

재료의 파괴인성에 대한 미시적 접근

東田 賢二¹ · 田中 將己¹

Micro Approach of Fracture Toughness in Materials

K. Higashida, M. Tanaka

1. 서론

재료파괴는 모든 소재에서 자주 발생하여 소성 가공상의 커다란 장애요소이다. 이것은 역학적 문제인 동시에 원자간 결합성에 깊이 관련되어 있어 구조재료와 기능재료 등 모든 재료에서 재료 과학적으로 중요과제이다. 이 때문에 재료학적 견지에서 재료파괴 연구의 역사는 오래되었고 축적된 데이터가 많다고 판단된다. 그러나 한편으로는 그 원리적 연구에 극히 한경 되어 있다고 말하지 않을 수 없다. 이와 같은 상황에서 당면의 과제를 해결하기 위한 경험적 데이터의 축적도 물론 중요하지만 다른 한편으로는 재료파괴의 기초 연구도 또한 추진해 나가지 않으면 안 된다.

재료파괴의 기본 과정은 원자간 결합의 절단이다. 그러므로 원자 수준에서의 연구와 의견이 중요하지만 동시에 그들의 미시적 견지와 거시적으로 포착되는 여러가지의 현상과 파라메타 사이에 구체적으로 어떻게 연결되는가의 문제가 새롭게 제안되고 있다. 일반적으로 재료의 역학적 성질을 지배하는 조직과 구조는 가공한 금속의 전위조직과 같이 불균질한 준안정 구조를 갖고 있으며 이 준안정 구조의 연구 진척이 마이크로와 매크로를 연결하는 열쇠가 될 수 있다고 여겨진다[1].

결정격자결합의 입장에서 재료의 파괴현상을 연구하는 것은 오래 전부터 해왔다. 특히 St. John에 의한 실리콘 단결정의 취성-연성천이에 관한 연구[2], 그리고 Ohr 등에 의한 균열끝의 무전위영

역의 존재에 관한 연구[3] 등을 계기로 하여 발전을 시작하였고, 1986년 Thomson 이 파괴의 물리[4]를 발표하여 그 연구가 본격화 된 것으로 여겨진다.

본 연구에서는 저자 등이 이제까지 진행해왔던 균열끝에 생성된 전위에 의한 응력차폐효과를 중심으로 재료의 인성에 미치는 격자결합의 영향에 대하여 해설하였다. 또 균열끝 근방의 전위 생성, 증식과정의 초고전압전자현미경관찰 결과, 전위차폐효과의 존재에 대하여 이온결정이나 실리콘 단결정을 모델로 한 연구결과에 대해서도 소개하였다.

2. 미시적 격자결합의 거시적 파괴인성로의 기여

균열끝 부근의 응력은 잘 알려진바 같이 균열 끝을 원점으로 하여 극좌표(r,θ)로서 식(1)과 같이 표현할 수 있다.

$$\sigma_{ij} = K_I f_{ij}(\theta) / \sqrt{r} \quad (1)$$

여기서, K_I 는 외력에 의한 응력확대계수, $f_{ij}(\theta)$ 는 θ 에 의존하는 함수이다. 다음에 Fig. 1의 왼쪽과 같이 균열끝 근방에 전위가 도입되면 그것은 전위에 의해 생겨나는 균열끝 근방의 응력장도 식 (1)과 같이 되고, 식 (2)와 같이 쓸 수 있다.

1.九州大學大學院工學研究院材料工學部門 (우)938-8601 福岡市 西區元岡 744, Japan
- 技術解説: 靱性の加工(日本靱性加工學會誌) 第49卷 第564号 pp. 19-23 (2008.1)
- 번역자: 박정서(자유번역가), 김인수(금오공과대학교 신소재시스템공학부, 교수)

