

Mechanism-based Strain Gradient Plasticity 를 이용한 나노 인덴테이션의 해석

이헌기*(포항공대 대학원 기계공학과), 고성현(포항공대 대학원 기계공학과)
한준수(포항공대 대학원 기계공학과), 박현철(포항공대 기계공학과),

Analysis of the nano indentation using MSG plasticity

H. K. Lee(Mecha. Eng. Dept. POSTECH), S. H. Ko (Mecha. Eng. Dept., POSTECH)

J. S. Han(Mecha. Eng. Dept. POSTECH), H. C. Park(Mecha. Eng. Dept. POSTECH)

ABSTRACT

Recent experiments have shown the 'size effects' in micro/nano scale. But the classical plasticity theories can not predict these size dependent deformation behaviors because their constitutive models have no characteristic material length scale. The Mechanism - based Strain Gradient(MSG) plasticity is proposed to analyze the non-uniform deformation behavior in micro/nano scale. The MSG plasticity is a multi-scale analysis connecting macro-scale deformation of the Statistically Stored Dislocation(SSD) and Geometrically Necessary Dislocation(GND) to the meso-scale deformation using the strain gradient. In this research we present a study of nano-indentation by the MSG plasticity. Using W. D. Nix and H. Gao's model, the analytic solution(including depth dependence of hardness) is obtained for the nano indentation, and furthermore it validated by the experiments.

Key Words : Mechanism - based Strain Gradient(MSG) plasticity, Size effect, Nano indentation, Statistically Stored Dislocation(SSD), Geometrically Necessary Dislocation(GND)

1. 서론

21 세기에 접어들면서 전 세계적으로 나노 기술의 개발 경쟁이 가속화 되고 있으며, 나노 기술의 발전은 IT, BT, ET 등과 함께 각 나라의 국가 핵심 전략산업으로 급성장하고 있으며 국가 경쟁력 확보에 중요한 영향을 미칠 것이 전망된다. 근래에 나노 기술에 대한 많은 연구로 인하여 이론들이 정립되어 가고는 있으나, 아직은 부족한 실정이다.

최근에 여러 마이크로 크기의 비균일 소성변형을 일으키는 실험에서 큰 사이즈 효과가 보여지고 있다. 예를 들면 나노 인덴테이션(nano indentation) 실험은 인덴테이션 깊이가 증가할수록 물질의 경도가 감소함을 보여준다.(Nix, 1989 ; De Guzman, 1993 ; Stelmashenko, 1993 ; Atkinson, 1995 ; Ma and Clarke, 1995) 마이크로 단위의 지름을 가진 구리 와이어의 비틀림 실험에서도 와이어 지름이 감소할수록 전단강도가 증가하는 현상이 나타나며(Fleck, 1994), 두께가 얇은 보의 굽힘

실험에서도 두께가 얇아질수록 그 강도가 증가함이 나타난다.(Stolken and Evans, 1998)

파괴에서도 이러한 사이즈 효과를 볼 수 있다. crack tip field 에서 고전역학(HRR field, K field)을 이용하여 해석한 크랙 주위의 응력상태가 실제 크랙이 발생하기 위한 분자간의 분리 응력과는 차이가 있음이 실험으로 밝혀졌다.(Elssner, 1994)

고전역학은 나노/마이크로 사이즈에서의 이러한 사이즈 효과를 설명할 수 없다. 이것은 고전역학의 구성방정식이 물질의 변형에 대한 내부길이(internal length)를 변수(parameter)로 가지고 있지 않음에서 기인하였다고 할 수 있다. 이렇게 고전의 이론으로 설명이 되지 않는 나노/마이크로 크기의 변형 해석을 위해 여러 이론이 제시 되었는데, 그 중 하나가 MSG(mechanism - based strain gradient) plasticity 이며 이 이론은 사이즈 효과를 잘 설명하고 있다.

변형을 구배 소성이론(Strain gradient plasticity)도 여러 가지가 있는데 Gao(1999) 와 Huang(2000)이 제안한 MSG 소성이론은 Talyor hardening model 을 기초로 한 전위론을 도입하고 Fleck(1997)이 제안한

Strain Gradient Plasticity 를 수정, 보완하여 나노/마이크로 크기의 변형을 수식적으로 이끌어냈을 뿐 아니라 실험으로 이론을 입증하였다.

