

GND에 의한 소성 구배의 다결정 고체 모사에 대한 영향

Effect of plastic gradient from GND on the simulation of polycrystalline solids

정 상 엽* · 한 동 석**

Chung, Sang-Yeop · Han, Tong-Seok

요 약

재료의 마이크로 스케일 해석에서 결정의 geometrically necessary dislocation (GND) 효과에 의한 소성 구배(plastic gradient)를 고려하는 것은 재료의 소성 거동을 분석하는데 영향을 미친다. 본 연구에서는 먼 거리(long range)에서 전위(dislocation)의 영향을 고려하는 GND의 효과를 적용하여 소성 구배의 영향을 받는 다결정(polycrystal) 고체의 거동을 유한요소해석을 이용하여 살펴보았다. 재료의 거동을 분석하기 위해 탄성(elastic)과 소성(plastic) 변형에 먼 거리 변형률(long range strain)을 고려한 항(term)이 포함된 변형 구배(deformation gradient)의 multiplicative decomposition 모델을 사용하였다. 먼 거리 변형률에 의한 영향을 고려하기 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. 다결정 재료의 GND 효과에 의한 소성 구배 효과를 고려해서, 고려하지 않은 경우와 비교하여 발생하는 경화(hardening)의 차이를 분석함으로써 GND에 의한 다결정 고체 거동의 영향을 확인하였다.

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

1. 서 론

전위(dislocation) 거동은 다결정 재료의 소성 변형이 발생하는데 주요한 원인이다. 따라서 결정의 소성 거동을 보다 자세히 이해하기 위해서는 결정에서 dislocation의 거동에 대한 정밀한 이해가 필요하다. 기존의 결정 소성 모델들도 결정의 거동을 이해하는데 비교적 정확한 결과를 보였지만, 더욱 정밀한 해석을 위해서는 해석 모델을 더욱 발전시킬 필요성이 제기되어왔다. 이와 관련해서, 많은 dislocation이 누적된 결정 입자 사이의 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 dislocation의 slip을 억제하여 재료의 강도가 증가한다는 것이 관찰되었다. 이를 바탕으로 geometrically necessary dislocation (GND)과 gradient plasticity가 제안되었다 (Ashby, 1970). 최근에는 Hartley (2003)가 제안하였던 deformation gradient의 multiplicative decomposition에서 기존의 결정 소성 모델에서 탄성과 소성 변형에 추

* 학생회원 · 연세대학교 사회환경시스템공학부 박사과정 sychung@yonsei.ac.kr

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

가적으로 GND를 고려하여 세 개의 kinematic motion으로 정의한 연구가 Gerken과 Dawson (2007, 2008)에 의하여 수행되었다.

본 연구에서는 Gerken과 Dawson (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 그렇지 않은 경우의 재료 거동의 차이를 분석함으로써 다결정 고체 거동에서 소성 구배의 영향을 살펴보았다.

2. 다결정 미세구조의 유한요소 시뮬레이션

다결정 미세구조의 거동을 해석하기 위해 Gerken과 Dawson (2008)이 제안한 모델을 사용하였다. Gerken과 Dawson은 기존에 Hartley (2003)가 제안한 모델을 바탕으로 그림 1과 같이 deformation gradient를 포함한 multiplicative decomposition을 제시하였다. 그림 1에서 F_{ij}^d 는 결정 slip면으로의 dislocation motion에 따른 영구적인(permanent) 변형을 나타내는 F_{ij}^p 와 전체 body의 격자(lattice)에서 발생하는 dislocation에 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. Deformation gradient의 multiplicative decomposition은 다음과 같이 표현된다.

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

결정격자의 distortion에 의하여 탄성 및 먼 거리 변형률이 발생한다. 총 격자 변형률(total lattice strain)은 식 (2)와 같이 표현된다. Kirchhoff 응력과 격자 변형률과의 관계는 식 (3)과 같이 나타낸다.

$$\varepsilon_{ij} = R_{ik} \eta_{kl} R_{lj}^T + \xi_{ij} \quad (2)$$

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (3)$$

식 (2)에서 η_{kl} 는 small long range strain 텐서를 나타내고 ξ_{ij} 는 small elastic strain 텐서를 나타낸다. 식 (3)에서 C_{ijkl} 은 4차 탄성 텐서이다.

먼 거리 변형률을 계산하기 위하여 Burgers 벡터를 사용하였으며, 변형률 길이 계수인 a를 사용하여, net Burgers 벡터의 분포가 $(x,y)=(\pm a, \pm a)$ 으로 표현되는 사각형 구간에서는 선형관계이고, 이 구간 외에서 net Burgers 벡터는 0으로 가정하였다. 소성 slip의 구배와 net Burgers 벡터와의 관계 다음과 같다.

$$\rho_b = \frac{\partial \gamma}{\partial x_i} s_i \quad (4)$$

여기서 γ 는 s_i 방향으로의 slip을 나타낸다.

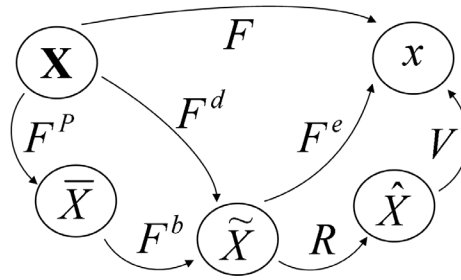


그림 1 변형 구배(deformation gradient)의 multiplicative decomposition (Gerken과 Dawson, 2008)
(X 는 reference, $\bar{X}, \tilde{X}, \hat{X}$ 는 intermediate, x 는 current configuration을 의미한다.)

