

단결정 항복 꼭지점 분석을 이용한 입자간 방위차와 결정응력의 상호작용 조사

Investigation of Interaction between Crystal Stress and Intergranular Misorientation using Single Crystal Yield Vertex Analysis

한 동 석*

Han, Tong-Seok

요 약

새로운 재료의 개발과 사용 중인 기존재료의 손상을 판단하기 위해서 변형 중 재료 거동을 정확히 파악하는 것이 중요하다. 하지만, 대부분의 공학 재료는 다결정으로 이루어져 결정 상호작용의 규명이 복잡하여 정밀한 분석이 어렵다. 고에너지 X-ray 회절실험법을 이용한 다결정 고체 거동의 측정기법이 발전함에 따라 해석을 통한 실험법의 검증 및 추가 분석 방법에 대해서도 연구가 활발히 진행되고 있다. 본 연구에서는 특정 결정과 주변 결정 간의 결정간 방위차(intergranular misorientation)의 상호작용에 의한 결정 거동 영향을 조사하였다. 결정간 방위차를 정의하고 결정 응력 방향 변화를 단결정 항복면 꼭지점과 방향과 비교함으로써 결정간 방위차의 변화에 대한 결정 응력 변화를 분석하였다. 소성 발생이 증가함에 따라 결정 응력의 방향은 단결정 항복면 꼭지점으로 이동하지만 결정간 방위차에 의해서 응력 분포가 변화함을 정량적으로 확인하였다.

Keywords : 미세구조, 다결정 고체, 단결정 항복면, 결정간 방위차

1. 서 론

전위(dislocation)의 거동은 결정 고체(crystalline solid)의 소성 거동이 발생하는 주요 원인이 된다. 특히 다결정 고체의 소성 거동을 분석하기 위해서 재료 거동 시 발생하는 여러 영향들을 고려 하한 기존의 결정 해석 모델 발전에 대한 필요성이 요구되어 왔다.

소성 흐름 중에 결정들은 경사계의 상호 이동에 의하여 변형하게 된다. 특정 방향에 대한 경사계는 특정 방향으로만 변형을 허용하므로, 한 특정 경사계의 변형으로는 임의 방향으로 이방성을 가지는 다결정 고체의 적합조건을 만족시킬 수 없게 된다. 보다 자유로운 형태로 변형을 하기 위하여 격자 응력은 단결정 항복면의 모서리나 꼭지점으로 이동하는 경향이 생기게 된다(Ritz 등, 2010).

최근에는 입자가속기를 이용한 실험으로부터 모여 있는 열 개 정도 결정의 응력 변화를 동시에 얻을 수 있게 되었으며, 이 실험결과는 유사한 결정 방위각을 가지고 있다 하더라도 주변 결정의 방위각이 상이한 경우 다른 응력 변화를 보일 수 있다는 것을 보여 주었다. 이러한 실험적 결과는

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

결정의 응력방향은 결정의 방위각 뿐만 아니라 결정간 방위차가 결정 거동에 영향을 준다는 것을 확인하였으나, 두 원인의 상대적인 효과를 실험적인 방법을 이용한 체계적으로 연구가 어렵고 문헌에 보고된 바는 없다. 이는 실험에 사용되는 시편 내에 원하는 결정 모양의 배열로 조절하는 것이 매우 힘들 뿐만 아니라 동일한 결정군의 응력을 실험에서 얻는 것도 매우 힘들기 때문이다. 이를 보완하기 위하여 다결정 내 응력 방향의 변화를 해석적인 방법으로 심층 분석할 수 있는 기법을 개발하는 것이 중요하게 되며, 본 연구는 이러한 접근 방법으로 다결정 내 응력 방향 변화와 결정간 방위의 상호 작용에 대한 분석을 실시하였다.

2. 결정간 방위차(Intergranular Misorientation) 및 동축성(Coaxiality)의 정의

결정간 방위차(intergranular misorientation)는 Barton 등(2001)에 제시되어 있는 방위각이 정의된 위치 벡터(\mathbf{x})와 방위차를 표현하는 skew tensor와 axial vector($\boldsymbol{\omega}$)의 텐서곱으로 정의된 2차 텐서인 \mathbf{X} 를 사용하여 표현하였다:

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^n \phi^{(i)} (\boldsymbol{\omega}^{(i)} \otimes \mathbf{x}^{(i)}) \quad (1)$$

여기서, n 은 방위각이 정의된 위치의 개수이며 ϕ 는 해당 방위각에 대한 부피비이다. 결정간 방위차는 \mathbf{X} 를 변형 행렬로 이용하여 구를 변형시킨 형태인 타원체로 가시화하여 표현하였다.

결정의 격자 응력(σ_c)의 방향과 단결정 항복면 꼭지점의 응력 벡터(σ_v)와의 동축성(coaxiality)은 격자 응력 벡터와 항복면 꼭지점의 방향벡터와의 각도(θ)로 다음과 같이 정의하였다 (Ritz 등, 2010).

