

미세조직학적 변수를 고려한 합금의 구성모델링

김형섭* · 김성호** · 류우석** · Yuri Estrin***

Constitutive Modelling of Alloys Implementing Microstructural Variables

H. S. Kim, S. H. Kim, W. S. Ryu and Y. Estrin

Abstract

A unified elastic-viscoplastic constitutive model based on dislocation density considerations is described. A combination of a kinetic equation, which describes the mechanical response of a material at a given microstructure in terms of dislocation glide and evolution equations for internal variables characterizing the microstructure provide the constitutive equations of the model. Microstructural features of the material, such as the grain size, spacing between second phase particles etc., are directly implemented in the constitutive equations. The internal variables are associated with the total dislocation density in the simple version of the model. The model has a modular structure and can be adjusted to describe a particular type of metal forming processes.

Key Words : Constitutive Model, Dislocation Evolution, Strain Hardening, Creep

1. 서론

지난 수 십년 동안 금속의 소성변형 해석을 위한 구성 모델에 금속조직학적인 요인을 고려하고자 하는 새로운 시도가 계속되어 왔고, 그 중 전위밀도를 내부변수로 하는 Estrin 모델 [1]이 유용하게 사용되고 있다. 여러 가지 다양한 물리적 현상을 반영하여야 하는 구성방정식은 간단한 형태와 재료에 따라 조절해 주어야 하는 매개변수들의 수가 적은 것이 필요하다. 이러한 매개변수와 금속조직학적인 특성들은 밀접하고 명확한 관계가 존재하므로, 이들 금속조직학적인 요인들 (결정립도, 입자간 간격, 용질농도 등)의 효과를 정량적으로 평가하는 것이 가능해진다. 이 논문은 Estrin 모델의 일반적인 내용

[1-3]을 소개하고, 여러 가지 금속재료에 대한 그 적용에, 특히 나노복합재료에의 적용과 분말의 치밀화거동의 해석결과를 보이고자 한다.

2. 미세조직을 고려한 구성모델

초기의 Kocks가 제안한 구성식에 기초하면, 소성변형률속도 $\dot{\epsilon}$ 와 응력 σ 은 다음 식 (1)과 같은 power-law의 관계가 있다.

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma}{\lambda} \right)^m \quad (1)$$

* 충남대학교 금속공학과
** 한국원자력연구소 원자력재료기술팀
*** Instituts für Werkstoffkunde und Werkstofftechnik, Technische Universität Clausthal, Germany

여기서 $\hat{\sigma}$ 는 재료의 미세조직에 관련된 응력의 정규화 양이고, ϵ_0 는 재료상수이다. 지수 m 은 절대온도 T 에 반비례한다. $\hat{\sigma}$ 는 속도에 의존하는 전위미끄럼저항에 해당하며, 한계값인 절대온도 0 K에서의 값을 mechanical threshold stress (MTS) [4]라고 한다. 참고문헌 [5]에서는 $\dot{\epsilon}$ 과 $\sigma/\hat{\sigma}$ 사이의 관계로서 Arrhenius 식을 사용하였다.

미세조직에 관계된 양 $\hat{\sigma}$ 는 다음과 같이 표시된다.

$$\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_0 + M\alpha Gb\sqrt{\rho} \quad (2)$$

위에서 G 는 전단계수, b 는 전위버거스벡터, M 은 평균 Taylor factor, ρ 는 전체전위밀도, α 는 상수이다. 전위 미끄러짐의 저항으로 작용하는 전위에 관계되지 않는 강화효과 (2차입자상에서의 Orowan 응력, bcc 재료에서의 Peierls 응력 등) 들은 추가항 $\hat{\sigma}_0$ 에 포함되어 있다. 추가항 $\hat{\sigma}_0$ 은 재료의 고유특성이다.

식 (2)의 우변의 둘째항은 변형공정이 진행되어 변형률 ϵ 에 따라 전위밀도 ρ 의 진화정도에 의하여 달라진다. 전위밀도 ρ 의 진화방정식은 다음과 같다.

$$\frac{d\rho}{d\epsilon} = M\left(\frac{1}{bL} - k_2\rho\right) \quad (3)$$

위에서, L 은 이동하는 전위의 mean free path를 나타내며, 전위미끄럼면에서 국부적인 장애물에서 움직이지 못하게되는 평균이동거리이다. 계수 k_2 는 두 개의 전위-전위 상호 소멸공정에 의해서 회복이 발생하는 속도를 결정한다. 식 (3)의 좌변의 미분은 시간이 아닌 변형률에 대한 것임에 주목해야 한다. 전위의 소멸기구는 screw dislocation의 교차슬립이나 edge dislocation의 climb에 의하여 일어나므로, 계수 k_2 는 변형률속도와 온도에 의존한다 [1-5]. 여러 가지 종류의 국부적인 전위미끄럼 장애물들이 동시에 작동하면 각각의 밀도를 합산하여 고려할 수 있다. 이것은 다음 식 (4)와 같이 mean free path L 의 역수를 합산하는 것과도 동일하다.