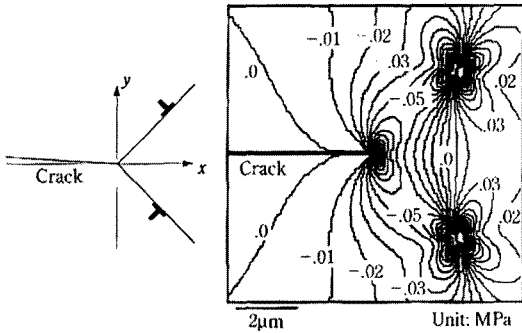


Fig. 1 Shielded stress field by dislocation in front of the crack tip

$$\sigma_{ij}^D = k_D f_{ij}(\theta) / \sqrt{r} \quad (2)$$

여기서 k_D 는 전위에 의한 응력확대계수에의 기여이다. 여기서 하중이 가해진 상태에서 전위가 존재할 경우의 응력 σ_{ij}^D 는 식(3)과 같이 쓸 수 있다.

$$\sigma_{ij}^T = \sigma_{ij} + \sigma_{ij}^D = k_I f_{ij}(\theta) / \sqrt{r} \quad (3)$$

여기서

$$k_I = K_I + k_D \quad (4)$$

이라고 나타내며 k_I 는 국부응력확대계수라고 부르며 외력에 의한 기여는 K_I 뿐이 아니고, 균열끝근방에 존재하는 전위 등 탄성특이점에서의 내부 응력의 기여 k_D 도 고려한 균열끝에 실질적으로 존재하는 응력확대계수이다[5,6]. Fig. 1 왼쪽과 같이 전위가 도입 되었을 경우, 그 전위에 의한 k_D 는 일반적으로 외력에 의한 응력집중을 완화하는(차폐하는) 것 같이 작용한다. Fig. 1의 오른쪽은 균열의 끝 앞에 전위배치가 될 때 균열면에 수직 한 법선에 발생하는 응력의 분포를 계산한 결과이다. 이 계산에서는 외력이 전혀 가해지지 않고 전위에 의한 내부응력장만을 나타낸 것이다. 또 그림 중의 음영을 한 영역은 응력값이 부(압축)이라는 것을 의미한다. 그림에서 전위가 존재하는 장소에 당면이 특이성이 나타나 있으나, 그것에 덧붙여 균열끝에도 압축응력이 발생하고 있다. 즉 인장외력으로서 도입된 전위의 내부 응력장은 압축장($k_D < 0$)로서 작용한다. 이 압축응력장은 외력에 의한 인장응력집중을 완화(차폐)하여 파괴인성값 K_{IC} 를 상승시킨다. 균열의 진전은 국부응력

확대계수 k_I 이 균열끝의 원자간 결합을 절단하는 크기 (Griffith level) K_{IC} 에 달 한때에 일어난다[7]. 그것은 다음 식으로 주어진다.

$$k_{IC} = \sqrt{4\mu\gamma / (1-\nu)} \quad (5)$$

여기에서 μ, ν 는 각각 강성을, 포아슨비이며, γ 는 표면 energy로서 모두 원자간결합성과 직접 관련 있는 파라메타이다.

식(4)와 식(5)에서, 균열진전의 외부응력확대계수, 즉 거시적파괴인성치 k_{IC} 는 식(6)으로 주어진다.

$$k_{IC} = \sqrt{4\mu\gamma / (1-\nu)} - k_D \quad (6)$$

이 식 (6)에 의해 전위 등의 결정격자결합의 내부 응력장에 관련한 미시적 파라메타와 파괴 인성치라는 거시적 파라메타가 이어지는 것이다.

3. 원자간 결합성 (표면 energy 와 탄성계수)의 파괴인성에 미치는 영향

균열진전에 있어서 전위생성이 일어나지 않으며 완전 취성적으로 파괴가 진행되는 경우, 식(6)에서 우변 제 2항 k_D 은 제로가 된다. 이때 파괴인성치 k_{IC} 값은, Griffith 수준과 일치하여 원자간결합성에 의하여 지배되는 탄성계수와 표면 energy에 의하여 결정된다. 단 이와 같은 경우에도 원자결합의 이방성, 그 표면 energy나 탄성계수의 방위의존성에 의해서, 파괴인성은 영향을 받게 된다. Fig. 2는 실리콘 단결정에 있어서 <001>정대에 속하는 면의 표면 energy의 방위 의존성을 분자동력학법(MD)을 써서 계산한 결과이다[8]. 이 표에서 <001>정대에 속하는 면 가운데에는 {110}면의 표면 energy가 가장 낮은 값을 가지는 것으로 알려져 있다. 그러나 실제로는 {001}면 웨이퍼 위에서 원추 압자를 써서 균열을 도입하면 가장 낮은 표면 energy 면을 따라 쪼개짐을 관찰할 수 있다.

