

단결정 철의 소성에 대한 멀티스케일 모델링

전종배¹ · 이병주^{1,2} · 장영원[#]

Multi-scale Modeling of Plasticity for Single Crystal Iron

J. B. Jeon, B. J. Lee, Y. W. Chang

(Received June 21, 2012 / Revised July 20, 2012 / Accepted July 25, 2012)

Abstract

Atomistic simulations have become useful tools for exploring new insights in materials science, but the length and time scale that can be handled with atomistic simulations are seriously limiting their practical applications. In order to make meaningful quantitative predictions, atomistic simulations are necessarily combined with higher-scale modeling. The present research is thus concerned with the development of a multi-scale model and its application to the prediction of the mechanical properties of body-centered cubic(BCC) iron with an emphasis on the coupling of atomistic molecular dynamics with meso-scale discrete dislocation dynamics modeling. In order to achieve predictive multi-scale simulations, it is necessary to properly incorporate atomistic details into the meso-scale approach. This challenge is handled with the proposed hierarchical information passing strategy from atomistic to meso-scale by obtaining material properties and dislocation mobility. Finally, this fundamental and physics-based meso-scale approach is employed for quantitative predictions of the mechanical response of single crystal iron.

Key Words : Multi-scale Modeling, Molecular Dynamics, Discrete Dislocation Dynamics, Iron, Yield Stress

1. 연구 배경 및 목적

재료의 거시적인 거동은 재료의 미시적인 특성에 근원을 두고 있으므로, 재료의 성질을 예측하기 위해서는 미시적 단계에서의 재료 거동에 대한 근원적인 분석과 이해가 요구된다. 이러한 관점에서 원자단위 모델링은 실험적 접근이 용이하지 않은, 원자단위에서의 재료 거동에 대한 연구에 널리 활용되어 왔으며 컴퓨터 계산성능의 증가, 실험 및 이론적 분석의 어려움으로 인해 그 중요성이 부각되고 있고 있다. 따라서 최근 원자단위 모델링을 활용하여 재료의 물성을 예측하고, 우수한 물성을 갖는 재료를 설계하려는 시도가 활발히 진행 중이다.

하지만 원자단위 모델링 기법은 본질적인 접근법 및 계산성능의 한계로 인해 다룰 수 있는 시스템의 시간과 크기의 제약이 있다[1]. 원론적으로 이와 같은 제약은 보다 큰 계를 다룰 수 있는 모델링 기법과의 연계를 통해 해소될 수 있다. 이러한 멀티스케일 모델링은 개별 모델링 기법이 가지는 한계를 극복해 줄 방법으로 여겨지고 있으나, 실질적으로 이에 대한 구체적인 방법론이 정형화 및 체계화되어 있지 않다[2, 3]. 따라서 본 연구에서는 분자 동역학(Molecular dynamics)와 3차원 전위동역학 모델링(Discrete dislocation dynamics)을 활용한 멀티스케일 모델링에 대한 체계를 제안하며, 이를 통해 단결정 철의 소성현상에 대한 정성적, 정량적 예측을 시도하였다.

1. 포항공대 신소재공학과

2. 포항공대 첨단원자력공학과

교신저자 : 포항공대 신소재공학과,

E-mail: ywchang@postech.ac.kr

2. 멀티스케일 모델링 체계

재료의 변형은 거시적인 관점에서 재료의 연속적인 유동(flow)으로 바라볼 수 있으나, 이러한 유동은 미시적인 관점에서는 전위의 개별적인 그리고 집단적인 움직임에 근원을 두고 있다. 따라서 단결정 철의 소성에 대한 멀티스케일 모델링 체계를 세우기 위해서는 먼저 해당재료 전위 성질에 대한 이해가 필요하다. 체심입방정 철의 전위 특성은 아래와 같이 요약할 수 있다. 첫째, 나선전위의 코어 구조가 non-planar 하므로 planar 코어를 갖는 칼날전위에 비해 높은 Peierls 응력을 필요로 한다. 둘째, 나선전위의 활주는 열적 활성화된 칸크(kink)의 핵생성에 의존한다. 이것이 체심입방정 철의 항복강도가 온도에 크게 의존하는 이유이다. 셋째, 전위의 움직임은 Peierls 응력을 기준으로 외부 응력이 Peierls 응력보다 낮은 경우에는 열적 활성화 거동을 보이고, 외부 응력이 Peierls 응력보다 높은 경우에는 열적 둔화 거동(Thermal drag) 을 보인다.

