

소성 구배를 고려한 다결정 고체 해석의 상호작용에 대한 영향

Effect of plastic gradient on analysis of grain interactions of polycrystalline solids

정 상 엽* · 한 동 석**

Chung, Sang-Yeop · Han, Tong-Seok

요 약

마이크로 스케일에서 다결정 재료의 소성 거동을 살펴볼 때, 결정의 geometrically necessary dislocation(GND) 효과에 의한 소성 구배(plastic gradient)의 고려는 재료의 소성 거동에 큰 영향을 미칠 수 있다. 본 연구에서는 소성 구배의 영향을 살펴보기 위하여 다결정 고체(polycrystalline solids)의 거동을 유한요소해석을 이용하여 살펴보았다. 소성 구배의 영향을 살펴보기 위하여 구배 경화 계수(gradient hardness coefficient)와 먼 거리 변형률에 대한 재료 길이 변수(material length parameter)가 사용되었다. 재료 길이 변수의 영향을 살펴보기 위해, 재료 길이 변수의 차이에 따른 다결정 고체의 거동을 분석하였다. 또한 소성 구배 효과의 고려와 재료 길이 변수의 변화에 따라서 다결정 고체 내부에 위치한 단결정이 받는 영향을 살펴보았다. 재료 길이 변수에 따라 결정이 받는 영향을 비교하여, GND에 의한 다결정 고체 거동의 영향을 확인하였다.

Keywords : 미세구조, 다결정 고체, 결정 소성, 전위, 소성 구배 모델

1. 서 론

전위(dislocation)의 거동은 결정 고체(crystalline solid)의 소성 거동이 발생하는 주요 원인이 된다. 특히 다결정 고체의 소성 거동을 분석하기 위해서는, 재료 거동 시 발생하는 여러 영향들을 고려하기 위하여 기존의 결정 해석 모델을 발전시키는 것에 대한 필요성이 요구되어 왔다. 이를 위해서 결정 입자들 사이에서 많은 전위가 누적되는 현상에 대한 적합 조건을 만족할 수 있는 효과의 관찰을 위하여 소성 구배(plastic gradient)를 이용하는 모델에 대한 연구가 널리 수행되고 있다. 이와 관련하여 Hall-Petch 관계(Hall, 1951 ; Petch, 1953)에서는 결정 크기가 감소함에 따라 결정 경계면이 전위의 slip을 억제하여 재료의 강도가 증가한다는 것을 제안하였다. 이를 바탕으로 하여 geometrically necessary dislocation(GND)과 소성 구배가 제안되었다(Ashby, 1970).

본 연구에서는 Gerken 등(2007, 2008)에 의하여 제안된 모델을 바탕으로 소성 구배를 고려한 다결정 고체(polycrystalline solids)의 거동을 모사하고, 다결정 고체 내부에 위치한 단결정(single crystal)이 받는 영향을 살펴보았다. Gerken 등(2008)의 연구에서는 단결정 고체를 사용하여 거동을 모사하였지만, 본 연구에서는 소성 구배를 고려하였을 때, 다결정 고체가 받는 영향을 살펴보

* 학생회원 · 연세대학교 사회환경시스템공학부 박사과정 sychung@yonsei.ac.kr

** 정회원 · 연세대학교 사회환경시스템공학부 조교수 tshan@yonsei.ac.kr

았다. 또한 다결정 고체의 거동을 모사하는 과정에서, 소성 구배에 의해 발생하는 효과를 고려하기 위한 재료 길이 변수의 변화에 따라 다결정 고체 및 내부 결정이 받는 영향도 살펴보았다.

2. 미세구조의 유한요소 시뮬레이션

다결정 미세구조의 거동 해석에서 크기 영향(size effect)을 고려하기 위하여 Gerken 등(2008)이 제안한 소성 구배를 포함한 모델을 사용하였다. Gerken은 Hartley(2003)가 제안한 모델에 소성 구배를 고려하여 변형 구배(deformation gradient)의 다중 분할을 표현하였다. 자세한 사항은 Gerken 등(2008)에 나타나 있으며 본 논문에서는 간략한 내용만 제시한다. 변형 구배의 다중 분할은 식 (1)과 같이 표현된다. 식 (1)에서 F_{ij}^d 는 소성 변형을 의미하며, 결정 slip면으로의 전위 거동에 따른 영구적인 변형을 나타내는 F_{ij}^p 와 전체 body의 격자(lattice)에서 발생하는 전위에 의한 먼 거리 변형을 나타내는 F_{ij}^b 로 구성되어 있다. F_{ij}^c 는 left stretch 텐서 V_{ij} 와 rotation R_{ij} 로 구성된 탄성 변형을 의미한다.

$$F_{ij} = F_{ik}^c F_{kj}^d = V_{ik} R_{kl} F_{lm}^b F_{mj}^p \quad (1)$$

먼 거리 변형률을 계산하기 위하여 Burgers 벡터를 사용하였다. 변형률 길이 계수인 a 를 사용하여 net Burgers 벡터의 분포가 $(x,y)=(\pm a, \pm a)$ 으로 표현되는 사각형 구간에서는 선형관계이고, 이 구간 외에서 net Burgers 벡터는 0으로 가정하였다. 이와 관련된 응력과 변형률의 식은 Gerken 등(2007, 2008)을 참고하였다. 소성 slip의 구배와 net Burgers 벡터와의 관계는 식 (2)와 같이 나타낼 수 있다. 식 (2)에서 γ 는 s_i 방향으로의 slip을 의미한다.