철강재료 등 금속재료의 저취성 재료에 있어서는 자주 {100}면들의 저지수면에 따른 벽개 파괴가 생기는 현상이 알려지고 있으나, 이와 같은 입내파괴에서의 벽개면 선택에서는 상기와 같은 결합성의 방위 의존성이 중요하다고 여겨진다. 또 다결정에서의 입계 파괴, 이를테면 보론 등 특정 원소의 첨가에 의해 그것이 억제되

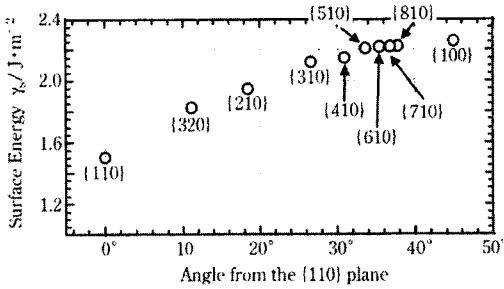


Fig. 2 Surface energy and directional plane of Si single crystal by MD calculation method[8]

는 경향이 있다고 잘 알려져 있으나, 이것도 결정 입계에서 결합 특성의 변화가 인성 향상에 기여할 것으로 판단된다.

4. 균열끝 응력장의 광탄성법에 의한 가시화

재료 파괴는 균열끝에서 응력집중이 구동력이 된다. 이 때문에 균열끝 근방의 응력상태를 관측하는 것은 파괴현상의 이해에 매우 중요하다. 이와 같은 응력상태를 직접 관찰하는 방법으로 광탄성법에 의하여 투광성 결정층의 내부 응력장을 가시화할 수 있다. 여기서는 NaCl 결정을 써서 본 연구그룹에서 관측한 결과에 대하여 소개하였다[9].

Fig. 3(a), (b)는 NaCl 결정의 ECT (Edge cracked tensile) 형태의 시험편에 실온에서 약간 인장하중을 가해 전위를 도입했을 때의 모식도와 그 전위분포를 엡치피트법으로 관찰한 결과이다. NaCl 결정은 실온에서 {100}면에서 용이하게 벽개되는 취성적 성질과 동시에 {110}<110>계 slip 에 의해 낮은 응력으로 소성변형이 일어난다고 하는 연성적 성질이 혼합되어 있다. 이것 때문에 NaCl 결정은 균열과 전위와의 상호작용을 연구하기 위한 model 재료로서 유용한 재료이다. 또 후술하는 MgO 도 압연형 구조에서와 같은 역학적 거동을 보인다. Fig. 3(b)의 엡치피트조직에서 아결정립계도 보이지만 주목해야 할 것은 {100} 균열끝에서 균열면에 대칭인 {110}면에 따라 slip 전위가 생성되고 있는 것이다.

Fig. 4는 이와 같은 상황에 있는 NaCl 결정에 하중을 가한 후에 직접 니콜의 조건으로 광탄성 관찰한 것이다. 여기서 편광자 외에 균열면과 이루는 각도를 β로 하여 이 각도를 변화시키는 것으로 문제되는 응력성분을 선택적으로 가시화한다. Fig. 4(a) (β=0)에서는 균열면과 (π/4)rad의 방향에

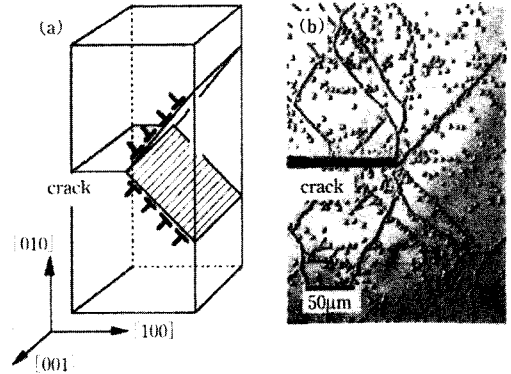


Fig. 3 Crack and dislocation of NaCl crystal (a) model, (b) etch pit method observation

