

열간 유동응력 예측을 위한 물리식 기반 동적 재결정 모델

이호원¹ · 강성훈[#] · 이영선¹

A Physically Based Dynamic Recrystallization Model for Predicting High Temperature Flow Stress

H. W. Lee, S. H. Kang, Y. S. Lee

(Received July 8, 2013 / Revised October 23, 2013 / Accepted October 24, 2013)

Abstract

In the current study, a new dynamic recrystallization model for predicting high temperature flow stress is developed based on a physical model and the mean field theory. In the model, the grain aggregate is assumed as a representative volume element to describe dynamic recrystallization. The flow stress and microstructure during dynamic recrystallization were calculated using three sub-models for work hardening, for nucleation and for growth. In the case of work hardening, a single parameter dislocation density model was used to calculate change of dislocation density and stress in the grains. For modeling nucleation, the nucleation criterion developed was based on the grain boundary bulge mechanism and a constant nucleation rate was assumed. Conventional rate theory was used for describing growth. The flow stress behavior of pure copper was investigated using the model and compared with experimental findings. Simulated results by cellular automata were used for validating the model.

Key Words : Dynamic Recrystallization, Physically Based Model, Flow Stress, Hot Deformation, Pure Copper

1. 서론

동적 재결정은 열간 변형 공정 중에 발생하는 중요한 결정학적 현상의 하나로 니켈과 구리와 같이 낮은 적층 결합에너지를 갖는 금속에서 많이 발생한다. 동적 재결정은 변형에 의하여 축적된 에너지가 기존의 변형조직의 결정립계(grain boundary), 쌍정(twin), 변형띠(deformation band) 등에서 새로운 결정립이 형성되고 변형조직으로 자라나면서 에너지가 소산되는 현상이다. 이때 새로이 생성된 재결정 핵은 변형조직과의 전위밀도(dislocation density) 차이를 구동력으로 성장하게 되며 지속적인 변형으로 인한 전위밀도 차의 감소로 인하여 구동력을 상실하고 결정립 성장을 멈추게 된다. 이러한 동적 재결

정 이후의 미세조직은 동적 재결정시의 공정 조건인 온도와 변형률속도 등에 상당한 영향을 받게 되며 이러한 미세조직의 차이는 최종 제품의 기계적 특성에도 영향을 미치게 된다. 따라서 이러한 동적 재결정 현상을 예측 할 수 있는 모델의 개발은 부품의 최종 강도 및 특성 향상을 위해 필수적이다.

따라서 동적 재결정 현상에 따른 미세조직 변화를 예측하기 위한 다양한 연구들이 수행되어왔다. 동적 재결정을 예측하기 위한 전통적인 방법으로는 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov(JMAK) 이론에 기반한 수식 모델을 이용하는 것이다. 이러한 방법은 이러한 수식들의 계수들을 정하는 방법이 물리적인 이론에 기반하지 않고 있어 모델의 확장성이 떨어지고 복잡한 미세조직을 평균값에 기반하여 계산하

1. 한국기계연구원 부설 재료연구소

Corresponding Author: Korea Institute of Materials Science, E-mail: kangsh@kims.re.kr

므로 정확성이 떨어진다는 단점을 가지고 있다.

이러한 단점을 극복하기 위하여 최근에는 동적 재결정 중에 발생하는 전위밀도 변화, 핵 생성 (nucleation), 결정립 성장 등의 야금학적 현상을 직접적으로 예측하는 메조 스케일 모델인 몬테 카를로(Monte Carlo) 모델[1], 셀룰라 오토마타(cellular automata) 모델[2] 등이 개발되었다. 이러한 메조스케일 모델은 동적 재결정을 정확하게 모사할 수 있고 동적 재결정의 불균질성(heterogeneity)을 반영할 수 있어 성공적으로 등온 열간 변형시의 동적 재결정 모사에 적용되었다. 최근에는 이러한 메조스케일 모델을 실제 공정의 미세조직 예측에 도입하기 위해서 유한요소해석과 결합하려는 시도가 이루어지고 있다[3].

