

GND 효과에 의한 소성 구배의 다결정 고체 거동에 대한 영향

Effect of Plastic Gradient from GND on the Behavior of Polycrystalline Solids

정 상 업* 한 동 석†
Chung, Sang-Yeop Han, Tong-Seok

요 지

재료의 마이크로 스케일 해석에서 결정의 geometrically necessary dislocation(GND) 효과에 의한 소성 구배(plastic gradient)의 고려는 재료의 소성 거동에 큰 영향을 미칠 수 있다. 본 연구에서는 먼 거리(long range) 전위(dislocation)의 영향(또는 GND 효과)을 고려하여 소성 구배의 영향을 받는 다결정 고체(polycrystalline solids)의 거동을 유한요소해석을 이용하여 살펴보았다. 탄성(elastic)과 소성(plastic) 변형에 추가적으로 먼 거리 변형률(long range strain)을 고려한 항(term)이 포함된 변형 구배(deformation gradient)의 multiplicative decomposition 모델을 기반으로 하여 소성 구배 효과를 해석 모델에 포함하였다. 먼 거리 변형률에 의한 영향을 살펴보기 위해 구배 경화 계수(gradient hardening coefficient)와 먼 거리 변형률 길이에 대한 재료 변수(parameter)가 사용되었다. 각각의 계수들이 다결정 고체의 거동에 미치는 영향을 확인하기 위해 두 변수의 적용에 따른 다결정 고체의 거동을 분석하였다. 단결정 및 다결정 재료의 GND 효과에 의한 소성 구배를 고려해서, 고려하지 않은 경우와 비교하여 발생하는 경화(hardening)의 차이를 분석함으로써 GND의 다결정 고체 거동의 영향을 확인하였다.

핵심용어 : 미세구조, 다결정 재료, 결정 소성, 전위, 유한요소해석, 소성 구배 모델

Abstract

Plastic gradient from geometrically necessary dislocation(GND) can affect material behavior significantly. In this research, mechanical behavior of polycrystalline solid is investigated using the finite element method incorporating plastic gradient from long range dislocation or GND effect. Plastic gradient effect is implemented in the analysis model by considering a long range strain term as well as elastic and plastic terms in the multiplicative decomposition. In the model, gradient hardening coefficient and length parameter are used to evaluate the effect of the long range strains and sensitive study is conducted for the parameters. It is confirmed that the GND amplifies hardening response of polycrystals compared with the single crystal.

Keywords : *microstructure, polycrystalline solids, crystal plasticity, dislocations, finite element method, plastic gradient model*

1. 서 론

전위(dislocation) 거동은 다결정 재료의 소성 변형이 발생하는데 주요한 원인이다. 따라서 결정의 소성 거동을 보다 자세히 이해하기 위해서는 결정에서 전위의 거동에 대한 정밀한 이해가 필요하다. 기존의 결정 소성 모델들도 결정의 거동을 이해하는데 비교적 정확한 결과를 보였지만, 재료 거동 시 발생하는 여러 가지 영향을 고려한 해석을 위해서 해석 모델을

더욱 발전시킬 필요성이 제기되어 왔다. 이와 관련해서, 많은 전위가 누적된 결정 입자사이의 적합조건을 만족하기 위해 발생하는 효과를 관찰하기 위하여 소성 구배(plasticity gradient)를 이용하는 연구가 널리 수행되고 있다. 이와 관련되어 가장 널리 알려진 모델은 Hall-Petch 관계(Hall, 1951; Petch, 1953)일 것이다. Hall-Petch 관계를 통해 결정 크기가 감소함에 따라 결정의 경계면이 전위의 slip을 억제하여 재료의 강도가 증가한다는 결과가 도출되었다. 이를 바탕으

† 책임저자, 정회원 · 연세대학교 사회환경시스템공학부 조교수
Tel: 02-2123-5801 ; Fax: 02-364-5300
E-mail: tshan@yonsei.ac.kr

* 학생회원 · 연세대학교 사회환경시스템공학부 박사과정

• 이 논문에 대한 토론을 2011년 6월 30일까지 본 학회에 보내주시면 2011년 8월호에 그 결과를 게재하겠습니다.

로 geometrically necessary dislocation(GND)과 소성 구배가 제안되었다(Ashby, 1970). 최근에는 Hartley(2003)가 제안하였던 변형 구배(deformation gradient)의 다중 분할(multiplicative decomposition)에서 기존의 결정 소성 모델에서 탄성과 소성 변형에 추가적으로 GND를 고려하여 세 개의 kinematic motion으로 정의한 연구가 Han 등(2006)과 Gerken 등(2007, 2008)에 의하여 수행되었다.