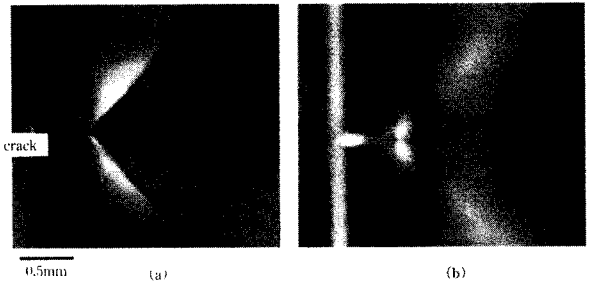


Fig. 4 Image of light elastic modulus in front of the crack of NaCl crystal (a) along the slip band (β=0rad), (b) under the shielded stress (β=π/4rad)

생성한 slip 대에 대응한 상이 관찰된다. 한편, Fig. 4(b)(β= π/4)의 상에서는 균열면에 수직인 법선응력장이 주로 가시화되고 있다. 균열끝 전면에 버터후라이상으로 넓혀진 상이 관찰 되지만 이 상은 시험편에 인장하중을 가하면 소실하는 것으로 압축응력장에 대응한다는 것을 알았다. 즉 Fig. 3(a)에 보이는 것 같은 slip 대의 도입에 의해 균열끝에 인장의 응력집중을 완화하는 것 같이 압축 응력장이 발생한다는 것을 이해할 수 있다. 이것이 위에서 말한 전위에 의한 응력차폐효과이다.

5. 초고전압전자현미경법에 의한 균열과 전위의 관찰

균열끝 근방의 소성역의 전위구조를 분명히 하기 위해 저자의 연구 그룹에서는 이제까지 주로 이온결합 반도체결정에 대하여 초고전압전자현미경법을 써서 조사해왔다[10,11]. Fig. 5(a)는 하나의 예

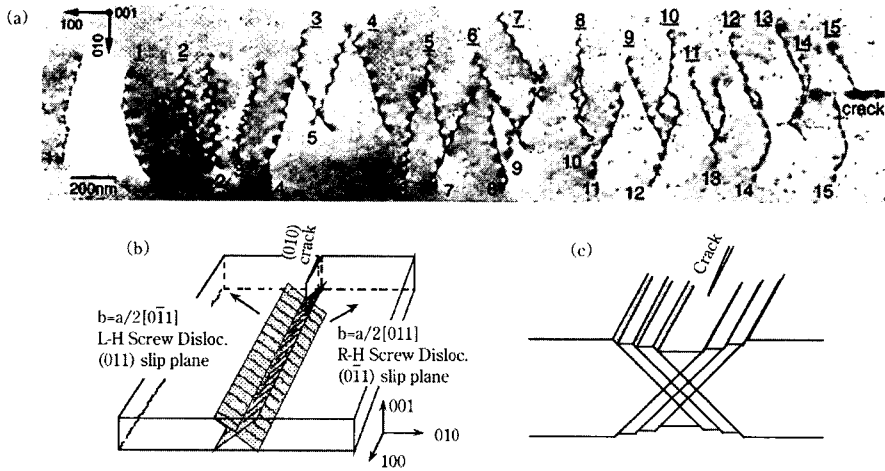


Fig. 5 (a) Image in front of the crack of MgO crystal (bright field) by ultra high voltage electron beam microscopy. Directional propagation of crack from right side to left side on (010) plane. thin films : (001) plane. electron beam direction : [001]. (b) Model of crack tip structure, (c) 45° shear type of plastic region