하지만 이러한 메조스케일 모델과 유한요소해석의 결합은 계산 시간이 오래 걸리고 필요메모리가 방대하여 실제 공정으로의 적용은 쉽지 않다. 따라서 본 연구에서는 이러한 단점을 극복하고자 메조스케일 모델의 장점인 물리학 기반의 식들을 평균장(mean field) 이론에 접목하여 유한요소해석과 결합이 용이한 새로운 동적 재결정 모델을 개발하고자 한다. 또한 개발 모델의 정확성을 확인하기 위하여 이를 순 구리의 동적 재결정 공정에 적용해 보고자 한다.

2. 동적 재결정 모델

2.1 모델 개요

동적 재결정 시의 유동응력 및 미세조직 변화를 예측하기 위하여 재결정 미세조직을 여러 개의 결정립 집합체(grain aggregate)로 분류하여 대표체적요소로 가정하였다. 실제 동적 재결정 중의 미세조직은 변형조직과 여러 단계의 재결정조직이 혼재하는 불균질 조직이기 때문에 이를 동적 재결정 단계와 방위 별로 분류하였다. 각각의 결정립 집합체들은 전위 밀도, 결정립의 개수, 표면 적, 지름, 부피율(volume fraction) 등의 상태 변수를 가지고, 이러한 상태 변수들의 변화를 시간에 따라 추적하여 미세조직 및 유동응력의 변화를 계산하게 된다.

본 모델은 동적 재결정 중에 발생하는 야금학적 현상인 전위밀도 증가, 핵 생성, 핵 성장 등의 과정을 해당 하위 모델에 따라 계산하고 이를 반복적으로 수행하여 동적 재결정 현상을 예측하게 된다.

2.2 전위 밀도 모델

동적 재결정 중의 변형 경화로 인한 전위밀도를 계산하기 위하여 Kocks와 Mecking[4, 5]이 제안한 단일 변수 모델을 사용하였다. 이러한 단일 변수 모델은 평균전위밀도가 소성 유동의 특성에 기여하는 주된 인자라고 가정한다. 이 모델에 따르면 유동응력은 식(1)과 같이 평균 전위밀도의 제곱근에 비례한다[5].

$$\sigma_{[j,i]} = \alpha \mu b \sqrt{\rho_{[j,i]}} \quad (1)$$

여기서 α , μ , b 는 각각 재료상수, 전단탄성률(shear modulus), 버거스 벡터를 나타내며 $\sigma_{[j,i]}$, $\rho_{[j,i]}$ 는 결정립 집합체 $[j,i]$ 성분의 응력과 전위 밀도를 나타낸다. 여기서 i 는 동적 재결정의 cycle을 j 는 Taylor factor 성분을 나타낸다.

이 때 전위 밀도의 변화는 다음 식과 같이 경화와 연화의 두 성분을 가지는 식으로 표현된다.

$$\frac{d\rho_{[j,i]}}{d\varepsilon} = \frac{1}{bl} - k_2 \rho_{[j,i]} \quad (2)$$

여기서 l 은 전위 평균 자유 경로 (dislocation mean free path)를 나타내며 k_2 는 온도와 변형률속도에 따라 변화하는 재료변수이다. 본 논문에서 사용한 변수의 값은 문헌에서 얻어진 고온 압축시험에서 유도한 값을 이용하였다.

2.3 핵 생성 모델

핵 생성은 전위 누적으로 인해 저장된 에너지가 결정립의 곡률로 인한 표면 에너지를 능가할 때 발생한다. 본 논문에서는 이러한 핵 생성이 발생하기 위한 임계 전위 밀도를 문헌[6]에 기반하여 다음과 같이 정의한다.

$$\rho_c = \left(\frac{20\gamma\dot{\varepsilon}}{3blM\tau^2} \right)^{1/3} \quad (3)$$

이때 M 은 결정립계 이동계수 (grain boundary mobility), τ 는 전위라인에너지 (dislocation line energy), γ 는 결정립계 에너지를 나타낸다.