본 연구에서는 Gerken 등(2008)에 의해 제안된 모델을 활용하여 GND 효과를 고려한 다결정(polycrystal) 고체의 거동을 모사하였다. 기존의 연구에서는 GND 효과를 고려한 단결정(single crystal) 모델을 사용하여 소성 구배의 영향을 조사하였지만, 본 연구에서는 다결정 모델을 사용하여 GND 효과를 적용하였을 때와 적용하지 않은 경우의 재료 거동의 차이를 분석함으로써 다결정 고체 거동에서 소성 구배의 영향을 살펴보았다. Macro 스케일의 응력-변형을 곡선 이외에 결정의 격자 변형률(lattice strain)을 살펴봄으로써 미세 영역에서 소성 구배의 영향에 대해서도 확인하였다.

2. GND 효과를 고려한 다중 분할(multiplicative decomposition)

소성 구배를 고려한 다결정 미세구조의 거동의 해석을 위해 Gerken 등(2008)이 제안한 모델을 사용하였다. Gerken은 기존에 Hartley(2003)가 제안한 모델을 바탕으로, 소성 구배를 고려한 변형 구배(deformation gradient)의 다중 분할(multiplicative decomposition)을 그림 1과 같이 제시하였다. Gerken 등(2007, 2008) 및 Chung 등(2010)의 선행 연구를 살펴보면, 다중 분할의 개념은 대변형 해석 뿐만 아니라 미소 변형의 영역에도 적용 가능하며, 이를 고려한 해석 결과가 실제 실험의 결과와도 잘 맞는 것이 선행 연구(Han 등, 2005)를 통해서 나타나 있다.

그림 1에서 F_{ij}^d 는 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 구성된 소성 변형을 의미한다. F_{ij}^e 는 탄성 변형을 의미하며 left stretch 텐서 V_{ij} 와 rotation R_{ij} 로 구성되어 있다. 그림 1에서 \mathbf{X} 는 reference configuration을 나타내며 $\bar{\mathbf{X}}$, $\tilde{\mathbf{X}}$, $\hat{\mathbf{X}}$ 는 intermediate configuration, \mathbf{x} 는 current configuration을 의미한다. 변형 구배의 다중 분할은 다음과 같이 표현된다.

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

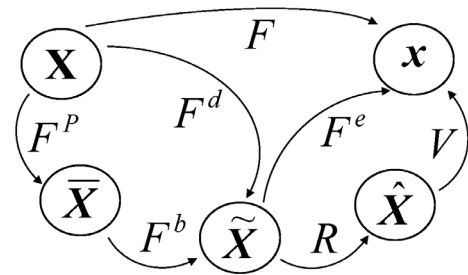


그림 1 변형 구배의 multiplicative decomposition (\mathbf{X} 는 reference, $\bar{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{X}}$ 는 intermediate configuration들, \mathbf{x} 는 current configuration을 의미)(Gerken 등, 2008)

탄성 변형이 $V_{ij} = \delta_{ij} + \xi_{ij}$, 먼 거리 변형이 $F_{ij}^b = \delta_{ij} + \eta_{ij}$ (여기서, δ_{ij} 는 Kronecker delta, ξ_{ij} 는 미소 탄성 변형률 텐서, η_{ij} 는 미소 먼 거리 변형률 텐서)와 같이 표현된다고 가정하면 변형비율(rate of deformation, d_{ij})과 spin 텐서(w_{ij})의 근사는 다음과 같이 표현된다.

$$d_{ij} = \dot{\xi}_{ij} + \dot{\eta}_{ij} + \hat{D}_{ij}^p + \hat{\eta}_{ik} \hat{W}_{kj}^p + \hat{W}_{ik}^p \hat{\eta}_{kj} + \xi_{ik} w_{kj} - w_{ik} \xi_{kj} \quad (2)$$

$$w_{ij} = \hat{W}_{ij} + \xi_{ik} \hat{D}_{kj} - \hat{D}_{ik} \xi_{kj} \quad (3)$$

여기서, \hat{D}_{ij} 와 \hat{W}_{ij} 는 reference configuration에서 $\hat{\mathbf{X}}$ configuration까지의 변형비와 spin 텐서이고, D_{ij}^p 와 W_{ij}^p 는 소성 변형비와 spin 텐서이며, $(\hat{\cdot})_{ij} = R_{ik}(\cdot)_{kl} R_{lj}^T$ 이다.

3. 다결정 미세구조의 유한요소 시뮬레이션

다결정 미세구조의 소성 구배를 고려한 역학적 거동을 확인하기 위하여 결정 소성 모델을 포함한 유한요소법으로 재료의 거동을 살펴보았다. 유한요소법과 구성 모델은 Gerken 등(2007, 2008)을 참고하였으며, 본 논문에서는 모델에 대해서 간략하게 소개한다.

