

유한요소 다결정 모델을 이용한 마그네슘 합금 AZ31B 판재의 압연 집합 조직 예측

원성연*, 김영석**, 나경환***, Hiroshi Takahashi****

*경북대학교 대학원

**경북대학교 기계공학부

***생산 기술 연구원

**** 야마가타 대학교 기계공학부, 일본

Prediction of Rolling Texture for Mg Alloy AZ31B Sheet using Finite Element Polycrystal Model

S.Y. Won*, Y.S. Kim**, K.H. Na*** and H. Takahashi****

*Kyungpook National University, Graduate School

**Kyungpook National University, Mechanical Engineering

***Digital Production Processing Team, Korea Institute of Industrial Technology

**** Yamagata University, Mechanical Systems Engineering, Japan

Abstract

The deformation mechanism of hexagonal close-packed materials is quite complicate including slips and twins. A deformation mechanism, which accounts for both slip and twinning, was investigated for polycrystalline hcp materials. The model was developed in a finite element polycrystal model formulated with initial strain method where the stiffness matrix in FEM is based on the elastic modulus. We predicted numerically the texture of Mg alloy(AZ31B) sheet by using FEM based on crystal plasticity theory. Also, we introduced the recrystallized texture employed the maximum energy release theory after rolling. From the numerical study, it was clarified that the shrink twin could not be the main mechanism for shortening of c-axis, because the lattice rotation due to twin rejects for c-axis to become parallel to ND(normal direction of plate). It was showed that the deformation texture with the pyramidal $\langle a+c \rangle$ slip gives the ring type pole figure having hole in the center.

Key words : Magnesium, Hexagonal Close-Packed, Finite Element Polycrystal Model, Rolling Texture

1. 서론

최근 전 세계는 환경오염과 지구 온난화로 인한 많은 문제점이 대두되어 선진국을 중심으로 강력한 규제를 통하여 환경오염을 줄이기 위한 노력을 하고 있다. 특히 자동차가 배출하는 배기가스는 환경오염과 지구 온난화의 주 원인으로 지적되고 있어 차량 경량화를 통한 연비 향상에 대한 연구가 활발히 행해지고 있다. 경량 소재로써 마그네슘은 그 밀도가 알루미늄에 비해 2/3, 철에 비해 1/5 정도인 약 $1.8(\text{g}/\text{cm}^3)$ 이며 타 금속에 비해 비강도와 비강성이 뛰어난 기계적 특성을 가지고 있다. 또한 진동, 충격 등에 대한 흡수성이 뛰어나고 열전도도, 고온에서의 피로, 가공성

등이 우수하여 전자기적 특성이 뛰어나 항공, 자동차, 방위 산업뿐만 아니라 휴대용 전자제품 등의 케이스에도 많이 적용되고 있다.⁽¹⁾

그러나 이 마그네슘 금속은 육방 조밀 격자(hexagonal close-packed, hcp)의 결정 구조를 가지기 때문에 다른 결정 구조 금속에 비해 작동하는 슬립계가 적어서 소성 변형이 용이하지 않아 상온에서의 성형성이 떨어진다. 따라서 마그네슘 합금을 이용한 부품 제조는 용해, 반응고/반용융 성형 그리고 다이 캐스팅 등 고온에서 주로 행해지며 이들 중에서 특히 다이캐스팅 공정을 통한 벌크재 부품 제조가 주를 이루고 있다. 최근에는 판재의 프레스 가공과 같이 생산성과 형상 동결성이 우수한 가공 방법에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있고,⁽²⁻⁴⁾ 특히 자동차의 경량화를 통한 연비 향상 측면에서 마그네슘 판재의 성형 기술에 대한 왕성한 연구 개발이 이루어지고 있다.

금속 재료는 소성가공, 열처리, 응고와 같은 공정 중에서 이방성이 현저하게 나타난다. 이러한 성질은 특히 판재의 경우 딥 드로잉성, 귀 발생, 성형 한계에 영향을 주는 등 재료의 가공 시에 매우 중요한 요인이 된다. 다결정 재료의 경우 이방성은 결정립들이 외부 응력에 대해 특정 방향으로 슬립이 발생하고 인접 결정립들의 구속에 의해 회전, 배열하여 결정립들의 방위가 변해 생성되는 결정학적 변형 집합 조직에 의해 지배를 받는다. 면심 입방격자(face centered cubic)와 체심 입방격자(body centered cubic) 결정 구조를 갖는 금속에서 슬립에 의한 변형 기구는 실험과 이론적으로 많은 연구가 되어져 있으나 마그네슘과 같은 육방 조밀 격자 결정 구조를 갖는 금속 재료의 변형 기구는 아직 명확히 알려져 있지 않은 실정이다. hcp 결정 구조를 갖는 마그네슘의 변형 기구는 슬립뿐만 아니라 쌍정도 포함하는 것으로 알려져 있어 훨씬 복잡한 변형기구를 나타낸다.