식 3에서 결정립계 이동계수는 다음과 같은 식으로 정의되어진다 [7].

$$M = \frac{\delta D_{ob} b}{kT} \exp\left(-\frac{Q_b}{RT}\right) \quad (4)$$

이식에서 δ 는 결정립계 두께, D_{ob} 는 결정립계 확산계수, Q_b 는 결정립계 확산 활성화 에너지, k 는 볼츠만 상수, R 은 기체상수를 나타낸다.

핵 생성률은 동적 재결정 전체 과정 동안 동일한 비율로 발생한다고 가정하였으며, 온도와 변형률 속도의 함수로 표현하였다. 따라서 결정립 집합체 $[j, i]$ 의 생성된 핵의 개수는 다음과 같다.

$$N_{[j,i]} = n \varepsilon^m \exp\left(\frac{Q_{nuc}}{RT}\right) \cdot f_{[j,i]} \cdot \Delta t \quad (5)$$

이 식에서 n , m , Q_{nuc} 은 재료상수이며, Δt 는 시간 증분이다. 본 논문에서 Δt 는 변형률의 변화 값이 10^{-3} , 가 결정립 집합체의 분율변화가 10^{-2} 을 초과하지 않도록 유동적으로 변화하는 값을 가지게 설정하였다. 이러한 유동적 시간 증분은 시간 증분이 너무 커서 오차가 증가하거나 시간증분이 너무 작아서 해석 시간이 증가하지 않게 하기 위하여 사용하였다.

본 논문에서 핵 생성은 Fig. 1에서와 같이 다음 주기의 핵이 이전 주기의 결정립에서 새로이 생겨나는 것으로 가정하였다.

결정립 집합체 $[j, i]$ 의 부피율 (volume fraction) 변화는 다음과 같이 핵의 개수와 새로이 생겨난 핵의 부피율 곱으로 정의 할 수 있다.

$$\Delta f_{[j,i]}^t = -N_{[j,i]} \cdot \frac{V_o}{V_{tot}} \quad (6)$$

V_o 와 V_{tot} 는 각각 핵의 부피와 전체 부피를 의미한다.

이때 결정립 집합체의 전위 밀도는 변화하지 않으며, 결정립 표면적과 지름의 합은 다음과 같이 변화한다.

$$\Delta D_{[j,i]}^t = D_{[j,i]}^t \cdot \Delta f_{[j,i]}^t \quad (7)$$

$$\Delta S_{[j,i]}^t = \frac{\Delta f_{[j,i]}^t}{f_{[j,i]}^t} \cdot S_{[j,i]}^t \quad (8)$$

$$\rho_{[j,i]}^{t+\Delta t} = \rho_{[j,i]}^t \quad (9)$$

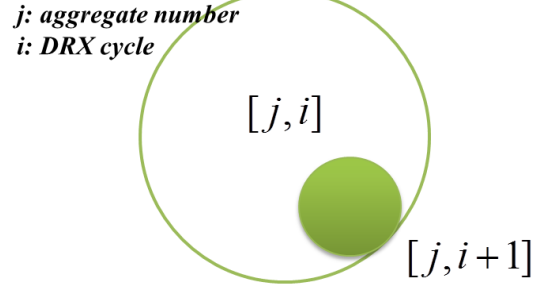


Fig. 1 Schematic illustration of nucleation process

새로이 생겨난 재결정 핵의 전위 밀도는 이론적으로 0의 값을 가지며, 이후의 변형에 의하여 전위 밀도가 증가한다. 그러므로 $t+\Delta t$ 에서의 전위 밀도는 다음과 같이 기술할 수 있다.

