형 또는 응력에 따른 전위 집합의 거동을 시뮬레이션 할 수 있다. 3차원 전위동력학은 크게 두 분야에 적용되고 있다. 첫째는 단결정의 거시적 성질을 전위 집합의 상호작용으로 설명하려는 시도이고, 둘째는 마이크로 단위의 기능재료의 기계적 거동을 전위로부터 직접 구하려는 시도이다.

이 연구에서는 3차원 전위동력학을 통해 평면 인텐테이션시 프리즈메틱 전위루프의 생성, 두 전위사이의 접합(Junction) 형성과 형성된 접합의 강도를 고찰하였다. 평면 인텐테이션 시뮬레이션의 경우 변위 경계조건을 이용하였고, 이를 위해 전위의 변위장을 계산하는 방법에 대해 모색하였다. 또한 재료 내부의 석출물이나 계재물과 전위의 상호작용을 3차원 전위동력학에 표현하는 방법에 대해 연구하였으며 이를 위해 제 2상 물질과 전위의 상호작용, 즉 석출물에 의한 영상력(Image force)을 계산할 필요가 있다. 이를 이용하여 켄칭시 계재물 주위에 프리즈메틱 전위루프의 생성과 전파를 고찰하였다.