본 연구는 MSG 소성이론을 이용하여 인텐테이션 실험에서 나타나는 사이즈 효과를 역학적으로 해석함과 아울러 나노 인텐테이션에 대한 해석적 모델을 제시하였다.

2. MSG 소성 이론의 개요

2.1 전위론

나노/마이크로 크기의 변형과 사이즈 효과를 이해하기 위해서는 미시적인 관점에서의 변형, 즉 전위(dislocation)에 대한 이해가 필요하다. 전위는 무작위로 서로 트래핑(trapping)되거나 기하학적으로 그 형상에 적합한 변형이 이루어지기 위하여 필요할 때 발생한다. 전자를 Statistically Stored Dislocation(SSD)라하고 후자를 Geometrically Necessary Dislocation (GND)라고 한다.

MSG 소성이론은 전술한 바와 같이 소성변형과 관련된 전위를 GND 와 SSD 로 구분(Ashby, 1970)하고 있으며, 변형과 관련된 총 전위 밀도(ρ_T)는 다음과 같이 GND 의 밀도(ρ_G)와 SSD 의 밀도(ρ_S)의 합으로 표시한다.

$$\rho_T = \rho_S + \rho_G \quad (1)$$

Talyor hardening model 을 도입하면

$$\tau = \alpha\mu b\sqrt{\rho_T} = \alpha\mu b\sqrt{\rho_S + \rho_G} \quad (2)$$

이 되고, 여기서 α 는 Talyor 계수, μ 는 전단계수, b 는 버거스 벡터(burgers vector)이다. (2) 식에서 Von mises 항복 조건을 이용하고 Tabor 계수를 3 으로 놓으면 경도는

$$H = 3\sigma = 3\sqrt{3}\tau = 3\sqrt{3}\alpha\mu b\sqrt{\rho_S + \rho_G} \quad (3)$$

이 된다.

2.2 변형률과 응력

Cartesian 좌표를 사용하여 변위(u_i , displacement) 와 변형률(ε_{ij} , strain), 변형률구배(η_{ijk} , strain gradient), 유효변형률(ε , effective strain)과 유효 변형률구배(η , effective strain gradient)를 나타내면 다음과 같다.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad \eta_{ijk} = u_{k,ij} = u_{k,ji} \quad (4-1, 2)$$

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{2}{3}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{1}{4}\eta_{ijk}\eta_{ijk}} \quad (5-1, 2)$$

유동응력(flow stress) σ 는

$$\sigma = \sigma_Y \sqrt{f^2(\varepsilon) + l\eta}, \quad l = 3\alpha^2 \left(\frac{\mu}{\sigma_Y}\right)^2 b \quad (6)$$

이며, 여기서 l 은 특성길이(Characteristic length)이며 σ_Y 는 항복응력이다. 식(2), (3), (6)을 이용하면,

$$\eta = \rho_G b \quad (7)$$

의 관계를 얻을 수 있으며, 이 식은 전위론을 MSG 소성이론과 연결하는 고리가 된다. 그러나 실제 물체에서의 불균일 변형장을 묘사하기 위해서는 Nye 계수를 도입하여 사용하며 FCC 다결정체에 대해서 Nye 계수는 굽힘에서 1.85, 비틀림에서 1.93 을 택하고 있다.(Arsenlis, 1999)

편차 응력(deviatoric stress) 및 고차 편차 응력은 (higher-order deviatoric stress)

$$\sigma'_{ij} = \frac{2\varepsilon_{ij}}{3\varepsilon} \sigma \quad (8)$$

$$\tau'_{ijk} = l^2 \left[\frac{\sigma}{3} (\Lambda_{ijk} - \Pi_{ijk}) + \frac{\sigma_Y^2 f(\varepsilon) f'(\varepsilon)}{\sigma} \Pi_{ijk} \right] \quad (9)$$