$$1/L = \sum_i 1/L_i \quad (4)$$

특별한 조직학적인 장애물이 없는 결정립내에서는 전위 이동의 장애물은 다른 전위밖에 없다. 이 경우 dislocation mean free path L 는 평균전위간격 $1/\sqrt{\rho}$ 로 주어지고, 이는 평균 전위셀크기에 비례한다. 전위축적항 $1/(bL)$ 은 $k_1\sqrt{\rho}$ 로 표현될 수 있다 (k_1 은 상수). 전위 미끄럼저항에 대한 다른 기구가 작용하지 않는다면, 식 (1)-(3)은 일정한 변형률속도 조건에서의 응력과 변형률 관계를 나타내는 Voce-type 식에 해당한다.

3. 적용 예

3.1 시효효과

전 질의 구성모델을 따르는 재료의 변형거동은 재료 매개변수를 구하기 위한 몇 번의 실험을 통하여 예측이 가능하다. 그림 1은 Al 1100의 압축시험 중 strain rate jump 시의 실험과 예측 결과 [7]를 보여 주고 있다. 재료의 상수는 단순1축시험으로부터 'evolution strategy'를 이용한 매개변수 평가법을 이용하여 구한다.

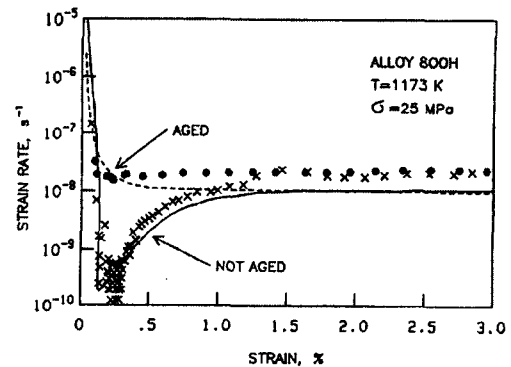


Fig. 1 The experimental data by Browen et al. [6] for Al 1100 tested in compression (squares) and the model prediction (solid curves)[7].

이 구성모델식은 직접적으로는 MTS $\hat{\sigma}_0$ 를 통하여, 간접적으로는 식 (3)과 (4)에서 결정되는 MTS $\hat{\sigma}_0$ 의 변화를 통하여 미세조직적인 특성을 고려할 수 있는 것이 가능하다. 특별히, 평균 mean free path를 감소시키고 ($1/L$ 항) 회복을 감소시키면 (k_2 항), 강화효과를 얻을 수 있다. 예를 들면, 고용강화는 다음의 두가지의 강화효과를 얻을 수 있다: (i) stationary solute의 경우 $\hat{\sigma}_0$ 는

일반적으로 용질농도의 1/2승에 비례하여 증가하고 (ii) 용질원자들은 적층결함에너지를 변화시켜 k_2 즉 회복 항을 다르게 한다. 이 효과들은 mobile solute의 경우에는 더욱 복잡하게 되어, 동적변형시효에서는 $\hat{\sigma}_0$ 가 음(-)의 변형률속도민감도를 가지게 된다.

3.2 나노복합재료

분말을 이용하여 나노복합재료를 제조할 경우 완전치 밀화를 이루기는 거의 불가능하다. 압축 후의 잔류기공들은 기지입자들 사이 뿐 만 아니라 강화재와 기지사이의 경계에도 위치할 것이다. 따라서 나노복합재의 단위 또는 경계상, 경계상으로 분리되는 강화입자와 기지로 구성되고, 기지상 내부에서의 전위의 평균자유이동거리가 일반적인 조대한 복합재의 경우에서와는 달리 입자간 거리보다는 결정립도에 의하여 주로 결정된다. 기공은 경계상의 한 부분으로써 다공질 금속의 모델로 고려된다. 각 상의 기계적 성질과 상대적인 양은 복합재료의 총체적인 기계적 성질을 결정한다. 이 경우 구성모델식은 다음과 같이 수정된다. 무차원의 전위밀도 Z 의 유효 소성변형률 ϵ_p 에 따른 변화는 다음 식 (5)-(6)으로 표현된다.

$$\frac{dZ}{d\epsilon_p} = C + C_1\sqrt{Z} - C_2Z \quad (5)$$

$$C_2 = C_{20} \left(\frac{\dot{\epsilon}_p}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{-1/n} \quad (6)$$

저온에서 체심입방정 금속의 매개변수 $C, C_1, C_{20}, \sigma_0, \dot{\epsilon}_*, \dot{\epsilon}_0$ 는 상수이다. 지수 m, n 은 절대온도 T 의 함수이고 상온에서는 일정하다. 결정립도에 의존하는 변수 C 는 식 (7)과 같이 결정립도에 반비례한다.

$$C = M \frac{b}{d} \left(\frac{MaG}{\sigma_0} \right)^2 \quad (7)$$

여기서 d 는 기지 재료의 결정립도, b 는 전위의 버거스 벡터, G 는 전단계수, M 은 테일러상수, α 는 상수이다.