재료의 탄성 및 먼 거리 변형률은 결정격자의 distortion에 의하여 발생한다. 총 격자 변형률(total lattice strain)은 식 (4)와 같이 표현되며, Kirchhoff 응력과 격자 변형률과의 관계는 식 (5)와 같이 나타낸다.

$$\varepsilon_{ij} = R_{ik} \eta_{kl} R_{lj}^T + \xi_{ij} \quad (4)$$

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (5)$$

식 (4)에서 η_{kl} 는 미소 먼 거리 변형률 텐서를 나타내고

ξ_{ij} 는 미소 탄성 변형률 텐서를 나타낸다. 식 (5)에서 C_{ijkl} 은 탄성 텐서이다.

먼 거리 변형률을 계산하기 위하여 Burgers 벡터를 사용하였으며, 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(그림 2). 이와 관련된 응력과 변형률의 식은 Gerken 등(2007, 2008)을 참고하였다. 소성 slip의 구배와 net Burgers 벡터와의 관계는 식 (6)과 같다.

$$\rho_b = \frac{\partial \gamma}{\partial x_i} s_i \tag{6}$$

여기서, γ 는 s_i 방향으로의 slip을 나타낸다.

결정 소성의 모델은 Gerken과 Dawson(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 다음과 같이 표현된다.

$$g^\alpha = G_1(\gamma) + G_2\left(\frac{\partial \gamma}{\partial x_i}\right) \tag{7}$$

식 (7)에서 전위의 각 항은 독립적으로 작용한다. $G_1(\gamma)$ 는 SSD에 의한 hardness를 나타내며 다음과 같은 포화 모델(saturation model)에 의해서 계산된다.

$$\frac{\partial}{\partial t} G_1(\gamma) = h_0 \left(\frac{g_s - g^\alpha}{g_s - g_0} \right) \dot{\gamma}, \quad g_s = g_{s0} \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{s0}} \right)^{m'} \tag{8}$$

여기서, $h_0, g_0, g_{s0}, \dot{\gamma}_{s0}, m'$ 은 모델 매개변수이다. $G_2(\partial \gamma / \partial x_i)$ 는 net Burgers 벡터에 의해서 표현되는 구배 경화(gradient hardness)이며, $G_2(\partial \gamma / \partial x_i) = \beta \mu \sqrt{\rho_b}$ 로 나타낼 수 있다. 여기서 β 는 구배 경화 계수(gradient hardness coefficient)이고, μ 는 전단 계수(shear modulus), ρ_b 는 전위 밀도이다. 식 (8)에서 G_1 과 G_2 는 서로 독립적으로 작용한다.

Current configuration에서 평형 방정식의 약형(weak form)은 다음과 같다.

$$\int_B (\sigma'_{ij} \psi_{i,j} - p \psi_{i,i}) dV - \int_B b_i \psi_i dV - \int_{\partial B_o} t_i \psi_i dS = 0 \tag{9}$$

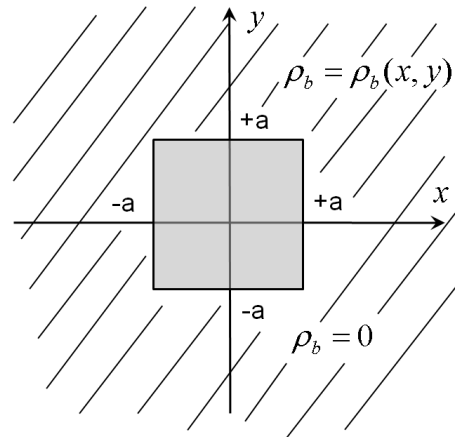


그림 2 Net Burgers 벡터 분포

여기서, Cauchy 응력은 deviatoric과 spherical 부분으로 구분된다. $\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} + p \delta_{ij}$ 이며 $p = (1/3) \sigma_{kk}$ 이다. ψ_i 는 weight function이고 b_i 는 body force이다. ∂B_o 에서 $t_i = \sigma_{ij} n_j$ 로 계산되며, 여기서 n_j 는 ∂B_o 표면에서의 법선 벡터이다. 평형 방정식으로부터의 식 전개 및 자세한 사항은 Gerken 등(2007, 2008)에 나타나 있다.

다결정 미세구조의 유한요소격자는 단위 정육면체 모델을 8-절점 정육면체 요소(element)를 사용하여 표현하였으며, 요소 당 27개의 적분점을 갖는다. 메쉬는 총 1,000개의 정육면체 요소로 구성되었으며, 각 결정은 정육면체 요소의 군집으로 표현되었다. 대칭 경계치 조건(symmetric boundary condition)은 $x=0, y=0, z=0$ 인 평면에 적용되며 나머지 측면은 경계치 조건에 의해 구속받지 않는다. 다결정 미세구조의 변형을 살펴보기 위해서 z 축 방향의 최상단면에 속도를 통한 변위를 주어 인장에 의한 미세구조의 변형을 살펴보았다. 결정의 orientation은 임의로 샘플링하여 각 결정에 할당하였다. 본 연구에서는 대상 재료의 항복점을 넘어서 0.08% 변형률까지 인장을 주어 소성 구배를 고려한 미세구조의 거동을 살펴보았다.