$$\rho_{[j,i+1]}^{t+\Delta t} = \frac{\rho_{[j,i+1]}^t \cdot f_{[j,i+1]}^t + \rho_0 \cdot \Delta f_{[j,i+1]}^t}{f_{[j,i+1]}^t + \Delta f_{[j,i+1]}^t} \quad (10)$$

결정립 집합체의 지름의 합과 표면적은 다음의 식과 같이 구형의 결정립 형태를 가정하여 계산하였다.

$$\Delta D_{[j,i+1]}^t = N_{[j,i]} \cdot D_0 \quad (11)$$

$$\Delta S_{[j,i+1]}^t = N \cdot \pi D_0^2 \cdot V_{tot} \quad (12)$$

여기서 D_0 는 재결정핵의 지름을 의미한다.

2.4 결정립 성장

동적 재결정에서의 결정립 성장은 Fig. 2와 같이 재결정된 핵이 변형 미세조직으로 성장하는 현상으로 이러한 결정립 성장의 구동력은 재결정된 결정립과 변형 결정립의 저장된 변형에너지의 차이이다.

이때 일반적으로 결정립계 (grain boundary)의 이동 속도 (v)는 결정립계에 작용하는 압력 (P)에 비례하는 값을 가지며 이 비례상수를 결정립계 이동계수 (M)라고 한다[7].

$$v = M \cdot P \quad (13)$$

$$P = \tau \left(\rho_{[l,k]} - \rho_{[j,i]} \right) - \frac{2\gamma}{r} \quad (14)$$

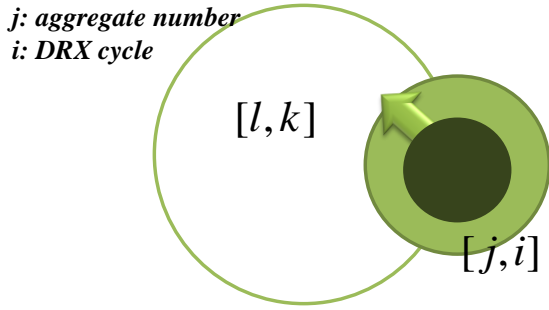


Fig. 2 Schematic illustration of nucleus growth process during dynamic recrystallization

본 연구에서는 일반적으로 곡물에 의한 구동력이 전위밀도 차에 의한 구동력에 비해 무시할만하기 때문에 식 (14)의 첫 번째 항만을 고려하였다.

결정립 성장 중의 결정립 집합체의 부피율 변화는 결정립계가 속도 v 로 Δt 동안 이동한다고 가정하면 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\Delta f_{[j,i]} = -\Delta f_{[l,k]} = \frac{S_{[j,i]} v \Delta t}{V_{tot}} f_{[l,k]} \quad (15)$$

이식에서 결정립 집합체 $[j,i]$ 와 $[l,k]$ 의 부피율 변화는 계산의 중복을 방지하기 위하여 집합체 $[l,k]$ 에 대해서만 고려하였다. 이때 결정립 집합체의 결정립의 지름의 합은 다음 식과 같이 계산하였다.

$$\Delta D'_{[j,i]} = 2v \cdot \Delta t \cdot n_{[j,i]} \cdot f_{[l,k]} \quad (16)$$

$$\Delta D'_{[l,k]} = \frac{D'_{[l,k]} \cdot S_{[j,i]} \cdot v \cdot \Delta t}{V_{tot}} f_{[l,k]} \quad (17)$$

또한 결정립 성장중의 표면적의 변화는 다음과 같이 계산하였다.