기저면(basal plane), 주면(prismatic plane) 그리고 추면(pyramidal plane) 슬립계에서의 모든 슬립 방향은 c-축(육방 격자 축)에 수직이어서 그 방향이 판재의 면에 대해 평행하게 배열하는 강한 저면 집합 조직을 형성하기 때문에 마그네슘 판재는 판의 두께 감소를 수반하는 변형에 대해서는 강한 이방성을 나타낸다. 이러한 슬립계는 c-축에 평행한 신장이나 수축 변형을 일으키지 못한다. 신장에 대해서는 신장 쌍정(stretch twin) 시스템이 지배적이지만 수축에 대한 변형 기구는 아직 정립이 되어 있지 않다. 이로 인해 결정학적인 측면에서 마그네슘 재료의 소성 변형시의 슬립과 쌍정의 역할과 변형 기술을 규명하기 위한 연구가 최근 활발히 이루어지고 있다.⁽²⁻⁴⁾

일반적으로 금속 다결정 재료의 소성 변형을 각 결정의 슬립계에서의 활동 슬립(active slip)의 집합으로 취급하는 결정 소성 이론(crystal plasticity)에서는 결정의 슬립 발생 기구가 여러 모델에 의해 제안되어 있다. Sachs⁽⁵⁾는 다결정내의 각 결정립들이 같은 응력 상태를 갖고 슬립면상의 슬립 방향으로 생기는 전단 응력이 임계 값에 도달하면 항복이 일어난다고 제안하였다. Taylor⁽⁶⁾는 외부의 소성 변형에 의해 다결정 내부의 각 결정립들은 외부 변형률과 동일한 변형을 하며 내부 변형일이 최소가 될 때 항복이 일어난다고 가정하여 전위에 의한 소성 변형을 처음으로 수학적으로 설명하였다. 또한 Bishop과 Hill⁽⁷⁾은 슬립을 일으킬 수 있는 결정학적 응력 중에서 외부 소성 변형일이 최대가 될 때 항복이 일어난다고 하였는데 Taylor⁽⁶⁾에 의한 계산 결과와 Bishop-Hill⁽⁷⁾에 의한 계산 방법은 동일하다고 알려져 있다.⁽⁸⁾ 변형 집합 조직의 예측에 있어서 Sachs⁽⁵⁾의 모델보다 Taylor-Bishop-Hill 모델이 더 타당한 것으로 알려져 있고 이 방법을 이용하여 여러 연구자들이 변형 집합 조직을 모사하고 해석하였으나^(9,10) 작동하는 슬립계가 고유하게 결정되지 않는 것이 가장 큰 단점이었다. 이 문제는 슬립계에 작용하는 전단 응력과 전단 변형률 속도 사이에 멱수 법칙 관계를 적용하는 방법⁽¹¹⁻¹³⁾에 의해 해결되었으며 Asaro와 Needleman⁽¹⁴⁾은 멱수 법칙 관계를 이용하여 대변형, 탄소성, 속도 의존 다결정 모델을 제시하였다. 다결정 금속의 거시적인 거동을 예측하기 위하여 Asaro와 Needleman은 모든 결정들이 같은 부피와 균일한 변형 구배를 갖는다는 Taylor의 가정을 이용하였다. Kalidindi 등⁽¹⁵⁾은 유한 요소법을 이용하여 Asaro와 Needleman 모델을 계산함으로써 다결정 금속의 일반적인 변형과 그에 수반하는 집합조직의 변화를 해석할 수 있는 방법을 제안하였다.

이와 같이 결정의 슬립을 다루는 결정 소성 이론을 이용하여 실제 압연 공정을 모사하여 압연 판재의 집합 조직을 예측한 연구로는 Takahashi,⁽¹⁶⁾ 이동녕,⁽¹⁷⁾ 오규환,⁽¹⁸⁾ Dawson⁽¹⁹⁾ 등의 연구가

있다. Takahashi 등⁽¹⁶⁾은 결정 소성 학을 이용하여 각 요소들이 적절한 결정 방위를 가지는 결정립으로 가정하여 유한 요소 해석으로 집합 조직을 예측한 바 있다. 한편 이동녕 등^(17,18)이 알루미늄 판재의 압연 공정 해석과 평면 변형 압축 해석을 통하여 집합 조직의 변화를 연구하였고 Dawson⁽¹⁹⁾은 결정 소성 학을 이용하여 결정학적 슬립에 의한 fcc, bcc 금속 변형에 대하여 연구하였다. 그러나 이러한 모델을 이용한 변형 집합 조직 예측은 fcc나 bcc의 결정 구조를 가지는 알루미늄, 강, 구리 등의 다결정 금속에 국한되어 있으며 hcp 결정 구조를 가지는 마그네슘의 경우에는 소성 변형 거동이 명확하지 않기 때문에 연구가 많지 않다.

본 연구에서는 각 요소들을 임의의 적절한 결정 방향을 갖는 하나의 결정립으로 가정한 유한 요소 다결정 모델(FEPM, Finite Element Polycrystal Model)을 제안한 Takahashi⁽¹⁶⁾ 이론을 이용하여 육방 조밀 격자의 결정 구조를 가지는 마그네슘 합금 AZ31B 압연 판재의 집합 조직을 예측하고자 한다. 본 연구에서는 마그네슘 합금 압연 판재의 압연 집합조직의 예측을 위해서 평면 변형 압축 모델을 사용하였다.

2. 유한 요소 다결정 모델(Finite Element Polycrystal Model)

2.1 초기 변형을 법에 의한 정식화

이전 단계의 시각 t^1 에 의한 상태를 모두 알고 있다고 가정하고 t^1 에서 현재 시각 t 까지의 변위 증분을 \dot{u}_i , 현재 형상에 기초하여 정의된 변형률 증분을 $\dot{\epsilon}_{ij}$, 현재 시각에 의한 진 응력 σ_{ij} 를 미지수로 한다. 현재 형상에 근거한 가상일의 원리는 다음과 나타내진다.⁽²⁰⁾

$$\delta\phi = - \int_V (\sigma_{ij,i}) \delta \dot{u}_i dV = \int_V \sigma_{ij} \delta \dot{\epsilon}_{ij} dV = \int_V \delta \dot{\epsilon}^T \sigma dV \quad (1)$$