가 된다. 여기서 Λ_{ijk} , Π_{ijk} 는 다음과 같다

$$\Lambda_{ijk} = \frac{1}{72} \left[2\eta_{ijk} + \eta_{kji} + \eta_{kij} - \frac{1}{4} (\delta_{ik}\eta_{ppj} + \delta_{jk}\eta_{ppi}) \right],$$

$$\Pi_{ijk} = \frac{\varepsilon_{mnp}}{54\varepsilon^2} \left[\varepsilon_{ik}\eta_{jmn} + \varepsilon_{jk}\eta_{imn} - \frac{1}{4} (\delta_{ik}\varepsilon_{jp} + \delta_{jk}\varepsilon_{ip})\eta_{pnm} \right]$$

2.3 평형방정식

비압축성 물체에 대한 MSG 평형방정식은 다음과 같다(Fleck and Hutchinson, 1997)

$$\sigma'_{ik,i} + \tau'_{ijk,ij} + H_{,k} + f_k = 0 \quad (10)$$

$$H_{,k} = \frac{1}{3}\sigma_{kk} - \frac{1}{2}\tau_{jkk,j} \quad (11)$$

f_k 는 체적력(body force), $H_{,k}$ 는 정수압(hydro static stress) 및 고차 정수압(hydro static high-order stress)을 나타낸다. 고전 역학에서의 평형방정식과 달리 편차 고차응력 및 고차 정수압이 포함되어 있음을 알 수 있다.

3. 나노 인덴테이션

3.1 인덴테이션 모델

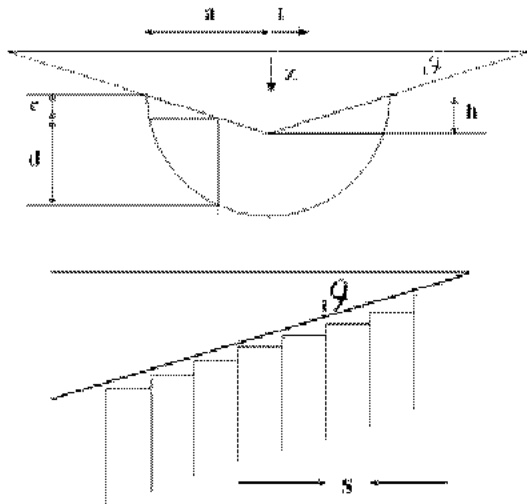


Fig. 1 Simplified indentation model for rigid conical indentation. Plastic zone is assumed to be hemispherical region. The dislocation structure is idealized as circular loops. (W. D. Nix and H. Gao)

본 연구에 사용된 모델은 Fig. 1 과 같이 원뿔형 팁을 가진 인덴테이션을 모델로 하며 Nix 와 Gao(1998), Zhao(2003)와 마찬가지로 인덴테이션 과정 중에 표면에 수직인 방향의 버거스 벡터를 가지는 GND 가 발생하는 것으로 가정한다. Fig. 1 을 참고하면

$$\tan \theta = \frac{h}{a} = \frac{b}{s} \quad (12)$$

이다. 여기서 θ 는 베르코비치 팁(verkovich tip)과 같은 상태를 반영하기 위해 19.7° 로 한다. 팁 아래의 반구(hemisphere) 영역을 소성영역으로 보고 GND 의 밀도를 구하면

$$\rho_G = \frac{\lambda}{V} = \frac{3}{2bh} \tan^2 \theta \quad (13)$$

이다. 여기서 λ 는 GND 의 총 길이이다.

3.2 인덴테이션 해석

Fig. 1 을 참고하여 z 방향의 수직 변형률은

$$e_z = -\frac{c}{c+d} = -\sqrt{\frac{a-r}{a+r}} \tan \theta \quad (14)$$

임을 고려하면 z 방향으로 수직 변위는 다음과 같이 나타내어진다.

$$u_z = -\left(\sqrt{\frac{a-r}{a+r}} \tan \theta\right)z + f(r) \quad (15)$$

본 연구에서는 $r=a$ 일 때 경계조건 $u_z = 0$ 를 만족하고 r 과 z 는 연성(couple)되었다는 조건에서 $f(r) = 0$ 이라고 가정한다. z 방향으로 수직 변위와 관계되는 변형을 구하는 아래 식(16)과 같다.

$$\eta_{rz} = \eta_{zz} = \frac{a}{(a+r)\sqrt{a^2-r^2}} \tan \theta \quad (16-1)$$

$$\eta_{rz} = \frac{-a^2 + 2ar}{(a+r)(a^2-r^2)\sqrt{a^2-r^2}} \tan \theta z \quad (16-2)$$

$$\eta_{\theta z} = \frac{a}{r(a+r)\sqrt{a^2-r^2}} \tan \theta z \quad (16-3)$$

식 (16)의 4개항으로 유효 변형률을 식 (5-2)를 이용하여 그리면 Fig. 2 가 된다.