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{\sigma'_c : \sigma'_v}{\|\sigma'_c\| \|\sigma'_v\|} \right) \quad (2)$$

격자 응력과 단결정 항복면 꼭지점의 응력 벡터는 hydrostatic 부분은 제외하고 deviatoric부분만으로 정의하였다.

3. 다결정 미세구조 모델링

다결정 미세구조를 유한요소를 이용하여 표현한 RVE(Representative Volume Element)는 그림 1과 같다. 결정은 공간을 채울수 있는 12면 다면체인 dodecahedron을 이용하여 표현하였다. 하나의 dodecahedron은 48개의 사면체 요소로 이루어져 있으며, 한 요소는 10개의 노드로 이루어져 있으며 15개의 적분점을 이용하였다. RVE 내의 총 사면체 요소의 개수는 81000개이며 1098개의 결정이 부분 손실 없는 dodecahedron으로 표현이 되었다.

RVE 내부 중앙에 위치한 총 13개 결정(그림 1 아래)에 대해서 집중적인 분석을 실시하였다. 중앙에 위치한 결정의 방위각은 고정하고, 12개의 인접 결정들의 동일한 방위각 리스트를 재배열함으로써 결정간 방위차에 의한 영향을 관찰해 보았다. 2개의 추가 재배열을 포함해 총 3가지 경우의 결정간 방위차의 가시화는 그림 2에 제시하였다. 그림에서 보여주는 바와 같이 \mathbf{X} 텐서의 형태가 각 배열의 경우에 따라 다른 것을 알 수 있으며 이는 중앙에 위치한 결정의 응력 거동에 영향을 미치게 된다. 유한요소법 이용한 모델링 방법 및 변수는 지면 관계상 생략하였으며 Marin 등

(1998)에 자세히 기술되어 있다.

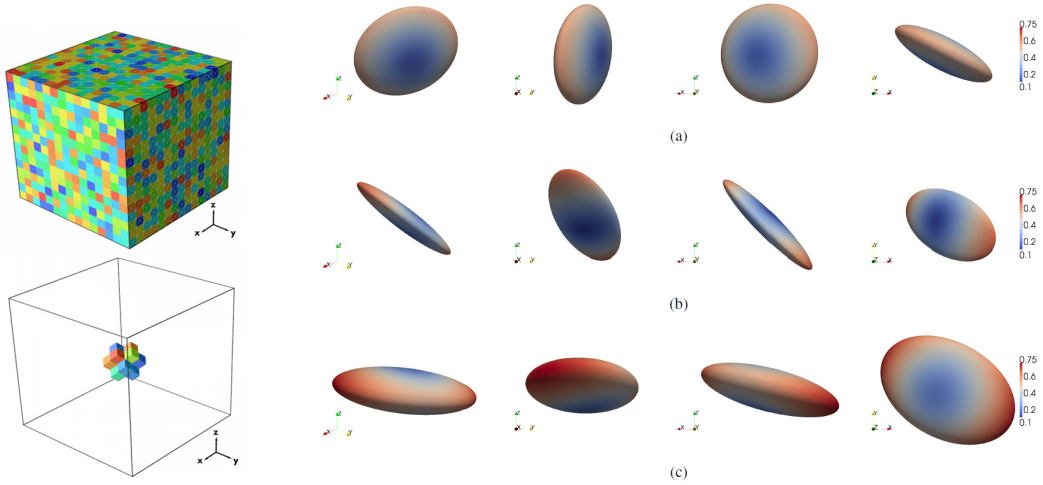


그림 1. RVE

그림 2. 결정간 방위차 가시화 (a) Case 1, (b) Case 2, (c) Case 3
(범례의 수는 \mathbf{X} 텐서의 각 방향으로의 크기를 의미함)

3. 해석 결과

RVE를 z -방향으로 일축 인장력을 가할 때 결정간 방위차 변화에 의한 중앙 결정 내의 격자 변형을 변화의 차이를 그림 3에 제시하였다. 그림에서 세 가지 방위차의 경우에 대한 σ_{xx} , σ_{xy} , 그리고 σ_{zz} 를 비교하였으며, 중앙에 위치한 결정은 동일한 방위각을 가지고 있음에도 불구하고 응력에 변화가 있음을 확인할 수 있다.

