

중간온도 영역에서의 NiAl 단결정 이상 경화거동에 대한 연구

양철호*(안동대학교 기계공학부)

Investigation of anomalous hardening in NiAl Single crystals at intermediate temperatures

Chulho Yang (School of Mechanical Engineering, ANU)

ABSTRACT

The hardening model based on the dislocation mechanics is employed to study the experimentally observed high tensile elongations of NiAl along the [110] orientation at intermediate temperatures. In the hardening model proposed, a mobility of dislocation is assumed to be restricted to glide through the slip plane by forest dislocation and thermally activated cross-slip event. Overall deformation behavior of NiAl was greatly influenced by temperature-dependent dislocation mobility that both experimental and simulated yield stresses decreased as temperature increased. The results of simulation showed anomalous hardening behaviors analogous to those of experiment at certain circumstances. This behavior occurred due to the hardening contributions generated by cross-slip events that disable the dislocation motion in the primary slip systems. By comparing simulation results with experiments, it is confirmed that the proposed hardening model can represent anomalous tensile elongations due to the hardening by forest dislocations and cross-slip events.

Key Words : single crystals (단결정), dislocation (전위), cross-slip (교차슬립), strain-hardening (변형률경화), FEA (유한요소해석)

1. 서론

NiAl 단결정은 고온 영역에서의 구조 재료로서 연구되어 왔다. 중간온도 영역 ($0.3-0.5T_m$)에서 연방향 (soft orientation)으로의 인장시험은 100-350%의 이례적으로 높은 연신율을 나타내었다.¹ Levit et al. 은 연방향인 [110] 결정방향에서 20~180%의 연신율을 보고하였다.² NiAl 단결정의 전형적인 취성 문제는 이례적인 연신율 현상에 대한 NiAl 단결정의 변형메커니즘의 규명을 통해서 더 나은 설명이 가능할 것이다.

실험에서 관찰된 높은 연신율 현상에 대한 변형메커니즘을 이해하기 위한 많은 노력들이 있었다.^{3,4} 그러나, NiAl 단결정의 경화과정은 다중슬립의 활성화와 온도가 증가함에 따른 단위 메커니즘의 불분명한 이해 때문에 잘 설명되지 못하였다.

본 연구자는 유한요소해석을 통하여 단결정의 경화거동을 연구해왔다.⁵ 기 수행된 연구에서 제안한 경화 모델은 대변형 (large deformation)에서 나타나는 경화의 증가는 부 슬립계 (secondary slip

system) 의 활성화에 의한 것으로 가정하고 모델링을 하였다. 이 모델에서는 잠경화비(latent hardening ratio)에 따른 3 종류의 변형 모드 연구를 통하여 경화현상을 연구하였는데 3 종류의 변형모드 중에서 변형률 민감도 (rate sensitivity) 에 따른 대변형에서의 부 슬립계의 활성화된 경우에서 경화의 점차적인 증가를 보였으나 실험에서 나타난 것과 같이 급격한 경화의 증가를 나타내지는 못하였다.

이 문제에 대한 심도 있는 연구를 위하여 전위역학 (dislocation mechanics) 에 기초를 한 경화 모델을 제안하였다.⁶ 본 연구의 목표는 유한 요소해석을 통하여 단결정의 온도에 따른 경화거동의 이해와 대변형에서 이례적인 경화를 보이는 변형메커니즘을 경화 거동과 연결하여 고찰하고자 한다. 단결정 변형의 운동학 (kinematics) 은 잘 정립되어 있고 사용된 단결정의 구성방정식은 기존의 연구에서 잘 설명되어 있다.⁶

2. NiAl 단결정의 경화모델

단결정의 기계적 거동을 이해하기 위해서는 전위운동에 대한 이해가 필수적이다. 이 연구에서의 관심 내용인 NiAl 단결정의 중간온도에서의 변형은 교차슬립 쌍에 의한 전위의 핀닝 (pinning)과 활주 전위에 의한 것으로 관찰되었다.^{7,8} Peirls 응력은 저온영역에서 높으므로 격자에서 전위의 운동을 제한하지만 온도가 증가함에 따라서 전위의 운동은 활발하게 된다. 그러므로 관심온도영역에서의 전위활주면 상의 전위운동에 대한 격자 저항은 약해질 것이고 지배 경화메커니즘은 수풀전위에 의해서 생성되는 비 연속 장벽 저항(discrete obstacle resistance)과 교차슬립에 의해서 생성되는 조그 (Jog) 일 것이다.