$$\Delta S_{[j,i]} = 4\pi D'_{[j,i]} \cdot f_{[l,k]} \cdot v \cdot \Delta t \quad (18)$$

$$\Delta S_{[l,k]} = \frac{\Delta f_{[j,i]}}{f_{[l,k]}} S_{[l,k]} \quad (19)$$

3. 결과 및 고찰

3.1 모델을 이용한 열간 변형 모사 결과 개발된 물리식 기반의 동적 재결정 모델의 검증을 위하여 순 구리의 압축시험에 적용하고 참고문

Table 1 Materials constants used in the model

α	μ (N/m^2)	b (m)
0.5	4.21×10^{10}	2.56×10^{-10}
γ (J/m^2)	δD_{ob} (m^3/s)	Q_b (kJ/mol)
0.625	1.09×10^{-11}	162

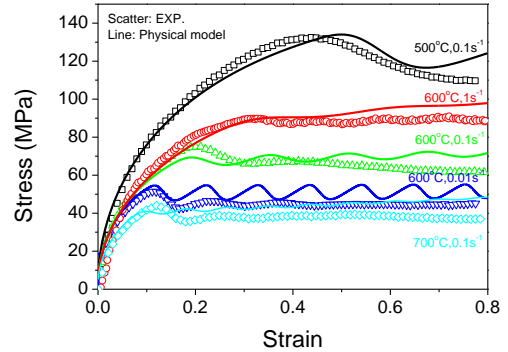


Fig. 3 Comparison of flow stress curves between the experimental and physically based model

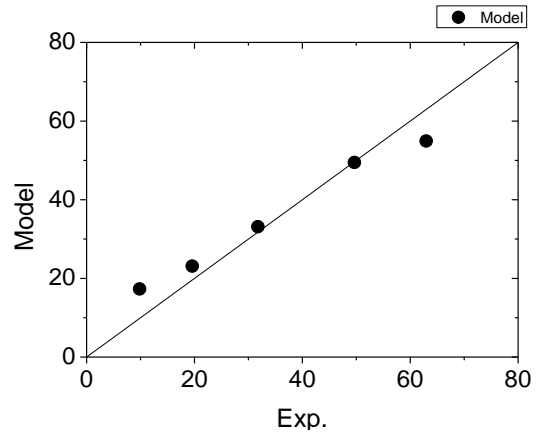


Fig. 4 Comparison of average recrystallized grain sizes between the experimental and physically based model

헌[2]의 실험결과와 비교하였다. 이때 해석에 사용한 사용한 재료상수들은 Table 1과 같다.

모델에서 얻어진 열간 유동응력과 평균 결정립 크기를 다양한 온도와 유효 변형률 속도에서 문헌의 순 구리의 등온 압축 실험 결과와 비교하여 각각 Fig. 3과 4에 도시하였다.

Fig. 3의 유동응력 비교 결과를 보면, 물리식 기반 모델이 600°C의 1 s⁻¹의 경우를 제외하고 전체적으로 유동응력을 잘 모사하고 있는 것을 알 수 있다.

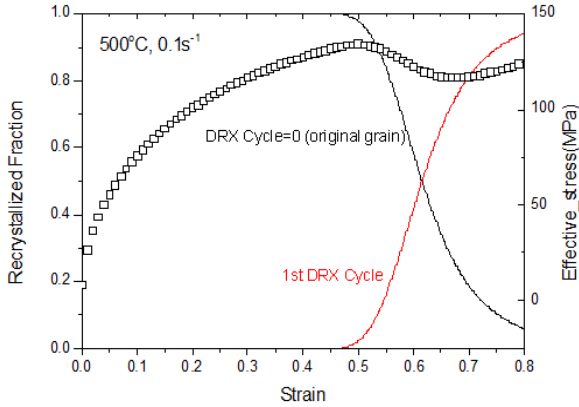


Fig. 5 Flow curve (dot) and recrystallized fraction (line) at the high Zener-Hollomon parameter