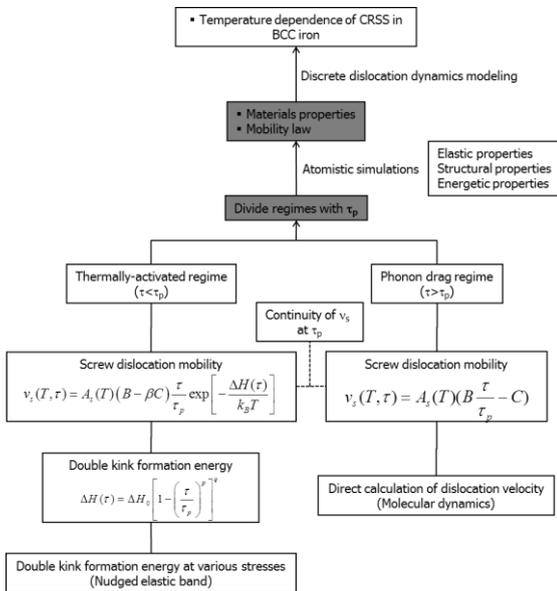


Fig. 1 The proposed framework of multi-scale modeling on plasticity of single crystalline BCC iron

이러한 이론적 배경을 바탕으로 단결정 철의 변형 거동에 대한 멀티스케일 모델링 체계를 세워보았다(Fig. 1). 먼저 전위의 기본적인 특성인 코어 구조와 코어 에너지, Peierls 응력 등을 분자

동역학을 이용하여 계산하였다. 본 연구에서 이용한 3차원 전위동역학 모델링(Discrete dislocation dynamics)은 전위 코어에서 발생하는 특이점 문제(singularity problem)을 해결하기 위해 코어 에너지와 탄성 에너지를 따로 구분하여 처리하므로, 따라서 코어의 물리적인 크기와 코어 에너지를 분자동역학을 이용하여 계산할 필요가 있다. 그리고 전위 간의 탄성적인 상호작용은 선형 탄성 방정식으로 기술되었으며, 이를 구성하는 개별 탄성계수는 분자동역학으로 계산하였다.

외부 응력이 Peierls 응력 (τ_p) 보다 낮은 경우인 열적 활성화 구간에서의 전위 이동도(mobility)는 분자동역학을 이용한 직접적인 계산이 적합하지 않으므로 Arrhenius 형태의 속도식으로 기술하였다[4]. 이 때 나선 전위의 칸크 생성에 필요한 활성화 에너지는 최소 에너지 경로(minimum energy pathway)을 계산하는 모델링 기법인 nudged elastic band (NEB)를 이용하였다.

한편, 외부 응력이 τ_p 보다 높은 경우의 전위 이동도는, 직접적인 분자동역학 계산을 적용하여 계산할 수 있으며, 선형함수 형태를 가지게 된다. 위 두 구간에서의 각각의 전위 이동도 함수는 τ_p 에서 연속성이 유지되어야 한다는 경계조건 하에서 전위 이동도 함수를 구성하는 모델상수가 자동적으로 결정될 수 있다. 이렇게 얻어진 전위 이동도 함수 및 재료 특성은 준 거시적 3차원 전위동역학 모델링을 구성하는 입력 함수로 이용된다.

3. 결과 및 고찰

3.1 전위 특성에 대한 원자단위 모델링

분자동역학을 이용하여 체심입방정 철의 전위 특성을 계산해보았다. 분자동역학 계산은 공개용 계산 코드인 LAMMPS를 이용하였고[5], 철 원자간의 상호작용은 Mendeleev가 개발한 embedded atom method(EAM) 형태의 포텐셜 모델로 기술하였다[6].