본 연구에서 사용된 전위역학에 기초한 [110] 결정 방향의 경화 모델은 기 수행된 연구에 잘 설명되어 있다.⁶



Fig. 1 Specimen used in the simulation

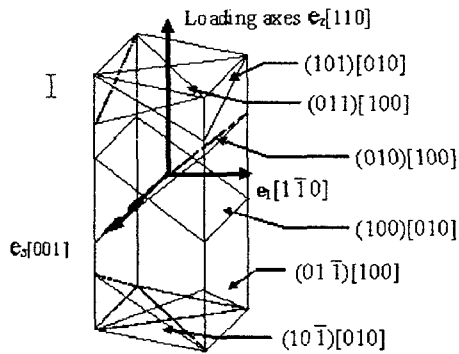


Fig. 2 Active slip systems of NiAl along [110] loading direction

3. FEA 모델링

[110] 결정 방향의 NiAl 단결정의 변형에 대한 연구를 3 차원 유한 요소 모델을 이용하여 수행하였다. 사용된 재료의 물성치는 Table 1 에 정리하였다. 제안된 전위역학기초 경화모델은 상용유한요소

해석 코드인 ABAQUS 의 사용자 서브루틴인 UMAT 에 코딩하여 사용하였다. 사용된 시편의 형상은 Fig. 1 에 나타나 있고 시편은 게이지 길이가 14.6 mm, 단면의 폭이 1.4 mm 두께가 2.1 mm 이다. 변형률 $\dot{\epsilon}=0.001s^{-1}$ 을 적용하였고 같은 크기의 일정 변위율을 시편의 상부면의 절점에 작용하였다. Fig. 2 에는 모델에 적용된 활성슬립계를 나타내었다. (110) 하부면은 하중방향 (축방향)과 $[1\bar{1}0]$ 방향으로 고정되어 있고 시편의 (001) 중간면은 [001]방향으로 움직이지 않게 고정되어 있다. 유한요소모델은 1152 개의 육면체요소 (C3D8 in ABAQUS) 로 구성되어 있고 NiAl 은 이방성 (anisotropy) 성질이 두드러지지 않으므로 재료 거동모델은 등방성 (isotropy) 모델을 사용하였다.⁹ 초기 유동응력은 고려된 두 슬립계인 $(100)\langle 001\rangle$, $(110)\langle 001\rangle$ 에서 거의 같은 것으로 밝혀졌다.¹⁰

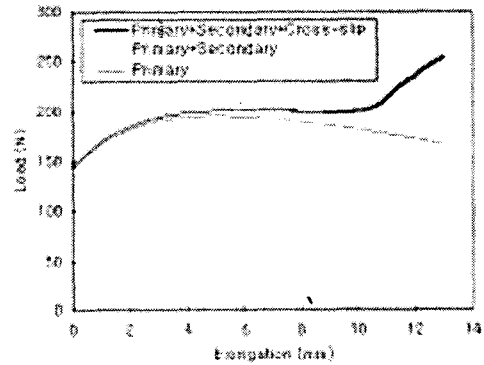


Fig. 3 Simulated load vs. displacement at 673 K

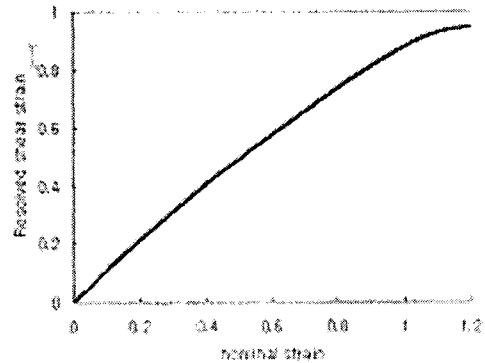


Fig. 4 Resolved shear strain vs. engineering strain (case 1).

4. <110>결정방향의 인장거동

NiAl 단결정 슬립계의 활성화에 따른 가능한 변형모드의 시뮬레이션을 통해서 각각의 슬립계 활성화의 역할에 대한 연구를 진행하였다. [110] 결정방향에서 3 종류의 가능한 변형모드를 다음과 같이

나열하였다.