4. 적용 결과

4.1 다결정 고체의 소성 거동

본 연구에서는 다결정 고체의 소성 거동을 살피기에 앞서, 기존의 단결정 연구와의 비교를 위하여 단결정 미세구조 가상 시편을 모델링하여, 표 1에 나타나 있는 실험으로부터 얻은 알루미늄의 재료 변수를 사용하였다(Dumoulin 등, 2005). 재료 변수들은 표 1에 제시되어 있다.

그림 3의 단결정 가상 시편의 크기는 각 변의 길이가 100 μm 인 정육면체를 사용하였으며, x, y, z 방향을 10등분하여

표 1 알루미늄의 단결정 실험으로부터 얻은 재료 변수

탄성(Elasticity)		
탄성 계수	E	70GPa
포아송 비	ν	0.33
소성 및 경화(Plasticity and hardening)		
초기 경화	g_0^α	11MPa
Slip rate coefficient	$\dot{\gamma}_0$	$1.0S^{-1}$
Slip rate sensitivity	m	0.1
Hardening coefficient	h_0	4MPa
Nominal saturation	g_0	133MPa
Saturation coefficient	g_{s0}	160MPa
Saturation slip rate	$\dot{\gamma}_{s0}$	$5 \times 10^{-9}S^{-1}$
Saturation exponent	m'	0.005
먼 거리 구배(Long range and gradient)		
먼 거리 변형률 길이	a	$1\mu m$
구배 경화 계수	β	$1 \times 10^{-6} \sqrt{m}$

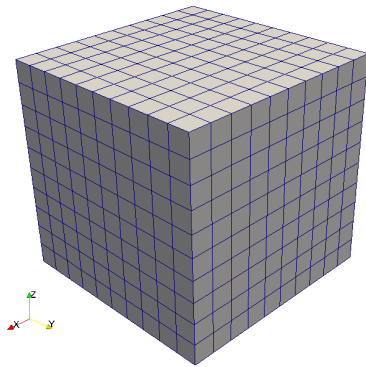


그림 3 단결정 미세구조 시편

총 1,000개의 8절점 요소로 구성하여 표현하였다. 미세구조의 역학적 거동을 살펴보기 위하여 z 축 상단 면($z=100\mu m$)에 $0.01\mu m/s$ 의 속도(velocity)를 주어 그림 5와 같이 1%까지 인장 변형률이 발생하도록 하였다.

본 연구는 GND에 의하여 발생하는 소성 구배가 재료 거동에 미치는 영향을 살펴보는 것을 목적으로 한다. GND는 결정의 전위에 의하여 다른 결정의 거동이 영향을 받게 되는 현상을 의미한다. GND에 의해 발생하는 효과를 고려하기 위해서 재료 변수 먼 거리 변형률 길이 a 와 β 의 값을 Dumoulin 등(2005)의 실제 실험 결과와 Gerken 등(2008)이 사용한 가상 시편과 재료 변수의 관계를 참고하여 $a=1.0E-6m$, $\beta=1.0E-6\sqrt{m}$ 로 적용하였다. 선행 연구에 따르면 먼 거리 변형률과 구배 경화 계수는 서로 개별적으로 작용하며 각각 거시영역(macro-scale)의 kinematic type hardening과 isotropic type hardening에 영향을 준다. 그림 4와 5를 살펴보면 단결정 미세구조 가상 시편의 거시적(macroscopic) 응력-변형률 곡선에서 GND를 고려하지 않은 경우와 비교하여 a 와 β 의 변

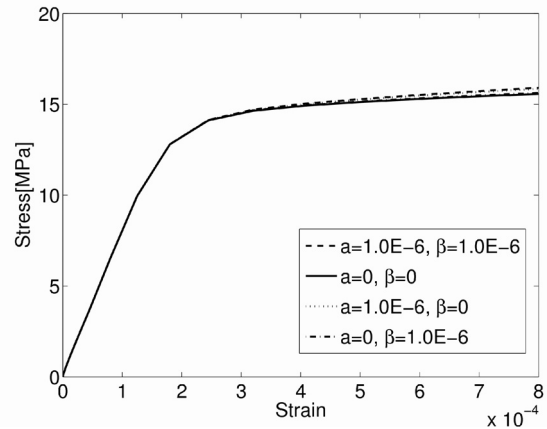


그림 4 단결정 미세구조 시편의 응력-변형률 곡선(변형률 0.08%)