Fig. 2(a)에는 분자동역학 모델링으로 예측된 나선전위의 코어구조이다. 그림에서 알 수 있듯이, 포텐셜 모델에 따라서 두 개의 다른 코어 구조 즉, degenerate 형태와 non-degenerate 형태의 구조가 예측됨을 확인할 수 있다. Fig. 2(b)는 본 모델링에서 사용한 Mendeleev EAM 모델로 구현된 체심입방정 철의 나선 전위의 코어 구조이다. 본 연구에서 사용한 포텐셜 모델은 나선전위의 코어 구조를

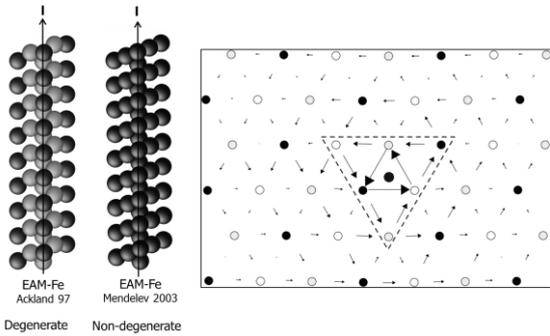


Fig. 2 (a) Lateral view of core structure of screw dislocation in BCC iron with two different potential models (left), 2(b) Differential displacement vector map of screw dislocation core showing non-degenerate structure of the presently employed EAM potential

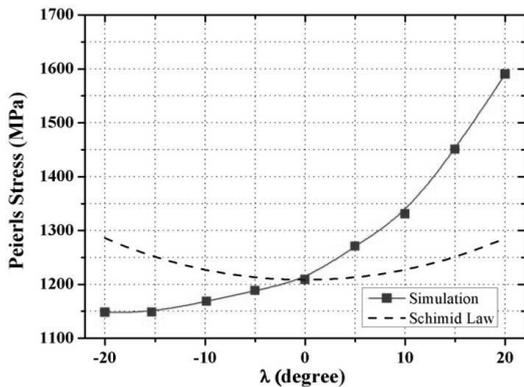


Fig. 3 Angle dependence of Peierls stress of screw dislocation

제일 원리 계산과 일치하는 non-degenerate 타입의 코어로 예측하였다. 나선 전위의 코어 구조는 활주면 및 Peierls 응력에 크게 영향을 주므로, 코어 구조의 정확한 구현은 매우 중요하다[7].

실험적으로, 체심입방정 철은 Schmid 법칙을 따르지 않는 재료로 알려져 있다. 분자정역학 계산 결과도 이러한 경향을 잘 보여준다(Fig. 3). 즉, 전단 응력이 가해지는 방향에 따라 Peierls 응력의 twinning/anti-twinning 비 대칭성이 나타난다. 이러한 비 대칭성의 근원은 $\{112\}$ plane의 generalized stacking fault energy의 비대칭성에 있다[8]. 따라서 최종적인 3차원 전위 동역학으로 얻게 되는 유동 응력 곡선에서 임계분해전단응력을 계산할 경우, 이러한 non-Schmid 거동을 고려해줘야 한다.

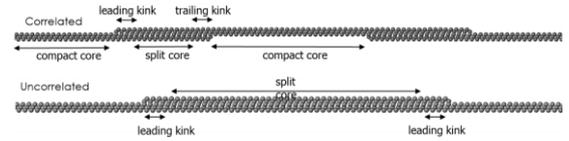


Fig. 4 The qualitative change in the transition state kink structure

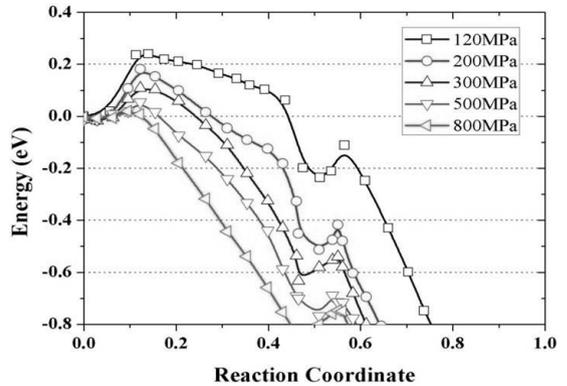


Fig. 5 Energy vs. reaction coordinate curves for kink nucleation of screw dislocation motion