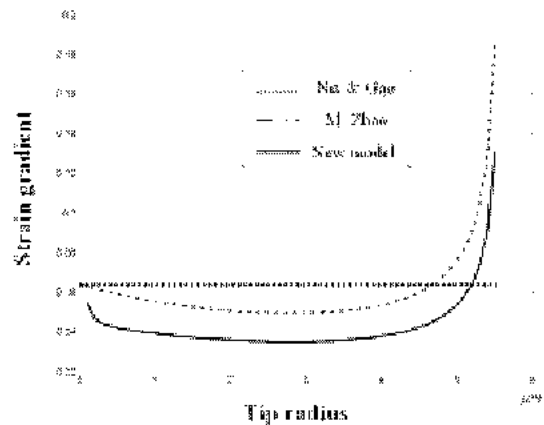


Fig. 2 Predicted non-uniform effective strain gradient when indentation depth is $2 \mu\text{m}$. Z component is obtained from no volume change. $Z=0.119 \mu\text{m}$.

여러 인덴테이션 실험 논문에서 보여지듯이 인덴

테이션 깊이가 2 마이크로 이상일 때, 사이즈 효과는 거의 나타나지 않는다. 이점을 감안하여 본 연구에서도 인테이션 깊이의 최대값을 2 μm 으로 계산하였다.

4. 결과

4.1 실험 및 유동응력과의 비교

지금까지 인테이션 깊이가 증가할수록 경도가 작아지는 인테이션의 사이즈 효과는 MSG 소성 이론의 유동응력을 이용함으로써 계산되었다. 인테이션 깊이에 따른 경도의 변화는 식(3)과 식(6)에 의하여

$$H = 3\sigma_y \sqrt{1 + \frac{9\alpha^2 \mu^2 b \tan^2 \theta}{2h\sigma_y^2 f^2(\epsilon)}} \quad (17)$$

로 나타나는 것이 알려져 있다. 본 연구의 모델을 바탕으로 Tabor 계수를 3 으로 하여 경도를 계산하던

$$H = \frac{3}{\pi a^2} \int_0^a 2\pi r \sigma_y dr \quad (18)$$

이므로 식 (6), (14), (16)을 (18)에 대입하면 본 모델을 이용하여 경도를 예측할 수 있다. 이를 위해선 식 (18)의 수치 적분이 필요한데 그 구간은 위와 마찬가지로 최대 인테이션 깊이를 2 μm 으로 계산하였다. 식(18)에 필요한 물성치는 다결정 구리의 물성치를 이용하였으며, 두 그래프와 다결정 구리 인테이션 실험 결과를 비교하였다.

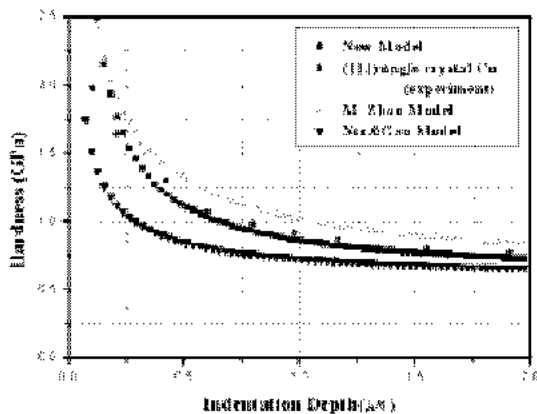


Fig. 3 Depth dependence of the Hardness of (111) single crystal copper VS Predicted Hardness.