$$\rho_b = \frac{\partial \gamma}{\partial x_i} s_i \quad (2)$$

결정 소성의 모델은 Gerken 등(2008)에서 사용한 모델을 이용하였다. 총 전위 밀도(total dislocation density)는 총 소성 slip의 합에 비례하는 statistically stored dislocations(SSD)와 slip gradient에 비례하는 GND를 모두 포함한다. Slip system hardness는 식 (3)과 같이 표현된다.

$$g^\alpha = G_1(\gamma) + G_2 \left(\frac{\partial \gamma}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

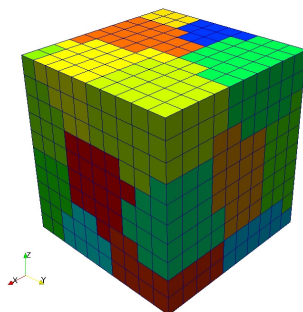
식 (3)에서 각 항(G_1, G_2)은 독립적으로 작용한다. $G_1(\gamma)$ 는 SSD에 의한 hardness를 나타내며 다음과 같은 포화 모델(saturation model)에 의하여 계산된다. $G_2(\partial \gamma / \partial x_i)$ 는 구배 경화(gradient hardness)로서 net Burgers 벡터에 의해서 표현되며, $G_2(\partial \gamma / \partial x_i) = \beta \mu \sqrt{\rho_b}$ 로 나타낼 수 있다. 여기서 β 는 구배 경화 계수(gradient hardness coefficient), μ 는 전단 계수, ρ_b 는 전위 밀도이다.

3. 다결정 고체의 모델링 및 시뮬레이션 결과 분석

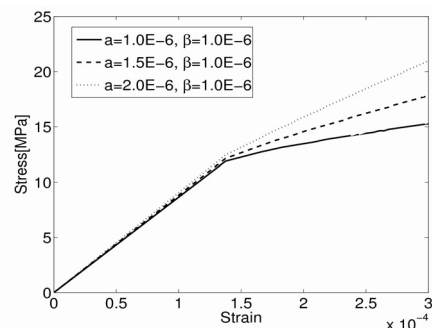
소성 구배를 고려한 다결정 고체의 거동을 살펴보기 위하여 그림 1(a)의 다결정 고체를 모델링 하였다. 다결정 미세구조의 유한요소격자는 모서리의 길이가 $100\mu\text{m}$ 인 정육면체 모델을 각 요소당 27개의 적분점을 갖는 8-절점 정육면체 요소(brick element)를 사용하여 표현하였으며, 메쉬는 총 1,000개의 정육면체 요소로 구성되었다. 다결정 미세구조는 Voronoi 다이어그램을 사용하여 정육면체 요소의 균집으로 각 결정을 표현한 메쉬이며, 총 20개의 결정으로 구성되어 있다. 본 연구에서는 고려 대상이 되는 재료의 항복점을 넘도록 z축 상단 면($z=100\mu\text{m}$)에 $0.01\mu\text{m/s}$ 의 속도를 주어 소성 흐름이 충분히 발생하는 0.03%까지 인장 변형률이 발생하도록 하여 미세구조의 거동을 살펴보았다. 또한 다결정 재료 내부의 단결정의 거동을 살펴봄으로서, 다결정 미세구조가 소성 거동을 할 때 개별 결정의 거동에 어떠한 영향을 미치는지 살펴보았다.

본 연구는 소성 구배가 재료 거동에 미치는 영향을 살펴보기 위하여 재료 길이 변수인 먼 거리 변형률 길이, a 와 구배 경화 계수(gradient hardness coefficient), β 를 사용하였다. 각 재료 길이 변수의 값은 Dumoulin 등(2005)의 실험 결과와 Gerken 등(2008)의 사용한 가상 시편과 재료 길이 변수 사이의 관계를 참고하여 정하였다. 본 연구에서는 선행 연구(Gerken 등, 2007; 정상엽 등, 2011)에서 나타난 내용을 바탕으로 상대적으로 재료의 소성 거동에 큰 영향을 미치는 재료 길이 변수 a 의 변화에 따른 거동의 차이를 살펴보기 위하여 $\beta=1.0^{-6}\sqrt{\text{m}}$ 으로 고정하고 a 값을 $a=1.0\mu\text{m}$, $1.5\mu\text{m}$, $2.0\mu\text{m}$ 로 변화시키며 적용하여 그에 따른 영향을 살펴보았다. 그림 1(b)에서 나타난 바와 같이, β 값이 고정된 상태에서 a 값이 증가할수록 소성 영역에서 재료의 강도가 뚜렷하게 증가하는 것을 확인할 수 있다. 다결정 고체의 경우, 재료를 구성하고 있는 결정들의 orientation이 서로 다르기 때문에 재료 거동 시, 결정 경계면에서 전위가 누적되고 전위가 경계면을 통과하기 위해서는 많은 에너지가 필요하기 때문에 재료의 강도가 증가한다. a 값이 증가하게 되면 특정 결정의 거동이 더 먼 거리에 있는 결정까지 영향을 미치는 효과를 주기 때문에, 상대적으로 고려되어야 할 결정 사이의 관계가 증가하고 재료의 강도가 증가하게 되는 것을 알 수 있다.