앞장에서 기술한대로 전단응력이 Peierls 응력보다 낮은 경우에는 나선전위의 이동도 함수는 킹크의 핵생성에 의존한다. 따라서 먼저 나선전위의 킹크 구조에 대해 살펴보았다(Fig. 4). 선단 킹크쌍(leading kink pair)은 전위선의 중심에서 생성되어 전위선의 양 끝단으로 이동한다. 전단 응력의 크기가 낮은 경우에는 선단 킹크쌍이 전위선의 끝단에 도달하기 전에 후면 킹크쌍(trailing kink pair)이 전위선의 중심에서 생성되어 양 끝단으로 전파된다(correlated). 한편, 전단 응력의 크기가 임계 응력보다 낮은 경우는 선단 킹크쌍이 전위선의 끝단에 도달하면 전위선 전체가 split 코어구조를 가지게 되며, 이후 후면 킹크쌍이 전위선의 중심에서 생성되어 전위선의 끝단으로 이동(migration)하는 양상을 보인다(uncorrelated)[9,10].

킹크의 핵생성에 필요한 활성화 에너지는 전단 응력이 증가하면 감소하는 양상을 보인다(Fig. 5). 전단 응력이 증가하여, Peierls 응력과 같아지면, 킹크 핵생성에 필요한 활성화 에너지는 0이 되어, 이 이상의 전단응력 하에서는 전위 이동도는 킹크 핵생성의 열적 활성화와 무관하다. 따라서 Peierls 응력 이하의 전단 응력 하에서 킹크 핵생성에 필요한 활성화 에너지와 응력과의 상관관계를

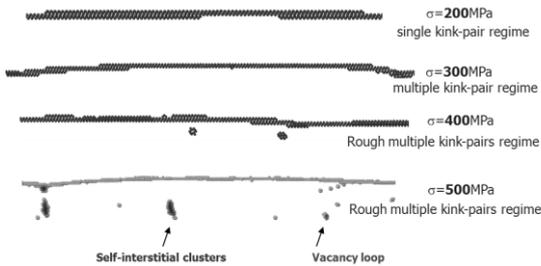


Fig. 6 Dislocation dynamics motions at different stress levels

유도하였고, 전위 이동도 함수를 구성하는 매개 함수로 사용하였다.

한편, 나선 전위의 동역학적 거동은 전단 응력에 따라서 철이 거동을 나타낸다(Fig. 6). 전단응력의 크기가 작은 경우에는 단일한 킹크 거동만이 관찰되지만, 전단응력이 증가하면 다수의 킹크가 동시에 생성되어 전파하는 양상을 보인다. 전단응력의 크기가 더욱 상승하면, 나선전위는 슬립 면에 공공이나 self-interstitial cluster 등의 debris를 생성하며 활주하는 양상을 보인다[7,11].

3.2 항복강도의 대한 3차원 전위동역학

원자단위 모델링으로 얻어진 전위 이동도 함수와 재료상수, 전위 에너지 등을 인풋으로 활용하여, 3차원 전위동역학 모델링을 수행하였다. 3차원 전위동역학은 node 타입의 ParaDis 코드를 사용하였고[12], 전위 이동도는 본 연구에서 개발된 함수를 이용하였다.

분자동역학을 이용한 변형 모델링은 계산 시간의 제약으로 인해 일반적으로 $10^{7-9}/s$ 의 높은 변형률 속도 하에서 수행되므로, 실험적인 변형 조건과는 큰 괴리가 있다. 3차원 전위 동역학에서는 실험과 유사한 변형률 속도(10^{-3}) 하에서 변형 모델링이 가능하므로 분자동역학-3차원 전위동역학의 멀티스케일 모델링을 통해서 일반적인 실험과 유사한 조건에서 모델링이 가능하다.

인장 시험에 사용된 단결정 시편에는 혼합성분을 갖는 double-ended Frank-Read 전위원을 $10^{11}/m^2$ 의 밀도로 분포시켰으며 벌크 재료의 변형 거동을 모사하기 위해 모든 축 방향으로 주기경계조건을 부여하였다. 한편 약 $10^{-1}/s$ 변형률 속도 하에서 [123] 방향으로 인장 모델링을 수행하였다. 이러한 결정 방향에서는 non-Schmid 거동이 나타나지 않으므로 유동응력 곡선으로부터 항복강도의