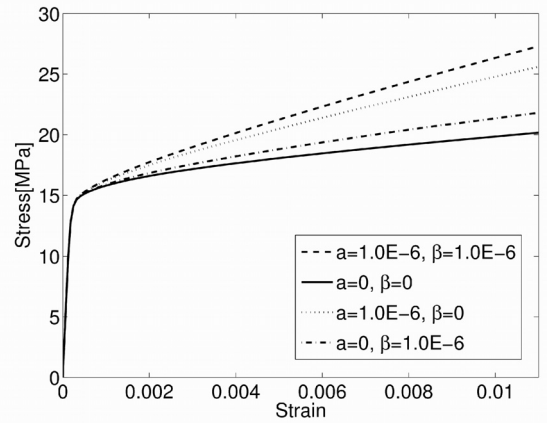


그림 5 단결정 미세구조 시편의 응력-변형률 곡선(변형률 1%)

수를 모두 고려하였을 때 소성 영역에서의 재료 강도가 증가하는 것을 관찰할 수 있다. 그림 4에서 시편의 변형률이 0.08% 일 때에는 소성 구배의 고려에 의한 강도의 변화가 뚜렷하게 나타나지 않지만, 그림 5에서 시편의 변형률이 1%에 도달하였을 때 강도를 살펴보면 소성 구배의 고려에 의하여 재료의 강도가 증가하는 현상이 뚜렷하게 나타난다. 식 (7)에서 나타난 바와 같이, a 와 β 는 모두 G_2 항과 관련된 재료 변수로서 경화를 증가시키는 요인이 된다. 따라서 재료의 경화를 고려하는 과정에 있어서 먼 거리 변형률과 경화 구배 계수를 고려하면, 소성 구배와 관련된 항을 고려하지 않은 경우와 비교하여 재료 거동 시 발생하는 추가적인 경화를 파악할 수 있다. 그림 5의 결과는 Gerken 등(2007, 2008)의 기존의 단결정 소성 구배 연구와 동일한 경향을 나타낸다. a 와 β 의 각 변수가 소성 구배에 미치는 영향을 살펴보기 위하여 그림 5의 응력-변형률 곡선에서의 응력을 비교하면 a 가 β 보다 경화에 더 큰 영향을 미치는 것을 알 수 있다. 이러한 결과는 먼 거리 변형률이 경화 계수보다 실제 소성 거동에 더 큰 영향을 주는 것을 나타낸다. 이러한 결과는 Gerken 등(2007)의 결과와 동일한 경향을 나타낸다.

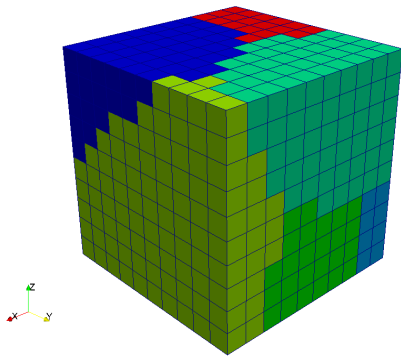


그림 6 다결정 미세구조 시편

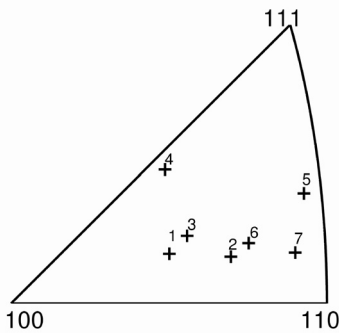


그림 7 다결정 방위(orientation)에 대한 inverse pole figure (총 7개의 결정, '+'는 각 결정의 z축(하중 방향)에 대한 orientation 정보를 표현, 숫자는 결정의 번호를 의미함)

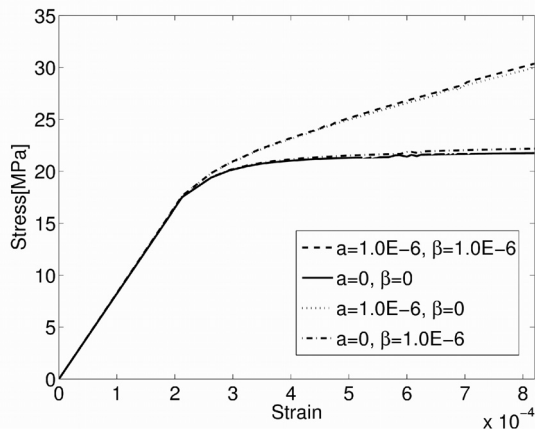


그림 8 다결정 미세구조 시편의 응력-변형률 곡선(0.08%)