로서 MgO 결정 박막층의 균열과 거기서 발생한 전위군의 초고전압전자현미경 상이다. Fig. 5 에서 전진방향은 (b), 균열은 (c)에 나타냈다. 그 끝의 균열 전진방향에 따라 30 본의 전위가 생성되어 있다. 전위구조를 상세히 나타내기 위해 통상의 소멸조건을 더하여 전위상 contrast의 simulation을 도입하여[12] 개개의 전위 특성을 알아 보았다. 그 결과 전위는 어느 것이나 박막면에 $(\pi/4)$ rad 경사진 [011] (0-11) 또는 [0-11] (011)계의 나선 성분이 큰 전위이며, Fig. 5(a)중의 1~15 번호의 전위는 어느 것이나 (0-11) 면상의 오른쪽 감기(RH) 나선 전위이고, 한편 1~15의 전위는 (011) 면상의 왼쪽 감기(LH) 나선 전위라는 것을 알았다. 이 해석결과를 정리해서 Fig. 5(b)에 모식도를 나타내었다. 여기서 한편 무질서하게 분포하고 있을 것 같이 보이는 전위도 아주 규칙적으로 배열을 하고 있는 것을 알 수 있다. 균열끝에서 생성된 전위가 이와 같은 분포를 할 경우 균열끝 근방은 Fig. 5(c)에 보이는 변형이 일어난다. 이것은 모드 I 인장으로 평면응력상태에서 많이 형성되는 소위 45° shear-type의 소성역[13]에 대응한다. 이 전위 분포에 의해 생기는 균열끝의 국부응력차폐효과를 계산한 결과, 개개 전위의 기여는 모드 I 과 II의 혼합이지만, 모든 것의 R-H 와 L-H 나선 전위를 총합한 결과로서, 거의 순수한 모드 I 차폐효과를 갖는 것도 분명하게 된다.

다음에 실리콘 결정 중에 균열끝 전위에 대하

여 생각해 보았다. 실리콘결정에 있어서는 Pierls 포텐셜이 높아 실온에서 보통 slip 변형은 거의 일으키지 않지만 온도가 올라감에 따라 diamond 구조에 있어서 통상의 {111} <110>의 slip 변형을 일으키게 된다. 여기서 특징적인 것은 높은 완전결정을 사용한 파괴적 인성시험에 있어서 그 취성-연성 천이 (Brittle-to-ductile transition, BDT)가 아주 민감하게 일어나는 것이다[2]. 즉, 완전 취성거동이 높은 온도범위에서 일어나 그 파괴인성치가 몇 배로 되는 거동을 보인다. 이 때문에 그 BDT의 거동에 대하여 활발하게 연구가 행해졌다. 그 결과 천이온도의 dK/dt (외부응력확대계수의 부하속도) 의존성에서 구해지는 활성화 energy가 실리콘 결정중 전위운동의 그것과 거의 일치 한다는 것과 천이온도 그 자체는 전위원의 분포 등의 구조 민감하다는 것이 분명해 졌다[14]. 그래서 그 기본적인 메카니즘 설명에는 균열끝에서 전위를 생성, 증식과정을 분명히 하는 것이 중요하다. 저자들은 실리콘 웨이퍼에 비커스 압흔을 하여 그 압흔에서 발생하는 균열 방법을 써서 그 근방을 초고전압전자현미경으로 관찰하였다. 또 균열끝에 전위를 도입하기 위해 압흔에 따른 균열을 도입한 후, 600°C 전후로 5~6 분간 열처리를 했다[11,15]. Fig. 6(a)에 그 관찰한 예를 보였다. 균열은 (110) 면에서 약간 경사된 (441) 면으로, 그림 중 좌방향 ([1-10]방향)으로 나가고 있다. 균열끝에서 생성된 전위열이 균열끝 전방 뿐만 아니라, 후방에도 존