Fig. 3 에서 볼 수 있듯이 본 연구의 모델은 다른 어떤 모델보다 정확한 사이즈 효과를 예측함을 알 수 있다. 여기서 실험치는 McElhaney(1997)의 데이

터를 이용하였다.

5. 결론

나노/마이크로 스케일에서는 비균일 소성변형이 발생 할 때 시편 크기에 따라 재료의 물성이 변하는 사이즈효과가 나타난다. 이러한 사이즈 효과를 설명하기 위해 여러가지 이론들이 제안되었다.

본 연구에서 새롭게 제안된 변형률 구배 모델은 Fig.2 에서와 같이 Nix & Gao 모델에서 제시된 모델과 다르게 반경방향으로 변형률 구배 영향이 비균일하게 분포하며, 또한 Zhao 에 의해 제안된 모델과는 변형률 구배를 계산함에 있어 z 방향의 영향을 고려하여 더욱 정확한 예측이 가능하다.

본 논문에서는 MSG(mechanism based strain gradient) 소성 이론을 이용한 새로운 모델에 대해 연성 재료의 나노 인테이션 실험을 수행하여 모델에 대한 신뢰도를 검증하였다. 해석 결과 Fig. 3 에서 나타나듯이 구리의 다결정 시편에 대한 나노 인테이션 실험 결과와 잘 일치함을 알 수 있다.

참고문헌

1. Nix , W. D., "Mechanical properties of thin films," Metall. Trans, Vol. 20A, pp. 2217 - 2245, 1989.
2. De Guzman, M. S., Newbauer, G., "The role of indentation depth on the measured hardness of materials," Materials Research Symposium Proceedings 308, pp. 613-618, 1993.
3. Stelmashenko, N. A., Walls, M. G., Brown, L. M., Milman, Y. V., "Microindentation on W and Mo oriented single crystals : an STM study," Acta Materialia, Vol. 41, pp. 2855 - 2865, 1993.
4. Ma, Q., Clarke, D. R., "Size dependent hardness in silver single crystals," J. Materials Research, Vol. 10, pp. 853 - 863, 1995.
5. Fleck, N. A., Muller, G. M., Ashby, M. F., Hutchinson, J. W., "Strain gradient plasticity : theory and experiment," Acta Metallurgica et Materialia, Vol. 42, pp. 475 - 487, 1994.
6. Stolken, J. S., Evans, A. G., "Micro bend test for measuring the plasticity length scale," 1998.
7. Ellsner, G., Korn, D., Rühle, M., "The influence of interface impurities on fracture energy of UHV diffusion bonded metal-ceramic bicrystals," Scripta Metall, Vol. 31, pp 1037 - 1042, 1994.
8. H. Gao, Y. Huang, W. D. Nix, J. W. Hutchinson, "Mechanism-based strain gradient plasticity - I. Theory," J. Mech. Phys. Solids, Vol. 47, pp. 1239-1263, 1999.

9. H. Gao, Y. Huang, W. D. Nix, J. W. Hutchinson, "Mechanism-based strain gradient plasticity - II. Analysis," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 48, pp. 99-128, 2000
10. N. A. Fleck, J. W. Hutchinson, "Strain Gradient Plasticity", *Advances in applied mechanics*, Vol. 33, pp. 295 – 361, 1997
11. A. Arsenlis and D. M. Parks, "Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density," *Acta Materialia*, Vol 47,, pp 1597-1611, 1999
11. M. F. Ashby, "The deformation of plastically non-homogeneous materials," *Phil. Mag.*, Vol. 21, pp. 399 – 424, 1970
12. W. D. Nix, H. Gao, "Indentation size effects in crystalline materials : a law for strain gradient plasticity," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 46, pp. 411 – 425, 1998
13. Minhua Zhao, William S. Slaughter, Ming Li, Scott X Mao, "Material-length-scale-controlled nanoindentation size effects due to strain-gradient plasticity," *Acta Materialia*, Vol. 51, pp 4461 – 4469, 2003
14. McElhaney, K. W., Vlassak, J. J. and Nix, W. D., "Determination of indenter tip geometry and indentation contact area of depth-sensing indentation experiments," *Journal of Materials Research*, Vol. 13, pp1300-1306, 1997