

금속재료 표면층의 급격한 응력구배에 대한 X-Ray 회절 특성값과 측정된 변형률의 해석방법

한창석[†] · 이찬우

호서대학교 자동차ICT공학과

Analysis Method of X-Ray Diffraction Characteristic Values and Measured Strain for Steep Stress Gradient of Metal Material Surface Layer

Chang-Suk Han[†] and Chan-Woo Lee

Department of ICT Automotive Engineering, Hoseo University, Dangjin 31702, Republic of Korea

(Received January 9, 2023 : Revised January 25, 2023 : Accepted January 25, 2023)

Abstract The most comprehensive and particularly reliable method for non-destructively measuring the residual stress of the surface layer of metals is the $\sin^2\psi$ method. When X-rays were used the relationship of $\varepsilon_{\phi\psi} - \sin^2\psi$ measured on the surface layer of the processing metal did not show linearity when the $\sin^2\psi$ method was used. In this case, since the effective penetration depth changes according to the changing direction of the incident X-ray, σ_{ϕ} becomes a $\sin^2\psi$ function. Since σ_{ϕ} cannot be used as a constant, the relationship in $\varepsilon_{\phi\psi} - \sin^2\psi$ cannot be linear. Therefore, in this paper, the orthogonal function method according to Warren's diffraction theory and the basic profile of normal distribution were synthesized, and the X-ray diffraction profile was calculated and reviewed when there was a linear strain (stress) gradient on the surface. When there is a strain gradient, the X-ray diffraction profile becomes asymmetric, and as a result, the peak position, the position of half-maximum, and the centroid position show different values. The difference between the peak position and the centroid position appeared more clearly as the strain (stress) gradient became larger, and the basic profile width was smaller. The weighted average strain enables stress analysis when there is a strain (stress) gradient, based on the strain value corresponding to the centroid position of the diffracted X-rays. At the $1/5 I_{\max}$ height of X-ray diffraction, the position where the diffracted X-ray is divided into two by drawing a straight line parallel to the background, corresponds approximately to the centroid position.

Key words residual stress, X-ray diffraction, Warren's diffraction theory, half-maximum, weighted average strain.

1. 서 론

금속재료 표면층의 잔류응력을 비파괴적으로 측정할 수 있는 방법으로서 X선 잔류응력해석법에 대한 연구가 진행되어 보고된 것 중에서 가장 종합적이고, 특히 신뢰성 있는 것은 $\sin^2\psi$ 법^{1,2)}이다. 종래에는 X선적 탄성상수와 같은 다양한 문제를 포함하더라도 X선을 이용하여 측정 한 잔류응력은 모두 이 방법을 통하여 해석되었다고 하여

도 과언이 아니다.

$\sin^2\psi$ 법은 시료표면법선과 응력측정방향을 포함한 면 내에서 임의방향에 대한 수직변형률 $\varepsilon_{\phi\psi}$, 또는 격자면간격 $d_{\phi\psi}$ 가 $\sin^2\psi$ 와 관련하여 선형관계에 있다는 것을 기초를 두고 있다. 즉,

$$\varepsilon_{\phi\psi} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{\phi} \sin^2\psi - \frac{\nu}{E} (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (1)$$

[†]Corresponding author

E-Mail : hancs@hoseo.edu (C.-S. Han, Hoseo Univ.)

© Materials Research Society of Korea, All rights reserved.

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

인 관계로부터 직선구배 $\partial \epsilon_{\phi\psi} / \partial \sin^2 \psi = \sigma_{\phi} (1 + \nu) / E$ 와 X선을 이용하여 탄성상수를 알면 σ_{ϕ} 를 구할 수 있다.

그러나 가공재료 표면층 등에 X선을 적용한 경우, 측정된 $\epsilon_{\phi\psi} - \sin^2 \psi$ 의 관계가 $\sin^2 \psi$ 법을 사용하였을 때 지적된 것처럼 선형성에 의존하지 않는 경우가 다수 관찰되었다. 저자들은 이전에, 이와 같은 현상은 $\sin^2 \psi$ 법에 포함되어 있는 가정을 하나씩 제거함으로써 선형성을 나타낼 수 있다는 가능성에 대하여 보고하였다.³⁾ 그 중에서 비선형적인 $\sin^2 \psi$ 다이어그램에 대한 하나의 원인으로서는 X선 침입깊이 범위 내에서 응력이 급격하게 경사지게 되는 결과에 대하여 논의하였다. 이때에 입사 X선 방향을 변화시키는 것에 따라서 유효한 침입깊이가 변화하므로 식 (1)의 σ_{ϕ} 가 $\sin^2 \psi$ 함수로 되기 때문이다. σ_{ϕ} 을 상수로서 사용할 수 없기 때문에 $\epsilon_{\phi\psi} - \sin^2 \psi$ 의 관계는 선형적으로 나타날 수 없다. 종래에도 소수의 연구가 진행되어 이 현상에 대하여 확실한 설명은 되어 있지만,^{4,6)} 비선형적인 $\sin^2 \psi$ 다이어그램을 사용하여 표면에 대한 응력값 및 표면아래의 응력구배를 결정하는 방법은 아직 확립되어 있지 않다.