결정 소성의 모델은 Gerken과 Dawson (2008)에서 사용한 모델을 이용하였다. Total dislocation density는 총 소성 slip의 합에 비례하는 statistically stored dislocations (SSD)와 slip gradient에 비례하는 GND를 모두 포함한다. Slip system hardness는 다음과 같이 표현된다.

$$g^\alpha = G_1(\gamma) + G_2\left(\frac{\partial \gamma}{\partial x_i}\right) \quad (5)$$

식 (5)에서 dislocations의 각 항은 독립적으로 작용한다. $G_1(\gamma)$ 는 SSD에 의한 hardness를 나타내며 $G_2(\partial \gamma / \partial x_i)$ 는 net Burgers 벡터에 의해서 표현되고 $G_2(\partial \gamma / \partial x_i) = \beta \mu \sqrt{\rho_b}$ 로 나타낼 수 있다. 여기서 β 는 gradient hardness coefficient이고 μ 는 shear modulus이다.

3. GND 효과에 따른 시뮬레이션 결과 분석

본 연구에서는 다결정 고체의 소성 거동을 살피기 위해, 그림 2(좌)에 있는 다결정 미세구조 가상 시편을 모델링하여 실험으로부터 얻어진 99.99% 순도의 알루미늄의 재료 변수를 사용하였다 (Dumoulin과 Tabourot, 2005). 가상 시편의 크기는 각 변의 길이가 $100\mu\text{m}$ 인 cube를 사용하였으며, Z축 상단 면에 velocity를 적용하여 그림 2(우)에서 나타나듯이 0.05%까지 인장 변형률이 발생하도록 하였다. 본 연구에서는 GND를 고려하기 위한 재료 변수 먼 거리 변형률 길이 a (먼 거리 변형률 길이)와 β (gradient hardness coefficient)의 값을 Gerken과 Dawson (2008)이 사용한 가상 시편과 재료 변수의 관계를 참고하여 $a=1.0\text{E-}4\text{m}$, $\beta=1.0\text{E-}4\sqrt{\text{m}}$ 로 적용하였다. 선행 연구에 따르면 먼 거리 변형률과 gradient hardness coefficient는 서로 개별적으로 작용하며 각각 macro-scale의 kinematic type hardening과 isotropic type hardening에 영향을 준다. 그림 2(우)를 살펴보면 다결정 미세구조 가상 시편의 macroscopic 응력-변형률 곡선에서 GND를 고려하지 않은 경우와 비교하여 a 와 β 의 변수를 모두 고려하였을 때 소성 구간의 기울기가 증가하는 것을 관찰할 수 있다. 변형률이 0.05%인 경우 응력을 비교하면 β 가 a 보다 hardening에 더 큰 영향을 미치는 것을 확인할 수 있다. 또한 응력 비교를 통해 변수 a 와 β 가 재료의 거동에 개별적으로 영향을 미치는 것을 알 수 있다. 이러한 결과는 단결정 시뮬레이션의 결과와 일관된 것으로서, 이를 통해 GND를 고려한 다결정 고체의 거동이 단결정과 같이 소성 구배의 영향을 받는 것을 확인할 수 있다. 결론적으로 GND를 적용하여 소성 구배를 확인한 결과, 다결정 재료의 거동에 있어서도 GND의 고려 여부가 재료 소성 거동에 영향을 주는 것을 확인하였다.

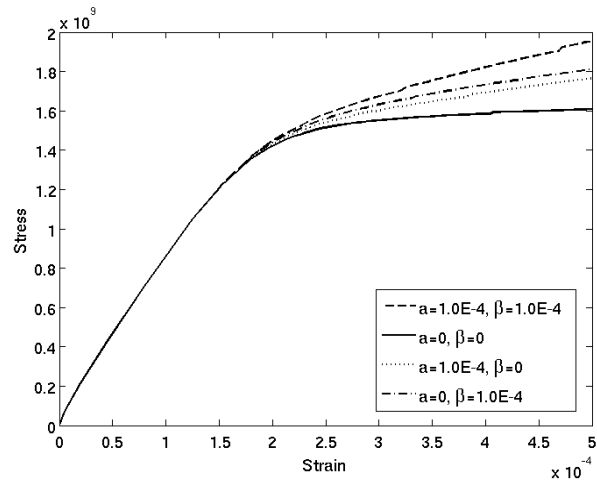
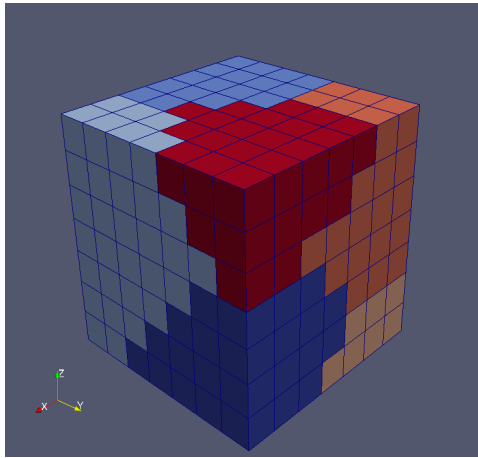


그림 2 다결정 미세구조(좌)와 소성 구배를 고려한 역학적 거동 결과(우)

4. 결론

본 연구에서는 먼 거리에서 dislocation의 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 a (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 hardening에 영향을 주는 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.

감사의 글

“이 논문은 2008년 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (331-2008-1-D00006).”

참고문헌

- Gerken, J.M and 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 and 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.
- Hartley, C.S.** (2003) A method for linking thermally activated dislocation mechanisms of yielding with continuum plasticity theory, *Philosophical Magazine*, 83, pp. 3783~3808