단결정 미세구조의 거동을 바탕으로 다결정 미세구조의 소성 거동을 살펴기 위해서 그림 6의 다결정 미세구조를 모델링하였다. 단결정의 경우와 마찬가지로 다결정 미세구조는 x, y, z 방향으로 10등분하여 총 1,000개의 요소로 표현되었으며, 총 7개의 결정으로 구성되어 있다. 각 결정에 대한 orientation은 임의로 할당되었으며, orientation 정보는 그림 7의 inverse pole figure에 나타나 있다. Inverse pole figure는 결정축(crystal axes)과 시편의 특정(하중) 방향과의 분포 관계를 나타낸다(Cullity 등, 2001). 소성 구배를 고려한 다결정의 거동을 살펴보기 위하여 단결정과

동일하게 경계면 조건과 z 축 상단면에 인장 변형률을 주었다. 그림 8의 다결정 미세구조의 거동을 살펴보면 단결정의 경우와 마찬가지로 a 와 β 의 재료 변수를 고려하면, 소성 부분의 경화가 증가하는 것을 확인할 수 있다. 다결정 미세구조의 경우, 소성 구배의 고려에 의한 경화의 증가 효과가 동일한 변형률(0.08%)에서 단결정의 거동과 비교하여 매우 뚜렷하게 관찰된다(그림 4와 그림 8). 또한 다결정 고체의 재료 강도가 동일한 변형률에서 단결정보다 더 큰 것을 확인할 수 있다. 이를 통해 다결정 고체의 거동과 단결정 고체의 거동에 차이가 있음을 확인할 수 있고, 다결정 고체도 단결정의 경우와 마찬가지로 소성 구배의 고려에 의하여 재료의 경화가 증가하며, 다결정 고체의 경우가 그 효과가 더 뚜렷하게 나타나는 것을 알 수 있다. 다결정 고체의 경우 연속체 역학의 관점에서 보면 재료를 구성하고 있는 결정들 간의 orientation이 다르기 때문에 결정 경계면에서 전위가 누적되고, 전위가 경계면을 통과하기 위해서는 많은 에너지가 필요하기 때문에 재료의 강도가 단결정에 비해 증가하게 된다.

다결정 고체의 응력-변형률 곡선에서 변형률이 0.08%일 때의 응력을 비교하면 a 가 β 보다 경화(hardening)에 더 큰 영향을 미치는 것을 확인할 수 있다. 즉, 다결정 고체의 소성 구배에서 a 와 β 의 각 모델링 변수를 고려하는데 있어서 먼 거리 변형률이 경화와 관련된 계수보다 실제 소성 거동에 있어 더 큰 영향을 끼치는 것을 알 수 있다. 이는 그림 4와 5의 단결정 고체의 거동의 경우와 동일한 결과이다. a 와 β 가 식 (7)에서 의미하는 바를 통해 살펴보면, 경화 구배 계수보다 결정의 전위의 뒤틀림에 대한 방향과 크기를 나타내는 Burgers 벡터의 밀도가 소성 구배를 고려한 재료의 거동에 더 큰 영향을 미치는 것을 확인할 수 있다. 이는 소성 구배를 고려하였을 때, 경화가 증가하는 단결정 시뮬레이션의 결과와 일관된 것으로써, 이를 통해 GND를 고려한 다결정 고체의 거동이 단결정과 같이 소성 구배의 영향을 받는 것을 확인할 수 있다. 본 논문에서는 동일한 변수의 사용 시에 단결정과 다결정 고체에서 나타나는 효과의 차이를 나타내기에는 0.08%의 변형률에서도 그 차이가 뚜렷하게 관찰되어, 0.08% 이후 1%의 변형률까지의 거동은 추가적으로 비교하지 않았다.

결론적으로 GND를 적용하여 소성 구배를 확인한 결과, 다결정 재료의 거동에 있어서도 GND의 고려 여부가 재료 소성 거동에 영향을 주는 것을 확인하였다.

4.2 결정의 lattice strain

소성 구배의 고려가 재료의 거동에 미치는 영향을 보다 자세히 살펴보기 위하여 미세 영역에서 결정의 격자 변형률

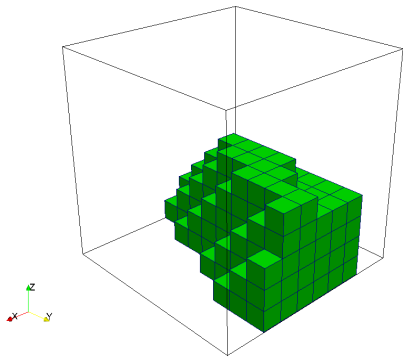


그림 9 다결정 미세구조 내 단결정 (155개의 요소로 구성, 그림 7의 3번 orientation)

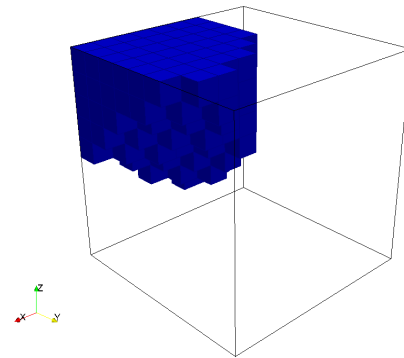


그림 11 다결정 미세구조 내 단결정 (148개의 요소로 구성, 그림 7의 5번 orientation)