Case 1) 주슬립계 (100)<001>만이 전체 변형과정에서 나타나는 경우

Case 2) 주슬립계 (100)<001>과 부슬립계 (110)<001>이 경화모델 안에 포함되어 있고 변형과정에서 같이 활성화 되는 것으로 가정하는 경우

Case 3) Case 2 에서 활성화되는 슬립계 외에 열적 효과에 의한 교차 슬립이 주슬립면에서 부슬립면으로 발생하는 경우

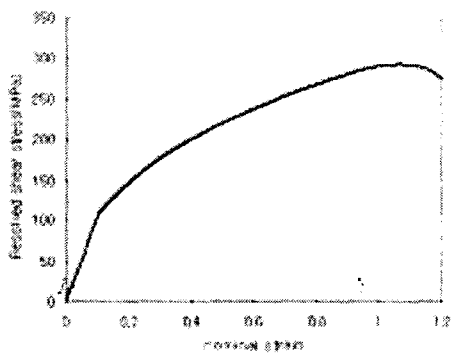


Fig. 5 Resolved shear stress vs. engineering strain (case 1).

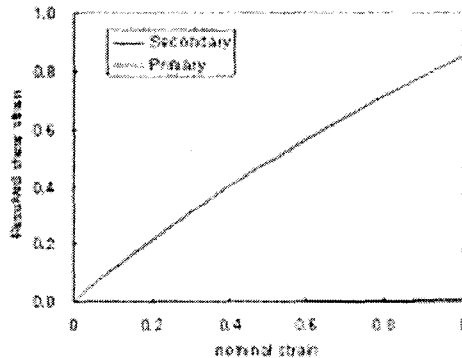


Fig. 6 Resolved shear strain vs. engineering strain (case 2).

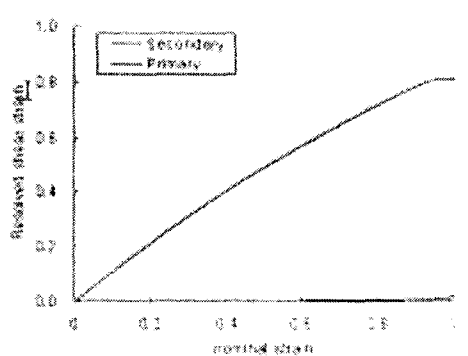


Fig. 7 Resolved shear strain vs. engineering strain (case 3)

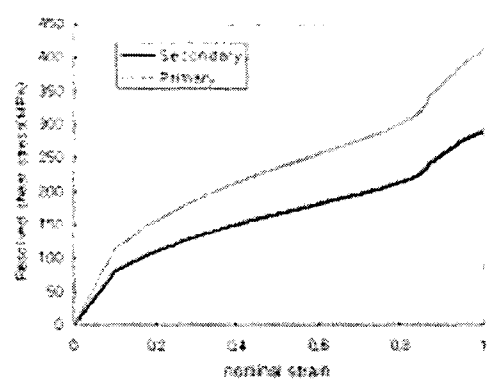


Fig. 8 Resolved shear stress vs. engineering strain (case 3).

Case 1의 경우에는 주슬립계만 포함하므로 하중의 최대점을 지난 후에 경화율이 점점 감소한다. 이는 주슬립면에서의 전위밀도가 포화된 후에 더 이상의 전위의 움직임을 방해할 전위가 생성되지 못하기 때문이다 (Fig. 3). 분해전단변형률곡선의 기울기는 점차 감소하여서 대변형에서 일정값으로 수렴한다 (Fig. 4). 분해전단응력은 항복에 이른 후에 감소한다 (Fig. 5).

Case 2는 대변형에서 주슬립계의 전위밀도 포화후에 부슬립계가 활성화되는 경우이다 (Fig. 6). 그러나 부슬립계의 활성화에 따른 경화율의 증가는 대변형에서 충분한 경화율의 증가를 가져오지 못한다 (Fig. 3). 부슬립계가 활성화되었을 때의 불충분한 변형을 경화하는 주슬립계의 분해전단변형률을 비활성화 시키지 못하였다 (Fig. 6).

Case 3는 대변형에서 부슬립계의 활성화와 더불어 나타나는 열적활성화에 따른 교차슬립에 의한 경화율 증가를 보여준다 (Fig. 3). 부슬립계와 열적활성화에 따른 교차슬립의 활성화는 주슬립계에서의 슬립의 활주를 방해하므로 주슬립계의 전단활주는 비활성화된다 (Fig. 7). 그러므로 시편의 주슬립면 (100)에서의 분해전단응력은 항복이 일어난 후에도 부슬립과 교차슬립으로부터의 전위 밀도 증가에 의해서 증가하며 시편은 경화된다 (Fig. 8).