다결정 재료의 거동 시, 다결정 재료를 구성하고 있는 단결정에 어떠한 영향을 미치는지 확인하기 위하여, 그림 2에 나타난 바와 같이 다결정 미세구조 내부에 위치한 단결정을 대상으로 소성 구배의 고려에 따른 영향을 살펴보았다. 단결정이 받는 영향을 살펴보기 위해 재료 내부의 전위

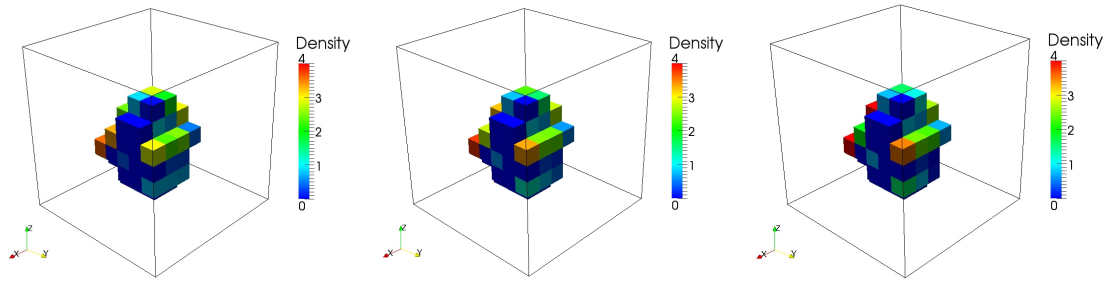


(a) 다결정 미세구조(20개의 결정)



(b) 다결정 미세구조 시편의 응력-변형률 곡선

그림 1 다결정 미세구조와 소성 구배를 고려한 역학적 거동 결과



(a) $a=1.0\mu\text{m}$, $\beta=1.0^{-6}\sqrt{\text{m}}$ (b) $a=1.5\mu\text{m}$, $\beta=1.0^{-6}\sqrt{\text{m}}$ (c) $a=2.0\mu\text{m}$, $\beta=1.0^{-6}\sqrt{\text{m}}$

그림 2 변형률 0.03%(소성 영역)에서 단결정의 전위 밀도

밀도를 살펴보았다. 전위의 거동은 다결정 재료의 소성 변형이 발생하는데 주요한 원인이 되기 때문에, 전위 밀도를 살펴보는 것은 재료 내부의 소성 거동을 파악하는데 유용하게 활용될 수 있다. 그림 2에서 살펴볼 수 있듯이 재료가 소성 영역(0.03%)일 때, a 값에 따라 전위 밀도가 달라지는 현상을 관찰할 수 있다. 특히 a 값이 증가할수록 결정이 다른 결정과 만나는 경계면에서 전위 밀도가 증가하는 현상을 확인할 수 있다. 이는, 다결정 고체의 거동에서 소성 구배를 고려할 때 결정 사이의 경계면에서 전위가 누적되기 때문에 전위 밀도가 증가하는 것임을 알 수 있다. 결과적으로 소성 구배의 고려를 위한 재료 길이 변수 a 의 증가는, 거시적 응력-변형률 곡선에서 재료의 강도 증가 뿐 만 아니라, 재료 내부의 단결정의 거동에도 영향을 미치는 것을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 소성 구배의 영향을 고려한 다결정 고체 가상 시편의 거동을 살펴보았다. 다결정 재료의 소성 구배를 고려한 거동을 살펴기 위하여 기존의 유한요소해석과 구성방정식에 재료 길이 변수 a (먼 거리 변형률 길이)와 β (gradient hardness coefficient)를 사용하여 GND 효과를 나타내고, 재료 길이 변수의 변화에 따라 재료의 소성 거동에 미치는 영향을 조사하였다. 그 결과, 재료 길이 변수 a 가 증가할수록 재료의 강도가 증가하는 현상을 확인하였다. 또한, 재료 길이 변수의 증가에 따라 다결정 내부에 있는 단결정의 전위 밀도가 증가하여, 소성 구배의 고려가 단결정의 거동에도 영향을 미치는 것을 확인하였다.

감사의 글

이 논문은 2008년 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (KRF 2008-331-D00006).

참고문헌

- 정상엽, 한동석 (2011) GND 효과에 의한 소성 구배의 다결정 고체 거동에 대한 영향, 한국전산구조공학회 논문집, 한국전산구조공학회, 2011년 4월 게재 예정.
- Gerken, J.M and Dawson, P.R. (2007) Bending of a single crystal thin foil of material with slip gradient effects, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15, pp. 799~822.