각 시간 증분 동안 변형률과 스핀이 작다고 가정하고 다음과 같은 구성 관계식을 사용한다.

$$\dot{\sigma}_{ij} = D_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) \quad (2)$$

여기서 $\dot{\epsilon}_{kl}^p$ 는 소성 변형률 증분이고 등방 탄성계수는 $D_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2G \delta_{ik} \delta_{jl}$ 이다. 응력 증분은 다음과 같은 관계를 갖는다고 한다.

$$\dot{\sigma} = \sigma - \sigma_1 \quad (3)$$

여기서, σ_1 은 이전 상태의 응력 값이다. 따라서 현재의 응력 σ 은 다음과 같이 나타내진다.

$$\sigma = D(\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p) + \sigma_1 \quad (4)$$

여기서 D 는 강성 행렬이고 6×6 행렬이다. 미소 변형률 증분은 변위 u 와 다음과 같이 표현된다.

$$\dot{\epsilon} = B \dot{u} \quad (5)$$

본 연구에서 블록 형태 요소를 사용하였으며 행렬 B 는 5개의 사면체 요소들의 절점 좌표 함수로 구성된다. 식 (4)과 (5)를 (1)에 대입하면

$$K \dot{u} = F + F^p \quad (6)$$

여기서

$$K = \int B^T D B dV, \quad F^p = \int B^T (D \dot{\epsilon}^p - \sigma_1) dV \quad (7)$$

만약에 $\dot{\epsilon}^p$ 와 σ_1 을 안다면 \dot{u} , $\dot{\epsilon}$ 그리고 σ 를 결정할 수 있다.

여기서 미시적인 응력과 변형률들은 하나의 블록 요소에서는 균일하다고 가정하며 절점의 좌표와 결정들의 방향은 초기 단계의 시각에서 부여되고 강성 행렬 K 는 시간 증분 동안에는 불변하는 것으로 가정한다.

2.2 소성 변형률의 결정

슬립 면에 수직인 단위 벡터를 a_i , 슬립 방향과 평행한 단위 벡터를 b_i , 그리고 r 번째 슬립계에서의 전단 변형률을 $\dot{\gamma}^{(r)}$ 라고 한다. 단 결정에서의 소성 변형률 증분 및 소성 스핀 증분은 다음과 같이 표현된다.⁽²¹⁾

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_r L_{ij}^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)}, \quad \dot{\omega}_{ij}^p = \sum_r W_{ij}^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} \quad (8)$$

여기서

$$L_{ij}^{(r)} = (a_i^{(r)} b_j^{(r)} + a_j^{(r)} b_i^{(r)})/2, \quad W_{ij}^{(r)} = (a_i^{(r)} b_j^{(r)} - a_j^{(r)} b_i^{(r)})/2 \quad (9)$$

r 번째 슬립계에서의 분해 전단 응력은 다음에 의해 결정될 수 있다.

$$\tau^{(r)} = L_{ij}^{(r)} \sigma_{ij} \quad \text{또는} \quad \tau^{(r)} = \mathbf{L}^{(r)T} \boldsymbol{\sigma} \quad (10)$$

r 번째 슬립계의 항복 전단 응력을 $k^{(r)}$ 로 두면 항복 조건은 다음과 같이 나타낸다.

$$\begin{aligned} \zeta^{(r)} \tau^{(r)} &= k^{(r)}, & \zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} &> 0 \\ \zeta^{(r)} \tau^{(r)} &< k^{(r)}, & \zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)} &= 0 \end{aligned} \quad \text{여기서, } \zeta^{(r)} = \text{sign}(\tau^{(r)}) \quad (11)$$

일반적으로 슬립계가 활동적인지를 사전에 판단하는 것은 어렵다. 본 연구에서는 실제 변형 과정에 따라서 연속 누적법(successive integration method)을 사용하였다. 즉, 제 1근사 소성 변형률 증분을 0으로 두고 이 탄성 해에 의한 분해 전단 응력이 슬립계의 항복 응력을 넘는다면 얼마간의 슬립이 발생 할 것이다. 그리고 소성 변형률 증분을 이용하여 가상 외력을 구하고 강성 방정식을 풀어서 제 2근사치를 구한다. 슬립이 일어나면 응력이 완화되어 각 슬립계의 분해 전단 응력이 항복 전단 응력에 근사하게 된다. 이하, 이러한 과정을 반복한다. i 번째 슬립계의 근사치는 다음과 같이 구한다.

$$X_{(i)}^{(r)} = X_{(i-1)}^{(r)} + (\zeta^{(r)} \tau^{(r)} - k^{(r)}) \Delta \rho / (2G), \quad (X_{(0)}^{(r)} = 0) \quad (12)$$

여기서 $X^{(r)} = \zeta^{(r)} \dot{\gamma}^{(r)}$, G 는 강성률, $\Delta \rho$ 는 계산 스텝 폭이다. 모든 슬립계에 대하여 다음과 같은 미분 방정식을 고려한다.

$$2G(dX_r/d\rho) = Y_r - \sum_s A_{rs} X_s = \zeta^{(r)} \tau^{(r)} - k^{(r)} \quad (13)$$

만약 분해 전단 응력이 임계 항복 응력을 넘어서면 슬립계는 항상 슬립 증분을 축적하게 된다.