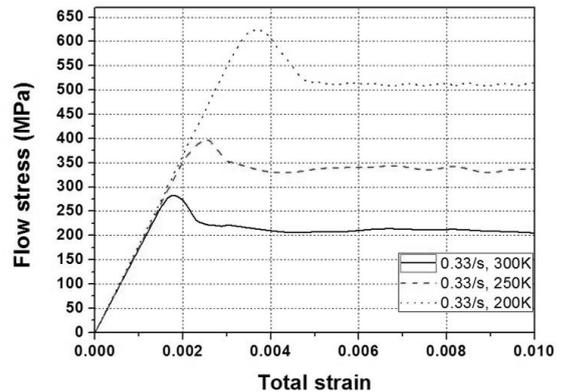


Fig. 7 Simulated stress-strain curves for single crystal BCC iron under the strain rate of 0.33/s

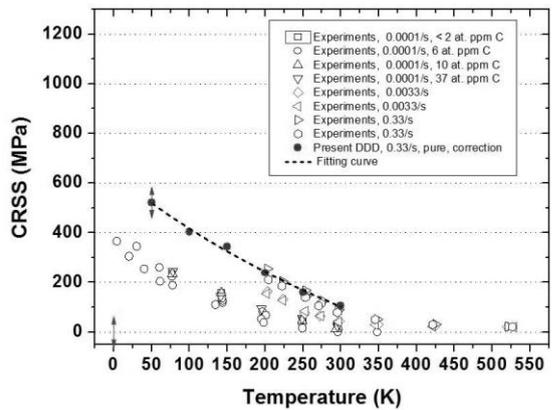


Fig. 8 The dependence of critical resolved shear stress on temperature

임계분해전단응력을 계산할 수 있다.

일축 인장 변형 시에 유동 응력 곡선에는 응력의 overshoot이 관찰된다(Fig. 7). 이는 모델링 시에 적용된 높은 변형률 속도에서 기인한다고 여겨진다. 그리고 항복강도 및 유동응력은 온도가 증가할수록 감소하는 경향을 보인다. 이는 나선 전위가 열적 활성화 거동을 보이기 때문에 변형 온도가 상승함에 따라 전위 이동에 필요한 전단응력이 감소했기 때문이다.

계산된 유동응력으로부터 단결정 철의 항복 시, 임계분해전단응력을 계산하였다(Fig. 8). 3차원 전위동역학 모델링으로부터 예측된 임계분해전단응력은 동일한 변형률 속도의 실험값과 유사한 크기를 보이는 것을 확인할 수 있으며, 온도에 따른 응력의 감소경향도 잘 일치하는 경향을 보이고 있다.

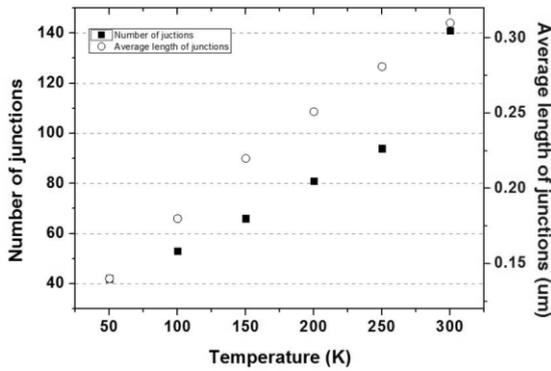


Fig. 9 The number and the average length of dislocation junction formation

한편, 온도가 상승함에 따라 전위간의 junction 수와 길이가 증가하는 경향을 보이고 있다(Fig. 9). 이는 온도가 증가함에 따라 전위간의 교차 빈도와 세기가 증가한다는 의미이며, 재료의 가공경화 지수가 증가할 수 있다는 의미이기도 하다. 하지만 Fig. 7에서 확인했듯이, 변형 온도가 상승하면 유동응력이 감소하는 경향을 보이므로, 전위의 junction hardening은 본 재료의 강도에는 큰 영향을 주지 않는 것을 알 수 있다. 다시 말해서, 단결정 철의 강도를 결정짓는 지배적인 인자는 전위간의 forest hardening이 아니라, 재료 자체가 가지는 고유한 lattice friction이라고 예측할 수 있다.

4. 결론

체심입방정 구조를 갖는 단결정 철의 변형 거동에 대한 원자 및 준 거시적 단위의 멀티스케일 모델링을 통해 재료의 기계적 성질을 예측해 보았다. 실험적인 데이터를 사용하지 않고, 시뮬레이션만으로 재료의 변형 거동에 대한 정성적, 정량적 예측이 실험과 잘 일치하고 있음을 보여주었다.