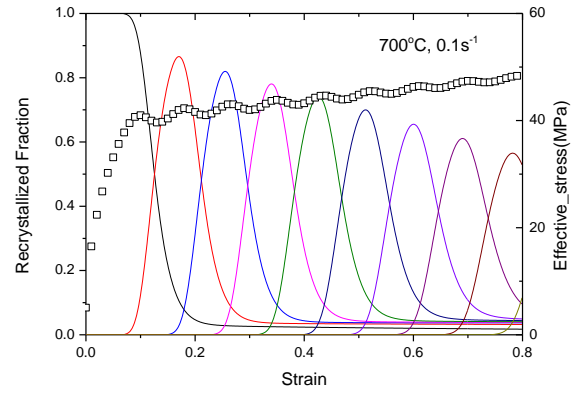


Fig. 6 Flow curve (dot) and recrystallized fraction (line) at the high Zener-Hollomon parameter

600°C의 1s⁻¹의 경우는 해석 유동응력이 실험에 비해 과장되게 진동하는 것을 알 수 있다. 이는 현 모델에서 사용한 결정립 집합체의 수가 부족하여 나타나는 현상으로 향후 이러한 부분을 개선하기 위하여 추가 연구가 필요하다. 반면 Fig. 4와 같이 평균 결정립 크기는 해석과 실험의 결과가 잘 일치하는 것을 알 수 있다.

결론적으로 개발된 모델은 동적 재결정 현상을 일반적으로 잘 모사하고 있으며 이후 유한요소해석과의 결합을 통하여 열간 변형공정의 미세조직 모사에 적용할 수 있을 정도의 정확성을 가지는 것을 알 수 있다.

3.2 동적 재결정과 유동응력의 상관관계

일반적으로 동적 재결정 시의 유동응력의 형태는 초기 결정립 크기와 재결정 결정립 크기의 비율과 상관관계가 있다. 단일 최고치를 가지는 유동응력의 경우 재결정된 결정립의 크기가 기존 결정립의 절반 이하로 작은 경우이며, 온도가 낮고 유효 변형률 속도가 빠른 경우에 발생한다. 반면 여러 개의 최고치를 가지는 유동응력의 유동응력은 반대로 재결정된 결정립의 크기가 기존 결정립의 절반 이상의 크기를 가지는 경우로, 온도가 높고 변형률 속도가 느린 경우에 발생한다. 본 절에서는 이러한 현상을 좀 더 자세히 알아보기 위하여 각각의 경우를 살펴보았다.

이를 위해 단일 최고치를 가지는 경우의 유동응력과 재결정 분율을 Fig. 5에 도시하였다. 유동응력을 살펴보면 유동응력은 변형률 0.47까지 꾸준히 증가하다가 임계응력 이후에 증가 추세가 감소하며

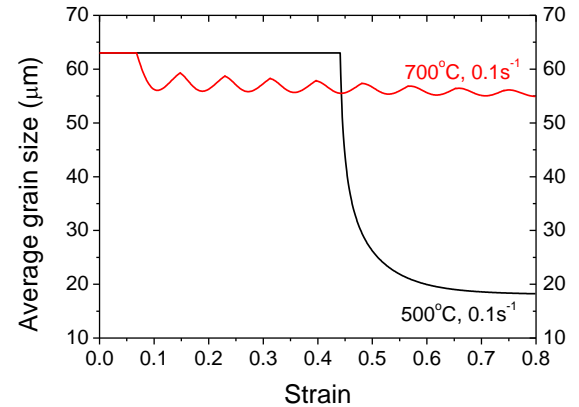


Fig. 7 Changes of average grain size during dynamic recrystallization for the single- and multi-peak flow curves

유효 변형률 약 0.5에서 최대치에 달하고 이후 지속적인 재결정에 의해 연화되다가 변형률 0.65이후, 재결정 분율 0.7 정도에 다시 소성 경화되는 형태를 보여준다. 이러한 재경화 현상은 재결정 분율이 높아지면 결정립 계의 면적이 작아지고 이에 따라 재결정 핵 생성 속도가 낮아지면서 다시 경화가 발생하는 것이다. 이러한 단일 최고치의 유동응력을 보일 경우 Fig. 7과 같이 평균 재결정립 크기는 초기 결정립 크기를 유지하다가 임계 변형률 이후 급격히 작아지게 되고 이후 수렴하는 양상을 보여준다. 이 경우 평균 결정립 크기의 급격한 감소는 재결정립의 크기가 초기 결정립에 비해 상당히 작기 때문에 발생한다.