3. 슬립계와 쌍정계

육방 조밀 격자의 결정 구조를 가지고 있는 마그네슘 재료의 소성 변형시 발생하는 슬립계와 쌍정계에 대한 변형 기구와 각 슬립계에서 발생하는 항복 전단 응력에 대해서 많이 알려져 있다.⁽²²⁻²⁴⁾ 마그네슘 결정에서 주요 변형 기구는 그림 1에서 보듯이 $\{0001\} \langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ 기저면 슬립(basal slip), $\{10\bar{1}0\} \langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ 주면 슬립(prismatic slip), $\{10\bar{1}1\} \langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ 추면 슬립(pyramidal slip) 그리고 $\{10\bar{1}2\} \langle \bar{1}011 \rangle$ 신장 쌍정(stretch twin) 이다.

실험 결과에 따르면 기저면 슬립 모드 $\{0001\} \langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ 의 항복 전단 응력은 비기저면 슬립(non basal slip)과 쌍정 모드의 값보다 많이 낮다고 알려져 있다. 기저면 슬립 모드가 단지 두 개의 독립 슬립계를 제공하기 때문에 von Mises 조건을 만족시키기 위해서는 경화(hard), 비기저면 슬립 그리고 쌍정이 활동해야 한다.

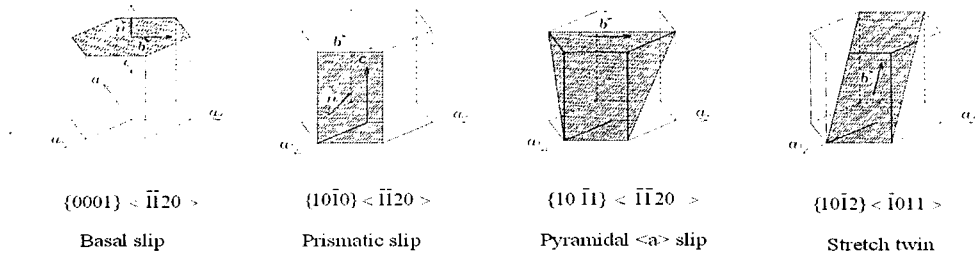


Fig. 1 Main deformation mechanisms in magnesium crystals

순수 육방 조밀 격자 금속에 대해서 집합 조직 발생은 c/a 의 비율에 강하게 의존한다. 여기서 c 는 육방 조밀 격자의 높이이고 a 는 육각형의 측면 길이이다. c/a 의 비가 이상적인 값인 1.633에 거의 가까운 1.622를 가지는 마그네슘에 대해서는 주로 기저면 조직이 관찰된다.⁽²⁵⁻²⁷⁾ 아연($c/a=1.856$) 또는 카드뮴($c/a=1.886$)과 같이 c/a 의 비가 높은 hcp 금속의 경우는 압연 방향에 대해 수직 방향으로부터 약 $\pm 15^\circ$ 부터 $\pm 25^\circ$ 까지 기울어진 기저면 극점도(pole figure)의 조직이 나타난다. 이와 반대로, 티타늄과 같이 이상적인 값보다 낮은 c/a 의 비를 갖는 금속은 직각 방향에서 기저면의 극점도가 흩어져 있다.

3.1 슬립 모드의 전단 응력

기저면 슬립 모드는 $\{0001\}\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle$ 이며 Sheeley 등⁽²⁸⁾에 따르면, 순수 마그네슘의 항복 전단 응력은 0.5 ~ 0.8 MPa이다. 그러나 AZ31B 마그네슘 합금은 기저면에서 항복 응력을 증가시키기 위해서 아연을 첨가하였기 때문에 항복 전단 응력은 온도에 관계없이 약 2 MPa로 평가되고 있다. 한편 비기저면 슬립계의 경우에 주면 슬립 모드는 $\{10\bar{1}0\}\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle$ 이고 추면 $\langle a \rangle$ 슬립 모드는 $\{10\bar{1}1\}\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle$ 이다. 이 경우에 항복 전단 응력은 온도에 의해 민감하게 영향을 받고 상온에서는 급속하게 가공경화 현상을 나타낸다. 본 연구의 대상은 주로 200°C 이상의 온도에서 고려되었기 때문에 가공 경화 현상은 무시하였으며 Yoshinaga 등⁽²⁹⁾에 따라 약 4% 변형률에서의 항복 응력 값을 고려하였다. 한편 신장 쌍정 모드는 $\{10\bar{1}2\}\langle\bar{1}011\rangle$ 이며 이때 기하학적인 변형률은 다음의 식에 의해 주어진다.

$$\gamma_o = \frac{\sqrt{3}a}{c} - \frac{c}{\sqrt{3}a} = 0.129 \quad \left(\frac{c}{a} = 1.624\right) \quad (14)$$

국부 응력 집중이 쌍정 발생에 영향을 많이 주기 때문에 쌍정에 대한 항복 응력을 실험적으로 증명하기가 어렵다. 따라서 본 연구에서는 Agnew 등⁽²⁵⁾이 제안한 「신장 쌍정의 항복 응력 값은 기저면 슬립계의 항복 응력 값에 두 배다」라는 가정을 적용하였다.

c -축 수축에 대한 지배적인 변형기구가 몇몇 학자들에 의해 제안되었는데 여기서는 다음의 두 가지 모델을 적용하였다: (1) 추면 $\langle a+c \rangle$ 슬립 모드는 $\{\bar{1}\bar{1}22\}\langle 1\bar{2}13 \rangle$ 이다. Obara 등⁽³⁰⁾은 이 슬립 모드를 c -축 압축을 받고 있는 마그네슘에서도 관찰하였다고 보고하였다. 여기서 그들은 추면 $\langle a+c \rangle$ 전위의 밀도가 처음 증가할 때 항복 전단 응력에 달한다고 하였다. 이러한 자료들은 항복이 시작되는 순간에서의 값들이지만 유동 응력은 이들 보다 더 높다. (2) 수축 쌍정(shrink twin) 모드는 $\{10\bar{1}1\}\langle 10\bar{1}\bar{2} \rangle$ 와 $\{10\bar{1}3\}\langle 30\bar{3}\bar{2} \rangle$ 이다. Reed-Hill⁽³¹⁾은 서로 상대적인 이중 쌍정 모드를 제안하였다. 즉, 그 하나가 K_1 면이고 다른 하나가 K_2 면이라는 것이다. 기하학적인 변형률은 다음의 식으로 주어진다.