(1) 본 연구에서는 원자단위 모델링과 3차원 전위동역학의 멀티스케일 모델링 체계를 제안하였다. 원자단위 모델링으로부터 얻어진 전위 이동도, 재료상수, 전위 에너지 등의 매개함수로 3차원 전위동역학과의 연계를 시도하였다.

(2) 나선전위의 이동도는 전단응력이 Peierls 응력보다 낮은 경우에는 열적 활성화 거동을 보이며, Peierls 응력보다 높은 경우에는 열적 둔화 거동을 보인다.

(3) 나선전위의 열적 활성화 거동과 전위 이동도와와의 관계는, 킹크 핵생성과 응력 및 온도의 함수로 효과적으로 기술할 수 있음을 확인하였다.

(4) 항복강도의 절대값과 온도 의존 경향이 실험값과 유사하게 예측되었으며, 단결정 철의 강도는 전위간의 탄성적 상호작용보다는 개별 전위의 고유한 lattice friction에 크게 의존한다.

후 기

본 연구는 교육과학기술부의 Brain Korea 21 프로그램과 POSCO 기술연구소의 지원 하에 이루어졌으며, 이에 감사 드립니다.

참 고 문 헌

- [1] E. B. Tadmor, M. Ortiz, R. Phillips, 1996, Quasicontinuum Analysis of Defects in Solids, *Philos. Mag. A*, Vol. 73, No. 6, pp. 1529~1563.
- [2] W. S. Yu, S. P. Shen, 2010, Initial Dislocation Topologies of Nanoindentation into Copper (0 0 1) Film with a Nanocavity, *Eng. Fract. Mech.*, Vol. 77, No. 16, pp. 3329~3340.
- [3] B. Steffen, K. M. Dhiraj, H. Alexander, 2012, A Scheme to Combine Molecular Dynamics and Dislocation Dynamics, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 20, No. 4, pp. 045001~045022.
- [4] M. Tang, L. P. Kubin, G. R. Canova, 1998, Dislocation Mobility and the Mechanical Response of BCC Single Crystals: A Mesoscopic Approach, *Acta Mater.*, Vol. 46, No. 9, pp. 3221~3235.
- [5] S. Plimpton, 1995, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J. Comput. Phys.*, Vol. 117, No. 1, pp. 1~19.
- [6] M. I. Mendeleev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, M. Asta, 2003, Development of New Interatomic Potentials Appropriate for Crystalline and Liquid Iron, *Philos. Mag.*, Vol. 83, No. 35, pp. 3977~3994.
- [7] J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, 2006, The Glide of Screw Dislocations in BCC Fe: Atomistic Static and Dynamic Simulations, *Acta Mater.*, Vol. 54, No. 13, pp. 3407~3416.
- [8] L. Ventelon, F. Willaime, 2010, Generalized Stacking-Faults and Screw-Dislocation Core-Structure in BCC Iron: A Comparison between Ab Initio Calculations and Empirical Potentials, *Philos.*

- Mag., Vol. 90, No. 7-8, pp. 1063~1074.
- [9] P. A. Gordon, T. Neeraj, M. I. Mendelev, 2011, Screw Dislocation Mobility in BCC Metals: A Refined Potential Description for A-Fe, Philos. Mag., Vol. 91, No. 30, pp. 3931~3945.
- [10] P. A. Gordon, T. Neeraj, Y. Li, J. Li, 2010, Screw Dislocation Mobility in BCC Metals: The Role of the Compact Core on Double-Kink Nucleation, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., Vol. 18, No. 8, pp. 085008~085021.
- [11] J. Marian, W. Cai, V. V. Bulatov, 2004, Dynamic Transitions from Smooth to Rough to Twinning in Dislocation Motion, Nat. Mater., Vol. 3, No. 3, pp. 158~163.
- [12] A. Arsenlis, W. Cai, M. Tang, M. Rhee, T. Opperstrup, G. Hommes, T. G. Pierce, V. V. Bulatov, 2007, Enabling Strain Hardening Simulations with Dislocation Dynamics, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., Vol. 15, No. 6, pp. 553~595.