여러 개의 최고치를 가지는 유동응력의 경우의 유동응력과 재결정 분율의 변화를 Fig. 6에 도시하였다. 하나의 최고치를 가지는 경우와 동일하게 변

형률 0.1까지 경화되다가 이후 연화되는 현상을 보여준다. 하지만 이전의 경우와 다르게 경화의 속도가 빨라서 이 루 0.12의 유효 변형률에서 다시 급격하게 경화되는 현상을 보여준다. 이러한 현상은 이 경우의 재결정립의 크기가 단일 최고치의 경우보다 상대적으로 커서 재결정 핵이 생성될 수 있는 기존 결정립 계가 빨리 소진되어 더 이상 핵 생성이 발생할 수 없게 되어 발생하는 현상이다. 이러한 경우 빠른 경화로 인하여 다음 단계의 동적 재결정이 빨리 시작되므로 여러 개의 최고치를 가지게 된다. 따라서 이 경우 여러 단계의 재결정으로 인하여 평균 결정립 크기도 Fig. 7과 같이 진동하는 형태의 특징을 가진다.

4. 결론

본 논문에서는 열간 유동응력과 동적 재결정에 의한 미세조직 변화를 효과적으로 예측하기 위하여 물리식 기반의 동적 재결정 모델을 개발하였고 이를 구리의 압축 시험에 적용하여 개발된 모델과 실험결과를 비교하였으며, 다음과 같은 결론을 도출하였다.

(1) 개발된 물리식 기반의 모델은 고온 유동응력과 동적 재결정시의 평균 결정립 크기를 평균적으로 잘 예측하였으며, 따라서 이후 유한요소해석과 결합 시 열간 단조 공정의 미세조직 변화의 예측에 적합함을 확인하였다.

(2) 동적 재결정시의 유동응력은 단일 최고치와 여러 개의 최고치를 가지는 유동응력으로 구분할 수 있으며, 이러한 유동응력의 특성은 재결정립과 기존 결정립의 크기 차이 및 공정 조건의 영향에 기인하는 것이다.

후 기

본 연구는 재료연구소 주요사업의 일환으로 진행된바 이에 감사 드립니다.

REFERENCES

- [1] A. D. Rollett, M. J. Luton, D. J. Srolovitz, 1992, Microstructural Simulation of Dynamic Recrystallization, *Acta Metall. Mater.*, Vol. 40, No. 1, pp. 43~55.
- [2] H. W. Lee, Y.-T. Im, 2010, Cellular Automata Modeling of Grain Coarsening and Refinement during the Dynamic Recrystallization of Pure Copper, *Mater. Trans.*, Vol. 51, No. 9, pp. 1614~1620.
- [3] H. W. Lee, Y. T. Im, 2010, Numerical Modeling of Dynamic Recrystallization During Nonisothermal Hot Compression by Cellular Automata and Finite Element Analysis, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 52, No. 10, pp. 1277~1289.
- [4] U. F. Kocks, 1976, Laws for Work-hardening and Low-temperature Creep, *J. Eng. Mater.-T. ASME*, Vol. 98, pp. 76~85.
- [5] H. Mecking, U. F. Kocks, 1981, Kinetics of Flow and Strain-hardening, *Acta Metall.*, Vol. 29, pp. 1865~1875.
- [6] W. Roberts, B. Ahlblom, 1978, A Nucleation Criterion for Dynamic Recrystallization during Hot Working, *Acta Metall.*, Vol. 26, pp. 801~813.
- [7] F. J. Humphreys, M. Hatherly, *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, Second Edition ed. 2004, Oxford, UK: Elsevier.