$$\gamma_o = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{c}{a} - \frac{9a}{4c} \right) = 0.138 \quad (15)$$

수축 쌍정 발생시에 항복 전단 응력 값은 확실하지 않다. Yoshinaga 등⁽³²⁾은 c-축 압축에 대한 4% 변형률에서 항복 전단 응력 값을 평가함으로써 응력-변형률 곡선을 얻었다. 본 연구는 이러한 데이터들을 c-축 압축 변형 기구를 예측하기 위하여 추면 <a+c>슬립 또는 수축 쌍정에서의 주요 변형 기구에 대한 항복 응력 값으로 적용하였다. 표 1에 각 슬립 모드와 쌍정 모드에 해당하는 항복 전단 응력(MPa)값들을 나타내었다.⁽²⁸⁻³²⁾

Table 1 Yield shear stress(MPa) for each slip mode

	basal slip	non-basal slip	stretch twin	pyramidal <a+c>	shrink twin
Room Temp.	2	70	4	40	170
200°C	2	30	4	23	50
400°C	2	2	4	4	16

4. 유한 요소 계산

4.1 수치적 절차

그림 2는 초기 압연 방향(RD), 수직방향(TD) 그리고 직각방향(ND)에 의해 각각 정의되는 좌표 (x, y, z)를 가지는 다결정 모델을 나타낸다. 각 결정은 육면체 형상을 가지고 각각 다른 방위를 가지는 N(6×6×6) 결정체로써 하나의 블록을 형성한다. 따라서 동일한 블록들이 각 방향으로 무수히 많이 나열되어 있으며 하나의 다결정 집합체를 모사할 수 있다. 유한 요소 해석에 적용된 경계 조건은 블록 표면에 평면 변형 압축의 상태를 가정하여 균일 경계 조건을 적용하였다.⁽¹⁶⁾

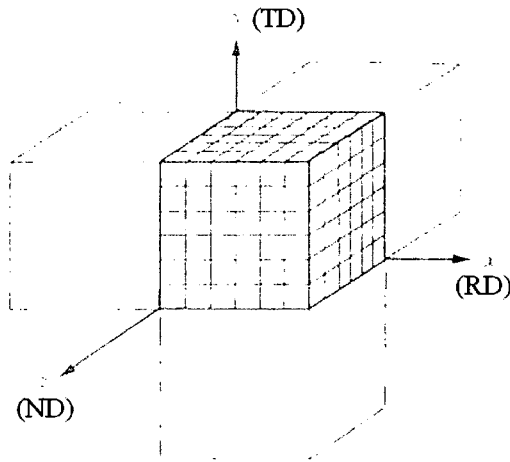


Fig. 2 Polycrystal model

마그네슘 합금 AZ31B 판재에 대한 해석을 위해서 AZ31B판재의 물성 값으로써 E=45GPa, G=17GPa, ν=0.32로 가정하였다. 수학적 회전 규칙에 따라서 슬립에 의한 격자 회전은 다음과 같다.

$$w_{ij}^r = w_{ij} - w_{ij}^p \quad (16)$$

여기서 w_{ij} 는 스핀 텐서이고 w_{ij}^p 는 소성 스핀 텐서이다. 쌍정에 의한 격자 회전은 다음 식에 따라서 쌍정면 수직 둘레로 반회전(180°)하였다.

$$R_{ij} = 2n_i n_j - \delta_{ij} \quad (17)$$

여기서 R_{ij} 는 회전 텐서이고 n_i 는 쌍정면에 수직인 단위 벡터이고 δ_{ij} 는 단위 텐서이다. 쌍정된 부분의 체적 비를 f 로 나타내면 쌍정 변형율의 증가는 다음과 같이 표현된다.

$$d\gamma_o = \gamma_o df \quad (18)$$

본 연구에는 결정의 전체 체적의 값 f 가 1에 달하였을 때 쌍정 회전을 적용하였으며 이 순간에 결정을 새롭게 생성된 결정으로 간주하고 f 를 다른 쌍정계와 함께 영으로 두도록 하였다.

4.2 압연에서의 극점도 모사

마그네슘 합금 판재 AZ31B의 압연 공정의 예로써 400°C 열간 압연에서 120mm 두께를 수치적 평면 변형 압축 시켜 2.5mm 두께로 하였고(98% 두께 감소율에 해당), 200°C 마무리 압연으로 2.5mm 두께를 1mm 두께로 압축하는 공정에 대해서 해석하였다. 그림 3은 X-선 회절에 의해 측정된 {0001}면에서의 극점도를 보여주고 있다.