나노입자의 부피분율에 따른 기계적 성질의 이론적인 결과는 그림 2와 같다 [10].

3.2 나노분말재료

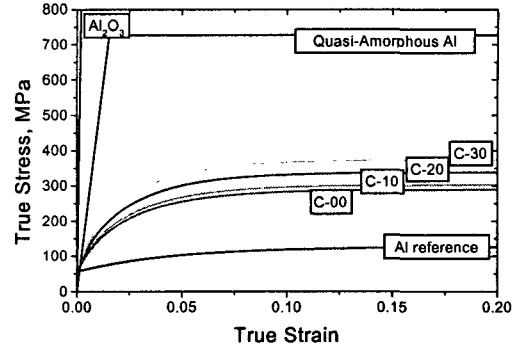


Fig. 2 Stress-strain curves for Al_2O_3 , non-porous quasi-amorphous Al and reference Al matrix calculated using the unified model.

금속 분말에서 기지 재료의 결정립도 및 미세 조직이 변화할 때에도 변형거동을 기술할 수 있는 구성모델을 사용하였다 [11]. 이 모델을 사용하면 결정립도, 강화입자, 용질효과 등의 많은 미세조직학적인 요인의 효과를 고려한 소성변형 거동을 해석할 수가 있다. 식 (5)-(6)을 다공질 재료의 소성모델과 결합시킬 수 있다. 이것은, 다공질재료의 항복응력식에서 기지금속의 유효응력을 전위에 기초한 소성구성 모델에서 구한 비다공질 재료의 유효응력 σ 으로 놓고 해석하는 것이다. 이러한 접근법으로 구한 조대한 분말과 나노분말의 치밀화 거동을 그림 3에 나타내었다.

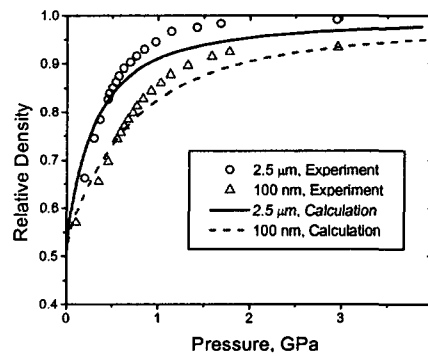


Fig. 3. Comparison of calculated and measured compacti-on curves of coarse and fine copper powders. Symbols represent the experimental

4. 결 론

금속의 소성변형 해석을 위한 구성모델에 금속조직학적인 요인을 고려할 수 있는 모델 중, 전위밀도를 내부 변수로 하는 Estrin 모델을 기술하였다. 이 모델에서 필요한 매개변수와 금속조직학적인 특성들의 관계를 나타내었고, 이들 금속조직학적인 요인들 (결정립도, 입자간 간격, 용질농도 등)의 효과를 정량적으로 평가하였다. 작용 예로서, Al합금에서의 시효거동, 나노복합재료에의 적용과 분말의 치밀화거동의 해석결과를 보였다.

후 기

이 연구는 과학기술부에서 시행하는 원자력연구개발 중장기연구개발사업의 지원으로 수행되었습니다.

참 고 문 헌

- (1) Estrin, Y. and Mecking, H., 1984, *Acta metall.*, Vol. 32, p. 57.
- (2) Estrin, Y., 1991, in "Constitutive modelling - theory and application", MD-Vol. 43/AMD Vol. 168, p. 65.
- (3) Estrin, Y., 1996, in "Unified constitutive laws of plastic deformation", eds. Krausz, A. S. and Krausz, K., Academic press, Ch. 2.
- (4) Kocks, U. F., 1976, *J. Eng. Mater. Technol.*, Vol. 98, p. 76.
- (5) Follansbee, P. S. and Kocks, U. F., 1988, *Acta metall.*, Vol. 36, p. 81.
- (6) Brown, S. B., Kim, K. H., and Anand, L., 1989, *Int. J. Plasticity*, Vol. 5, p. 95.
- (7) Braash, H. and Estrin, Y., 1993, in "Material parameter estimation for modern constitutive equations", MD-Vol. 43/ AMD-Vol. 168, ASME, N.Y., p. 47.
- (8) Estrin, Y., 1990, in "Microstructure and mechanical properties of materials", eds. Tenckhoff, E. and Voehringer, O., DGM, Oberursel, Germany, p. 17.
- (9) Schwarze, E., 1991, PhD Thesis, RWTH Aachen.
- (10) Kim, H. S., Bush, M. B. and Estrin, Y., 2000, "A phase mixture model of a particle reinforced composite with fine microstructure", *Mater. Sci. Eng.* Vol. A276, pp. 175~185.
- (11) Kim, H. S., Estrin, Y., Gutmanas, E., Rhee, C. K., 2001, "A constitutive model for densification of metal compacts: the case of copper", *Mater. Sci. Eng.* Vol. 307A, pp. 67~73.