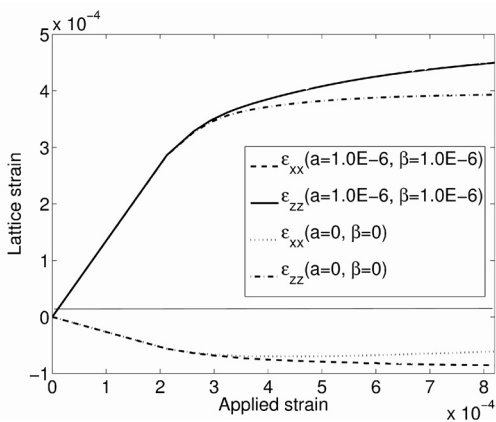


그림 10 단결정(그림 9)의 격자 변형률(Lattice strain)

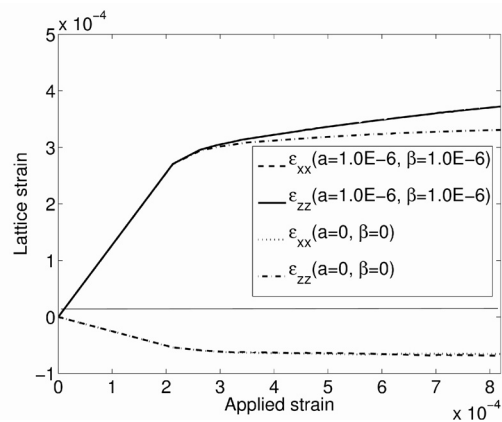


그림 12 단결정(그림 11)의 격자 변형률(Lattice strain)

(lattice strain)을 살펴보았다. 격자 변형률은 다결정 미세구조에서 결정의 변형률을 살펴보는 것이다. 격자 변형률을 살펴봄으로써 미세(micro) 영역에서의 결정 거동을 파악할 수 있다. 본 연구에서는 GND의 고려를 위한 재료 변수를 포함한 경우와 소성 구배를 고려하지 않은 경우의 재료 거동을 비교하여 미세 영역의 거동에서 소성 구배의 영향을 살펴보았다.

그림 9는 그림 6의 다결정 미세구조 가운데 하나의 결정을 나타내는 그림이다. 그림 9의 결정은 그림 7에 나타나 있는 3번 방위(orientation)를 가지고 있으며, 155개의 요소로 구성되어 있다. 그림 9에 나타난 결정의 격자 변형률은 그림 10에 나타나 있다. 그림 10을 살펴보면, 변수 $a(1.0E-6)$ 와 $\beta(1.0E-6)$ 을 모두 고려한 경우와 소성 구배를 고려하지 않은 경우의 격자 변형률의 차이를 확인할 수 있다. 그림 10에서 a 와 β 변수를 모두 고려한 격자 변형률이 고려하지 않은 경우에 비해서 증가하는 것을 확인할 수 있다. 즉, 예상되는 결과이지만, 결정의 미세 영역에서의 거동도 소성 구배의 영향을 받는 것을 알 수 있다. 그림 11은 그림 7의 다결정 미세구조 가운데 그림 9와는 다른 결정의 그림이다. 그림 11의 결정은 148개의 요소로 구성되어 있으며, 그림 7의 5번 orientation을 가지고 있다. 그림 12에 나타난 결정의 격자 변형률 역시 그림

10의 경우처럼 소성 구배의 영향을 고려하였을 때, 격자 변형률이 증가하는 사실을 확인할 수 있다. 그림 10과 그림 12의 격자 변형률의 결과를 살펴보면, 거시적 응력-변형률 곡선을 통해서 나타난 바와 같이 재료의 미세 영역에서의 거동에서도 소성 구배의 영향을 받는다는 것을 확인할 수 있다. 이러한 현상은 재료가 소성 거동을 할 때, 탄성 변형률(elastic strain)이 증가하는 것과 관련이 있다. 소성 구배를 고려하면, 거시적 응력-변형률 곡선에서 살펴본 바와 같이 재료의 강도가 증가하게 되고 이와 함께 탄성 변형률이 증가하여, 재료의 격자 변형률도 증가하게 되는 것이다. 또한 다결정 미세구조에 존재하는 결정 경계면에 의해 전위의 이동이 영향을 받고, GND 효과로 인하여 비균질(inhomogeneous)변형이 증가하는 사실을 통하여, 다결정 미세구조를 구성하고 있는 결정들의 격자 변형률이 소성 구배를 고려할 때 영향을 받는 것을 알 수 있다.