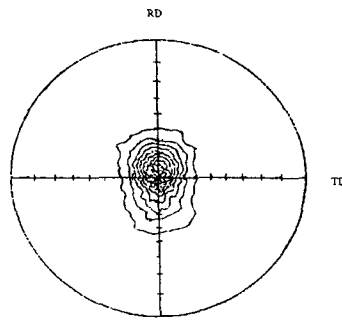


Fig. 3 {0001} Pole figures

마그네슘 합금 판재의 압연 집합 조직을 예측하기 위한 유한 요소 다결정 모델의 적용에 있어서 마그네슘 재료의 소성 변형 기구에 대한 슬립과 쌍정 기구가 아직 알려져 있지 않기 때문에 본 연구에서는 각각의 변형기구가 독립적으로 또는 복합적으로 작용한다는 가정 하에 집합조직을 예측하여 보았다. 해석에서는 기저면 슬립, 비기저면 슬립과 신장 쌍정의 기본 변형기구는 항상 고려하고 c-축의 수축에 대한 변형 기구에 대해 연구하였다. 그림 4는 추면 <a+c>슬립계를 고려한 수치적 결과를 나타낸다. 슬립과 쌍정계에서 변형률(전단 변형율의 합)의 비율은 극점도 옆에 나타내었으며 링 타입의 극점도를 볼 수 있다.

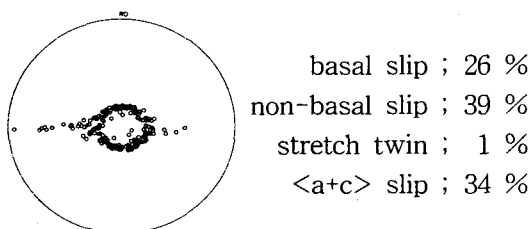


Fig. 4 Pole figure for only pyramidal <a+c>

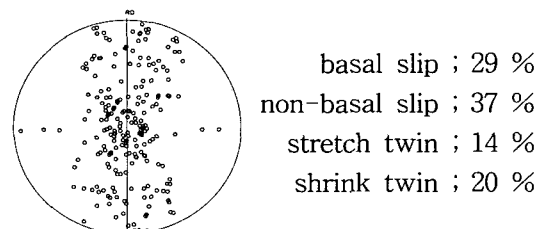


Fig. 5 Pole figure for only stretch twin

다음에는 기본 변형기구와 수축 쌍정이 작용하고 있을 때의 결과를 그림 5에 나타냈다. 수축 쌍정으로 인한 격자 회전이 압연 축을 따라서 극을 흩어지게 하는 것을 볼 수 있다. 기본 변형 기구와 추면 <a+c> 슬립계와 수축 쌍정의 조합을 고려한 결과를 그림 6에 나타내었다. 그림 4 ~ 그림 6을 비교하여 극 중심에 집합조직이 모여 있는 특징을 갖는 마그네슘 합금 판재의 집합조직의 예측을 위해서는 <a+c> 슬립의 도입이 필수인 것을 알 수 있다. 이는 곧 마그네슘 합금 판재의 소성 변형 기구의 표현에는 <a+c> 슬립이 중요한 역할을 한다는 것을 의미한다.

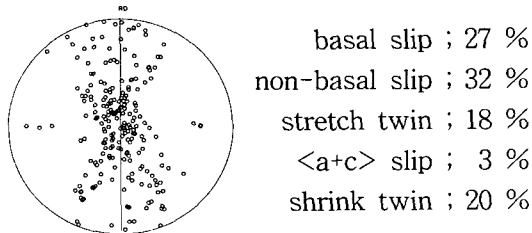


Fig. 6 Pole figure for combination of pyramidal<a+c>and shrink twin

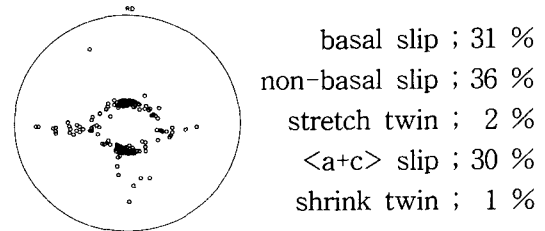


Fig. 7 Pole figure for $k_t=1.3k_s$

수축 쌍정에 의한 격자 회전의 결과는 극들이 중심 주위에 모여 있지 않고 중심에서 멀리 떨어져 있음을 보여준다.(56° 또는 64°) 비록 수축 쌍정이 극들이 흩어지는 것에 기여한다 할지라도 수축 쌍정이 c-축 수축에 주요 변형 기구가 될 수 없다. 그러므로 수축 쌍정의 항복 응력 값은 추면 <a+c> 슬립계의 항복 응력 값보다 커야만 한다. 그림 7은 k_t 가 수축 쌍정의 임계 응력이고 k_s 가 <a+c>슬립계의 임계 응력인 경우에 $k_t=1.3k_s$ 의 결과를 나타내고 있다. 약간의 쌍정에 의해 극점도의 형태가 링 모양으로 변하는 것을 확연히 알 수 있다. 그리고 극점도의 형상이 McDonald 등⁽³³⁾에 의해 실험적으로 관찰되어진 이중 피크 형상을 이루고 있음을 알 수 있다. Agnew 등⁽²⁵⁾은 추면 <a+c> 슬립계를 Self-consistent 모델로 고려함으로써 압연조직을 예측하였으나 약 30%의 변형을 내에서 제한된 결과를 보였다.

5. 재결정

재료는 압연 후에도 여전히 고온 상태로 남아 있게 되고 제하(unloading) 상태에서 재결정(recrystallization) 과정이 일어나면서 재료의 강도, 경도와 같은 기계적 성질이 변한다. 그러나 위의 결과에서는 제하 상태에서 일어나는 재결정 과정에 대한 고려를 하지 않았기 때문에 실질적으로 재결정이 일어나는 상태에서의 각 결정립들의 방향이라고는 할 수 없다. 그래서 본 연구에서는 마그네슘 합금 AZ31B 압연 판재의 재결정 과정 후의 각 결정립들의 방향을 예측하기 위해서 전산 모사에 재결정 과정을 적용하였다. 이러한 재결정 과정에 대한 연구로는 Liu⁽³⁴⁾등은 AA 5182 알루미늄 합금에 대하여 재결정 조직 발생에 대하여 연구하였고 Solas 등⁽³⁵⁾은 Monte Carlo 알고리즘을 이용하여 아연의 재결정 조직을 모사하였다. 본 연구에서는 Lee⁽³⁶⁾가 제안한 「절대 최대 응력 방향은 변형을 에너지를 감소시키는 결정의 최소 탄성 계수의 방향이 될 것이다」라는 '최대 에너지 제하 이론'을 적용하였다.