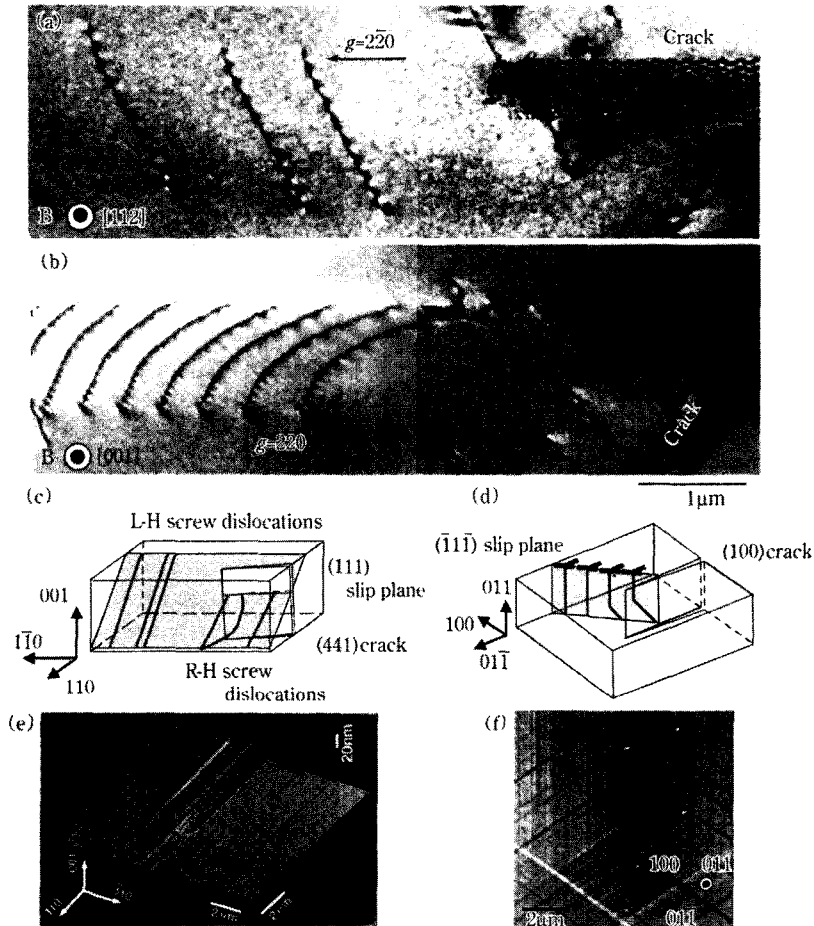


Fig. 6 (a) 45° shear type plastic regional image in front of the crack of Si single crystal (bright field) by ultra high voltage electron beam microscopy. Directional propagation of crack from right side to left side. thin films : (001) plane. electron beam direction : [001]. Diffraction vector $g=2-20$, (b) hinge-type plastic regional image in front of the crack of Si single crystal (bright field). Lower side directional propagation of crack from upper side (right lower region). thin films : (011) plane. electron beam direction : [001]. Diffraction vector $g=2-20$, (c)-(d) model of crack tip-dislocation structure, (e)-(f) AFM image of crack tip structure

재하고 있다. 이것들의 전위는 어느 것이나 균열면과 접하는 (111) 면상에 생성되어 있으며, 어느 것이나 나선 성분이 강하고 그 부호는 균열끝 전방이 왼쪽 감기(L-H), 후방에서는 오른쪽 감기(R-H)로 되어 있다. 이와 같은 분포는 Fig. 6(c)에 보이는 것과 같이 균열면과 slip 면의 교차선상에 존재하는 전위점에서 루프상으로 전위가 넓혀진 것으로 이해된다. 이와 같은 전위는 실온에서 균열을 도입한 것 만으로는 관찰이 되지 않는다. 즉 그 생성원인은 압흔에 부수된 잔류응력장에 의해 발생한 균열끝 응력집중이 승온에 의해 이동도가

증가한 전위로 인하여 완화되기 때문이다. 또 이 전위분포는 기본적으로 Fig. 5(c)에는 45° shear-type의 소성역의 생성을 의미한다. 거기서 균열끝 근방의 표면전위를 원자간역현미경 (AFM)으로 직접 관찰하였다. Fig. 6(e)는 전위생성후의 AFM 상이며 crack의 근방에 {111}면의 흔적에 따라 스텝 높이가 수 nm 이내의 아주 미세한 slip band(대)가 관찰된다. 이것들 slip 대는 Fig. 5(c)에서 보인 균열끝 소성역의 양식에 대응하여, 상술의 전원분포에서 예상되는 변형과도 잘 부합된다.