5. 결론

[110] 결정방향에서의 NiAl 단결정이 보이는 이상 경화거동을 제안된 전위기초 경화모델을 사용하여 연구하였다. 시뮬레이션을 통한 변형거동은 작동온도에 의해서 큰 영향을 받을 수 있었다. 중간온도영역에서는 교차슬립의 활성화가 실험에서 관찰되었고 이를 바탕으로 3 종류의 변형모드를 고

려하였다. Case 3, 즉 대변형에서의 열적 활성화에 의한 교차슬립, 의 경우에서 실험에서 관찰된 경화률의 증가를 관찰할 수 있었다. 실험에 의한 하중-변위곡선은 시뮬레이션 결과와 정확한 일치는 보이지 않지만 같은 경향을 보여주었다. 그러므로 주슬립, 부슬립의 상호 운동에 의한 수플전위와 열적 활성화에 의한 교차슬립이 [110] 결정방향에서의 변형거동을 제어하는 지배 메커니즘임을 알 수 있었다.

Table I Material parameters for the simulations

Parameters	value
$E_{\langle 110 \rangle}$ (Young's modulus in $\langle 110 \rangle$ loading)	171.53 (GPa)
Poisson's ratio	0.3215
Boltzman constant	1.380622×10^{-23} (J/K)
τ_0 (initial critical resolved shear stress)	26 (MPa)
m (strain rate sensitivity)	0.04
ρ_0 (initial dislocation density)	10^{10} (m ⁻²)
ρ_{sat} (saturated dislocation density)	10^{13} (m ⁻²)
γ_{sat} (saturated shear strain)	0.05
b (magnitude of Burgers vector)	2.88×10^{-10} (m)
L_0 (mean free path between cross-slip events)	5.0×10^{-10} (m)
ΔF (Helmholtz free energy at $\tau^* = 0$)	6.313×10^{-19} (J)
p, q (exponents in activation energy ΔG)	0.5, 1.2
$\tau_0^{(\alpha)}$ (flow stress at 0K)	700 (MPa)
μ_0 (shear modulus at 0K)	73.8(GPa)

후 기

이 논문은 2003 년도 안동대학교 학술연구조성비에 의하여 연구되었음.

참고문헌

1. Takasugi, T., Kashino, J., and Hanada, S., "Anomalous elongation behavior of stoichiometric NiAl single crystals at intermediate temperatures," *Acta Metall. Mater.*, Vol. 41, no. 4, pp. 1009-1020, 1993.
2. Levit, V.I., Winton, JS, Yu, G, and Kaufman, M.J., "Mechanisms of high tensile elongation in NiAl single crystals at intermediate temperatures," *Proceedings Of the Rex 96, the Third International Conference on Recrystallization and related Phenomina*, Edited by McNelley, T., Monterrey, CA, pp 637-644, 1996.
3. Crimp, M. A., Tonn, S. C., and Zhang, Y., "Dislocation

core Structures in B2 NiAl alloys," *Mater. Sci. Eng.*, A170, pp. 95-102, 1993.

4. Ebrahimi, F., Shrivastava, S., "Crack initiation and propagation in brittle-to-ductile transition regime of NiAl single crystals," *Mater. Sci. Eng.*, A239-240, pp. 386-392, 1997.
5. Yang, C., Kumar, A.V., "Investigation of strain hardening in NiAl single crystals using three-dimensional FEA models," *J. Eng. Mat. and Tech. Trans. of ASME*, Vol. 123, no. 1, pp. 20-27, 2001.
6. Yang, C., "Study of anomalous hardening in NiAl single crystals at intermediate temperatures by FEA," submitted to the *Int. J. of Mechanical Sciences*, 2005.
7. Ghosh, B., Crimp, M.A., "Study of dislocations in NiAl through the use of in-situ straining in transmission electron microscopy," *Mater. Sci. Eng.*, A239-240, pp. 142-149, 1997.
8. Ebrahimi, F., Shrivastava, S., "Brittle-to-Ductile transition in NiAl single crystal," *Acta mater.*, Vol. 46, no. 5, pp. 1493-1502, 1998.
9. Miracle, D. B., "The physical and mechanical properties of NiAl," *Acta metal.*, Vol. 41, no. 3, pp. 649-684, 1993.
10. Levit, V. I., Kaufman, M. J., "Tensile behavior of β -NiAl: Intrinsic vs. extrinsic properties," *Structural Intermetallics, Minerals, Metals & Metrials Society*, pp. 683-690, 1997.