즉, 압연 후의 잔류 응력 σ_{ij}^r 는 $\sigma_{ij}^r = \sigma_{ij} - S_{ij}$ 에 의해 얻어진다. 여기서 σ_{ij} 와 S_{ij} 는 각각 미시적 응력과 거시적 응력이다. 이러한 잔류 응력의 주 응력 값은 다음과 같이 얻어진다.

$$\sigma^{(k)} = \frac{I_1}{3} + 2\sqrt{p} \cos\left(\alpha + \frac{2(k-1)\pi}{3}\right), \quad k=1, 2, 3 \quad (19)$$

$$\text{여기서, } p = \frac{I_1^2}{9} - \frac{I_2}{3}, \quad q = \frac{I_3}{2} + \frac{I_1^3}{27} - \frac{I_1 I_2}{6}, \quad \cos 3\alpha = \frac{q}{\sqrt{p^3}}$$

주 응력 방향 단위 벡터 $n_i^{(k)}$ 는 각 주 응력에 따라서 결정된다. 주 응력의 절대 값의 최대값을 σ^I 로, 최소값을 σ^{III} 로 표시하고, $|\sigma^{(k)}|$ 에 대응하는 주 방향을 각각 n_i^I, n_i^{III} 로 나타낸다. c-축에서 ϕ 각도를 이루는 방향으로 단축 인장 응력 σ 를 가하는 경우를 생각하면 최소 탄성 계수 (minimum elastic modulus)를 갖는 방향 ϕ_0 는 다음 식으로 주어진다.

$$\cos 2\phi_0 = \frac{c_{33}^{-1} - c_{11}^{-1}}{2c_{13}^{-1} + c_{44}^{-1} - c_{11}^{-1} - c_{33}^{-1}} \quad (20)$$

즉, $\phi_0 = 53^\circ$ 이다. 따라서 하중 방향에서 인장 변형률을 최대로 하는 ϕ_0 에 수직인 면에서 얻어지는 최대 탄성 계수의 방향은 x-축(기저면의 방향)이다. Lee⁽³⁶⁾의 이론에 따라 절대 최대 응력 방향 n_i^I 는 ϕ_0 방향과 일치하여야 하고 절대 최소 응력 방향 n_i^{III} 은 기저면에 놓여 있어야만 한다.

재결정 후의 c-축 방향을 $c_i(\sin \phi \cos \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \phi)$ 로 나타내면 오일러 각 ϕ 와 θ 는 다음의 두 식에 의해 결정된다.

$$\sum_{i=1}^3 c_i n_i^I = \cos \phi_0, \quad \sum_{i=1}^3 c_i n_i^{III} = 0 \quad (21)$$

세 번째 오일러 각 ψ (c-축 주위의 회전)은 무작위로 결정된다.

그림 8은 압연 공정에서 모든 결정이 재결정이 되었다는 가정 하에 98% 압축 후의 재결정 조직을 나타내고 있다. 재결정 과정을 고려하지 않은 결과들에 비해 극들이 중앙부 주위에 잘 형성하고 있음을 볼 수 있으나 극들이 중앙부 주위에 많이 위치되는 극부화가 강한 것 같다.

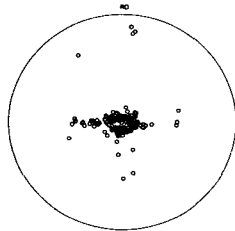


Fig. 8 Pole figure for recrystallization after rolling

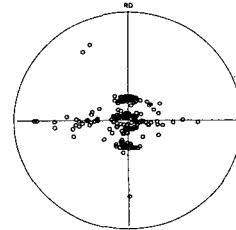


Fig. 9 Pole figure for recrystallization ($u_c = 0.05 \text{ MJ/m}^3$) after rolling

Lee⁽³⁶⁾가 지적한바와 같이 재결정을 일으키는 구동력은 저장된 변형률 에너지이다. 본 연구에서는 잔류 응력에 의한 탄성 변형률 에너지가 한계 값인 u_c 의 값을 초과하는 결정들에 대해서만 재결정을 적용하였다. 그림 9는 $u_c = 0.05 \text{ (MJ/m}^3\text{)}$ 로 계산한 결과를 보여주고 있다. 일반적으로 98%의 수축의 압연 공정은 몇 단계의 압연 공정에서 행해지며 단계별 공정을 지나는 동안 재결정이 일어나기 때문에 위의 결과는 실질적인 극점도와 일치한다고는 할 수 없지만 충분히 타당성이 있다고 볼 수 있다.