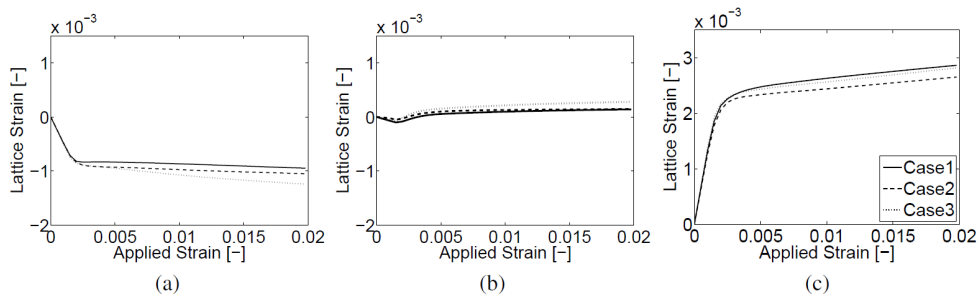


그림 3. 중앙 결정의 격자 변형을 변화 (a) σ_{xx} , (b) σ_{xy} , (c) σ_{zz}

각 경우에 대해서 중앙부 결정의 응력방향 변화를 조사하였다. 응력의 방향이 단결정 항복면의 꼭지점과 이루는 각도를 조사함으로써, 응력 방향의 변화 및 결정간 방위차에 의한 영향을 조사하였다. 그림 4와 5에는 중앙 결정내의 유한요소에서 발전하는 응력방향을 RVE의 항복 전후 상태를 비교하여 주변 결정 배열의 경우별로 제시한 것이다. 단결정에 대해서도 다결정에 대한 기존의 연구결과(Ritz 등, 2010)와 일치하는 결과를 얻었고 결정간 방위차에 의한 격자 응력의 동축성(coaxiality) 분포의 변화를 확인할 수 있었다. 세 경우 모두 각도 θ 가 감소하는데, 이는 항복과 함께 결정 변형의 적합성을 만족하기 위해서 격자 응력의 방향이 단결정 파괴면 꼭지점으로 이동하여 동축성이 증가한다는 것을 의미한다. 그러나 항복 전후의 동축성의 분포가 경우에 따라 다른 것을 보여주고 있어 결정간 방위차가 결정 거동에 현저한 영향이 있다는 것을 확인할 수 있다.

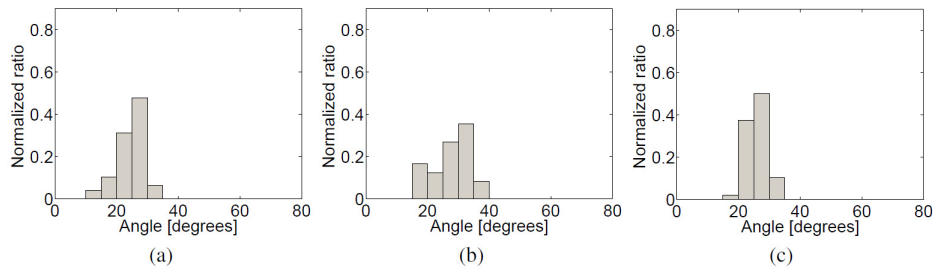


그림 4. 항복 전(외부 하중 119MPa) 동축성(coaxiality)을 이용한 응력 방향의 변화
(a) Case 1, (b) Case 2, (c) Case 3

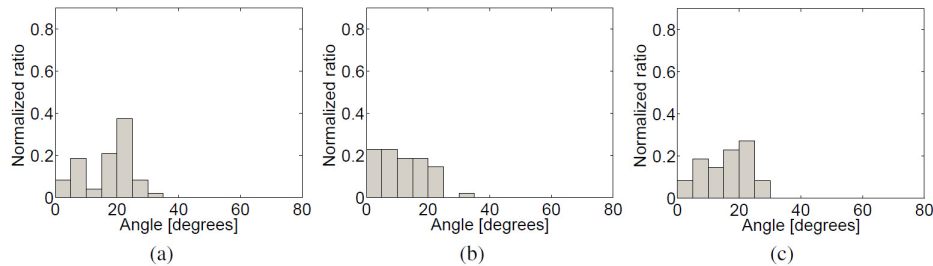


그림 5. 항복 후(외부 하중 379MPa) 동축성(coaxiality)을 이용한 응력 방향의 변화
(a) Case 1, (b) Case 2, (c) Case 3

5. 요약

본 연구에서는 결정간 방위차의 격자 응력 및 변형율에 대한 영향을 조사하였다. 결정간 방위차를 가시화하여 주위 결정의 방위각 재배열에 따른 방위차의 변화를 가시화 하였고, 단결정 항복면 꼭지점 분석 기법을 이용하여 방위차의 재배열에 따른 응력 방향 변화를 분석하였다. 다결정 재료의 항복 후 단결정의 격자 응력이 결정 항복면의 꼭지점으로 이동하지만 응력 분포는 주변 결정과 이루는 방위차의 공간적 분포에 영향을 받는 것을 정량적으로 확인하였다.

감사의 글

이 논문은 2008년 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구(KRF 2008-331-D00006)이며, 연구에 사용된 주요 계산은 한국과학기술정보연구원(KISTI)에서 전략과제(KSC-2010-C1-0018)를 포함한 슈퍼 컴퓨팅자원 지원 받아 수행되어 이에 감사드립니다.

참고문헌

- Marin, E.B. and Dawson, P.R. (1998) Elastoplastic finite element analyses of metal deformations using polycrystal constitutive models, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 165, pp. 23~41.
- Barton, N.R. and Dawson, P.R. (2001) On the spatial arrangement of lattice orientations in hot-rolled multiphase titanium, *Modelling Simulation in Material Science and Engineering*, 9, pp. 433~463.
- Ritz, H., Dawson, P.R. and Marin, T. (2010) Analyzing the orientation dependence of stresses in polycrystals using vertices of the single crystal yield surface, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58, pp. 54~72.