평면응력상태는 잘 알려진 바와 같이 재료가 얇

은 경우에 생기는 소성역이지만 두꺼운 시료에 있어서의 균열끝에서는 관련된 방향의 구속에 의해 평면 strain 상태에서의 변형이 된다. 평면 strain 상태에서의 모드 I 인장변형 양식으로 하여 소위 hinge-type 소성역[13]을 형성하는 균열이 뒹을 알 수 있게 된다. Fig. 6(b)에는 hinge-type 소성역을 형성하는 균열끝 전위의 명확한 상을 보였다. 여기서 균열회전방향 [01-1]을 축으로 하여 시료 holder 를 약 60° 회전시켜서 관찰하였다. 일렬로 정렬하고 있는 전위는 박막면에 대하여 수직으로 서있는 전위 군이다. 이들 전위의 운동방향은 전위면을 이어 놓는 방법으로서 그림 중의 좌방향 (균열에서 멀어지는 방향) 이라는 것을 알 수 있다. 여기서도 동일하게 소멸실험과 상 contrast 법을 써서 전위는 성격을 분석 한 결과, 전위선 방향과 버거스벡터의 각도가 60 도가 되는 소위 60° 전위이라는 것을 알았다. 또 전위의 extra half plane 은 Fig. 6(b)에서 보이는 것 같이 되어 있다는 것도 알 수 있었다. 이 전위의 배치는 Fig. 1 에 보인 차폐전위의 배치와 같다. 이들 전위는 균열끝의 응력집중을 완화하는 형태라는 것을 보이고 있는 것이다. Fig. 6(f)에 균열끝 근방의 AFM 관찰상을 보이지만, Fig. 6(e)과 같이 {111}면 흔적에 따른 수 nm 의 slip 대의 step 이 균열끝 근방에서 관찰된다. 이들 slip 대도 Fig. 5(d)에서 보인 균열끝 소성역의 양식과 같이 위에서 서술한 전위 분포에서 예상되는 변형과도 잘 일치되는 것을 알 수 있다.

6. 결론

본 원고에서는 재료의 인성에 영향을 주는 균열끝 근방의 격자결함 특히 전위에 의한 영향인 응력차폐효과에 관하여 정리하여 해설하여 보았다. 균열끝에서 격자결함과 파괴를 연결하는 결과를 이용하여 파괴물리를 연구하는 것은 아직 까지 가느다란 실마리를 제공하였을 뿐이다. 이를 바탕으로 앞으로 이 분야에서 보다 많은 발전을 이룩할 수 있으리라 판단된다.

본 논문은 한국소성가공학회와 일본소성가공학회의 번역 게재 협정에 의하여 저자의 허락을 생략하고 번역하여 게재합니다.

참 고 문 헌

- [1] Bulatov, V., Abraham, F. F., Kubin, L., Devincere, B. & Yip, S. : Nature, 391 (1998), 669-692.
- [2] John, C. St.: Philos. Mag., 32 (1975), 1193-1212.
- [3] Ohr, S. M.: Mater. Sci. Eng., 72 (1985), 1-35.
- [4] Thomson, R.: Solid State Physics, 39 (1986), 1-129, Academic Press New York.
- [5] Lin, I. H. & Thomson, R.: Acta. Metall., 34 (1986), 187-206.
- [6] Narita, N., Higashida, K. & Kitano, S.: Scr. Metall. Mater., 21 (1987), 1273-1278.
- [7] Griffith, A. A. : Philos. Trans. R. Soc. London, A221 (1920), 163-198.
- [8] Tanaka, M., Kigashida, K., Nakashima, H., Takagi, H. & Fujiwara, M. : Int. J. Fract., 139 (2006), 383-394.
- [9] Higashida, K. & Narita, N.: Mater. Trans. JIM, 42 (2001), 33-40.
- [10] Higashida, K., Okazaki, S., Morikawa, T. & Onodera, R. : ibid., 39 (1998), 967-974.
- [11] Higashida, K., Narita, N., Tanaka, M., Morikawa, T., Miura, Y. & Onda, R. : Philos. Mag., A82(2002), 3263-3273.
- [12] Tanaka, M. & Higashida, K. : J. Electron Microsc., 53 (2004), 505-509.
- [13] Harn, G. T. & Rosenfield, R. : Acta Met., 13 (1965), 293-306.
- [14] Hirsch, P. B. & Roberts, S. G. : Philos. Trans. R. Soc. London, A335 (1997), 1991-2002.
- [15] Tanaka, M., Higashida, K., Kishikawa, T. & Morikawa, T. : Mater. Trans. JIM, 43 (2002), 2169-2172.