6. 결론

본 연구는 다른 결정 조직에 비해 작동하는 슬립계가 적어서 소성 변형이 용이하지 않은 육방

조밀 격자의 결정 구조를 갖는 마그네슘 합금 AZ31B 압연 판재에 대해서 유한 요소 다결정 모델을 이용하여 c-축 수축에 대한 변형 기구를 예측하였다. 쌍정에 의한 격자 회전이 c-축에 대해서 ND(판의 수직방향)에 평행하게 되지 않기 때문에 수축 쌍정으로 인해 결정들의 방향이 판재의 수직 방향에 대해 흩어져 있다 할지라도 c-축 수축에 대한 주요 변형 기구가 될 수 없음을 알 수 있었다. 그리고 추면 <a+c> 슬립계를 가지는 변형 집합 조직은 중심에 구멍을 가지는 링 형태의 극점도를 나타내며 극 중심에 집합조직이 모여 있는 특징을 갖는 마그네슘 합금 판재의 집합조직을 예측하는데 중요한 역할을 한다는 것을 확인할 수 있었다. 고온에서의 소성 변형 기구 예측을 위하여 재결정 모델을 도입함으로써 결정들의 방향이 중심(ND에 평행한 c-축) 주위에 잘 집중되어 있음을 볼 수 있었다.

후기

본 연구는 2004년도 두뇌한국 21사업의 연구비 지원에 의해 행해졌으며 이에 관계자 제위께 감사드립니다.

참고문헌

1. Kojima, Y. Aizawa, T., Kamado, S. and Higashi, K. Proc. of Mg alloys 2003, p. 3.(2003)
2. Doege, E. and Droder, K., J. of Materials Processing Technology, Vol. 115, p. 14.(2001)
3. Chen, F.K. and Huang, T.B., J. of Materials Processing Technology, Vol. 142, p. 643.(2003)
4. Chen, F.K. and Huang, T.B. and Chang, C.K., Int. of Machine Tools & Manufacture, Vol. 43, p. 1553.(2003)
5. Sachs, G., Z. Verein Deut. Ing., Vol. 72, p. 734.(1928)
6. Taylor, G.I., J. Inst. Metals., Vol. 62, p. 307.(1938)
7. Bishop, J.F. and Hill, R., Phil. Mag. Vol. 42, p. 414.(1951)
8. Chin, G.Y. and Mammel, W.L., Trans. AIME, Vol. 245, p. 1211.(1969)
9. Kocks, U.F., Met. Trans., Vol. 1, p. 85.(1970)
10. Canova, G.R., Kocks, U.F. and Joans, J.J., Acta Metall., Vol. 32, p. 211.(184)
11. Hutchinson, J.W., Proc. R. Soc. Lond. Vol. A348, p. 101.(1976)
12. Pan, J. and Rice, J.R., Int. J. Solids Struct., Vol. 19, p. 973.(1983)
13. Peirce, D., Asaro, R.J and Needleman, A., Acta Metall., Vol. 31, p. 1951.(1983))
14. Asaro, R.J. and Needleman, Acta Metall., Vol. 33, p. 923.(1985)
15. Kalidindi, S.R., Bronkhorst, G.A. and Anand, L., J. Mech. Phys. Solids, Vol. 40, p. 537.(1992)
16. Takahashi, H. Motohashi, H., Tokuda, M. and Abe, T., Int. J. Plast., Vol. 10, no. 1, p. 63.(1994)
17. Choi, C.H., Kim, K.H. and Lee, D.N., Materials Science Forum, Vol. 273-275, p. 392. (1998)
18. Han, J.H., Oh, K.H., Jee, K.K., Chung, Y.H. and Shin, M.C., Material Science Forum, Vol. 408-412, p. 679.(2002)
19. Dawson, P.R. and Marin, E.B., Advances in Applied Mechanics, Vol. 34, p. 77.(1998)
20. Hill, R., J. Mech. Phys. Solis, Vol. 15. p. 79.(1967)
21. Aravas, N. and Aifantis, E.C., Int. J. Plast., Vol. 7. p. 141.(1991)
22. Kelley, E.W. and Hosford, W.F., Trans AIME, Vol. 242, p. 654.(1968)
23. Stohr, J.F. and Poirier, J.P., Philos Mag, Vol. 25, p. 1313.(1972)

24. Ando, S. and Tonda, H., *Mater Sci Forum*, Vol. 350-351, p. 43.(2000)
25. Agnew, S.R., Yoo, M.H. and Tome, C.N., *Acta Mater*, Vol. 49, p. 4277.(2001)
26. Agnew, S.R., In: Kaplan, HI, editor. *Proc Magnesium Technology 2002*, TMS, p. 169.(2002)
27. Rollet, A.D., and Wright, S.I., In:Kocks, U.F., Tome, C.N., Wenk, H.R., editors. *Texture and anisotropy*; p. 179.(1998)
28. Sheely, W.F. and Nash, R.R., *Tran. AIME*, Vol. 218, p. 416.(1960)
29. Yoshinaga, H. and Horiuchi, R., *Trans. JIM*, Vol. 5, p. 14.(1963)
30. Obara, T., Yoshinaga, H. and Morozumi, S., *Acta Metallurgica*, Vol. 2, p. 845.(1973)
31. Reed-Hill, R.E., *Trans. Metallurg. Soc. AIME*, Vol. 218, p. 554.(1960)
32. Yoshinaga, H. and Horiuchi, R., *Trans. JIM*, Vol. 4, p. 1.(1963)
33. McDonald, J.C. and Bakarian, P.W., *Trans. Metallurg. Soc. AIME*, Vol. 233, p. 95.(1965)
34. Liu, W.C., Zhai, T. Man, C.S. and Morris, J.G., *Scrip. Mater.*, Vol. 49, p. 539.(2003)
35. Solas, D.E., Tome, C.N., Engler, O. and Wenk, H.R., *Acta Mater*. Vol. 49, p. 3791.(2001)
36. Lee, D.N., *Scripta Metallurgica et Materials*, Vol. 32, p. 1689.(1995)