5. 결 론

본 연구에서는 먼 거리에서 전위의 영향을 고려하는 GND 효과를 적용하여 소성 구배의 영향을 받는 다결정 고체 가상 시편의 거동을 살펴보았다. 기존에 진행되었던 단결정 연구를

기반으로 다결정 재료의 거동을 살피는 것으로 확장하여 α (먼 거리 변형률 길이)와 β (gradient hardness coefficient)를 사용해서 GND 효과를 나타내는 각각의 변수가 재료의 소성 거동에 미치는 영향을 조사하였다. 그 결과 각각의 변수가 모두 독립적으로 재료의 소성 구간에서 경화에 영향을 주는 것을 확인하였다. 또한, 재료의 격자 변형률을 통해 살펴본 결과 미세 영역에서의 재료 거동도 소성 구배의 영향을 받는 것을 확인하였다. 결론적으로 다결정 재료의 거동 분석을 통해 단결정 거동의 경우와 마찬가지로 다결정 재료의 거동에서도 GND에 의한 소성 구배를 고려하는 것이 재료의 소성 거동을 정확히 예측하는데 있어서 큰 영향이 있는 것을 확인하였다. 본 연구의 결과를 활용하여 다결정 고체의 결정 경계면에서 전위의 누적에 따라 발생하는 영향을 예측할 수 있으며, 또한 다결정의 거동을 살펴보는 데 있어서, 결정 크기와 재료 거동의 상관관계를 예측하는 데에도 사용될 수 있다. 본 연구를 통하여 실제 재료의 소성 거동에 있어서 구배 효과를 고려하는 것이 재료의 거동에 영향을 미치는 것을 확인하였으므로, 본 연구를 바탕으로 모델 변수 등의 조정 등을 통하여 실제 실험의 결과와 시뮬레이션을 비교하는 연구가 추후에 진행될 수 있을 것이라 기대된다.

감사의 글

이 논문은 2008년 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구(KRF 2008-331-D00006)이며, 연구에 사용된 주요계산은 한국과학기술정보연구원(KISTI)에서 전략과제(KSC-2010-CI-0018)에서 슈퍼컴퓨터자원을 지원받아 수행되어 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- Acharya, A., Beaudoin, A.J.** (2000) Grain-Size Effect in Viscoplastic Polycrystals at Moderate Strains, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48, pp.2213~2230.
- Acharya, A.** (2001) A Model of Crystal Plasticity Based on the Theory of Continuously Distributed Dislocations, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49, pp.761~784.
- Ashby, M.F.** (1970) The Deformation of Plastically Non-Homogeneous Materials, *Philosophical Magazine*, 21, pp.399~424.
- Cullity, B.D., Stock, S.R.** (2001) *Elements of X-ray Diffraction*, Prentice Hall, New Jersey, p.677.
- Dumoulin, S., Taboulor, L.** (2005) Experimental Data on Aluminium Single Crystals Behaviour, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers - Part C: Mechanical Engineering Science*, 219, pp.1159~1167.
- Evers, L.P., Parks, D.M., Brekelmans, W.A.M., Geers, M.G.D.** (2002) Crystal Plasticity Model with Enhanced Hardening by Geometrically Necessary Dislocation Accumulation, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50, pp.2403~2424.
- Gerken, J.M., 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.
- Gerken, J.M., Dawson, P.R.** (2008) A Crystal Plasticity Model that Incorporates Stresses and Strains Due to Slip Gradients, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56, pp.1651~1672.
- Gerken, J.M., Dawson, P.R.** (2008) A Finite Element Formulation to Solve a Non-Local Constitutive Model with Stresses and Strains Due to Slip Gradients, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197, pp.1343~1361.
- Gudmundson, P.** (2004) A Unified Treatment of Strain Gradient Plasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52, pp.1379~1406.
- Gurtin, M.E.** (2002) On the Plasticity of Single Crystals: Free Energy, Microforces, Plastic-Strain Gradients, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48, pp.989~1036.
- Hall, E.O.** (1951) The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results, *Proceedings of the Physical Society*, 64, pp.747~753.
- Han, C.S., Roters, F., Raabe, D.** (2006) On Strain Gradients and Size-Dependent Hardening Descriptions in Crystal Plasticity Frameworks, *Metals and Materials International*, 12, pp.407~411.
- Hartley, C.S.** (2003) A Method for Linking Thermally Activated Dislocation Mechanisms of Yielding with Continuum Plasticity Theory, *Philosophical Magazine*, 83, pp.3783~3808.
- Petch, N.J.** (1953) Cleavage Strength of Polycrystals, *International Iron and Steel Institute*, 174, pp.25~28.
- 논문접수일 2010년 10월 15일
 - 논문심사일 1차 2010년 10월 20일
2차 2011년 3월 8일
 - 게재확정일 2011년 3월 9일