본 연구에서는 표면층에 급격한 응력구배가 존재할 때에 회절강도 분포곡선의 형태를 해석하여 회절선 특성값과 측정된 변형률과의 관계를 검토하였다. 그리고 이 관계에 기초하여 기존의 $\sin^2 \psi$ 법을 대신할 수 있는 가중평균 해석법(weighted averaging method)을 제안한다.

2. 회절강도 분포곡선 해석

급격한 변형률구배를 갖는 표면층에서의 회절강도 분포곡선을 Warren의 Powder pattern power theorem 및 Small coherent domains and strains의 이론⁷⁾을 응용하여 해석을 진행하였다. 계산을 용이하게 하기 위하여 다음과 같은 가정을 설정하였다.

- (1) 표면층에는 작은 간섭영역이 불규칙한 방향으로 분포되어 있다.
- (2) 각각에 대한 간섭영역 내의 변형률은 균일하다.
- (3) 변형률은 표면에서 깊이방향으로 선형적인 변화를 나타낸다.
- (4) 입사빔은 완전히 평행하다.

Fig. 1과 같이 표면층을 두께 Δ 인 얇은 층으로 분할한다. 이 Δ 는 표면층에 존재하는 간섭영역의 직경, 즉 소성 변형으로 발생한 아결정립의 직경 정도이다.

우선 $\psi = 0^\circ$ 인 경우를 생각하고, X선이 재료 내에서 흡수되는 효과를 무시하여 한개 층에서의 반사강도를 생각

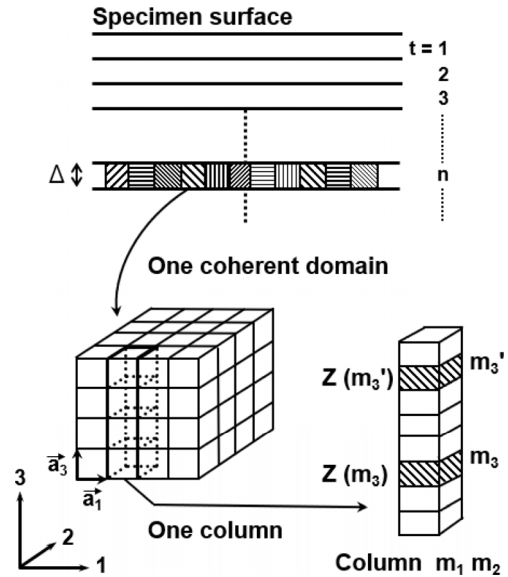


Fig. 1. Cross-sectional view of a delaminated deformed surface layer containing randomly oriented coherent domains. Each domain is assumed to be uniformly distorted.

한다. 두께 Δ 인 층의 내부에는 아결정(coherent domains)이 랜덤한 방향이라는 가정 하에 분말시료와 동일하게 취급할 수 있으므로, Small coherent domains and strains의 이론을 그대로 적용할 수 있다. 이 이론에 의하면 회절링의 단위 길이당 강도는 $(00l)$ 반사에 대하여

$$P'(2\theta) = \frac{KM F^2}{\sin^2 \theta} \sum_{m_1} \sum_{m_2} \sum_{m_3} \sum_{m_3'} [e^{2\pi i l [Z(m_3') - Z(m_3)]} e^{2\pi i (m_3' - m_3) h_3}]_{m_1 m_2} \quad (2)$$

로 나타낼 수 있다.⁷⁾ 여기서 m_1, m_2, m_3 는 격자벡터 a_1, a_2, a_3 에 따른 좌표성분, $Z(m_3)$ 는 m_3 번째 단위격자의 a_3 방향, 즉 회절면에 수직방향인 변위성분, h_3 는 회절벡터를 결정하는 연속변수로 $h_3 = 2a_3 \times \sin \theta / \lambda$ 로 주어진다. F 는 구조인자, M 은 한개 층에 포함된 결정수, K 는 X선 파장이나 결정구조 등에 따라 정해지는 상수이다.

간섭영역 내에서 변형률은 균일하다는 가정을 적용하면 $Z(m_3) = \epsilon_3 m_3, Z(m_3') = \epsilon_3 m_3'$ 으로 나타낼 수 있다. 또 하나의 결정을 a_3 방향에 따른 단위격자 집합의 주체라고 생각하면, 결정 내의 모든 주체에 대하여 변형률은 균일하다고 가정하였기 때문에 m_1, m_2 에 관한 합 $\sum_{m_1} \sum_{m_2}$ 는 $N_1 N_2$ 로 치환할 수 있다. N_1, N_2 는 각각 하나의 결정을 구성하는 a_1, a_2 방향의 주체가 되는 수이다.

$$P'(2\theta) = \frac{KMF^2}{\sin^2\theta} N_1 N_2 \sum_{m_3} \sum_{m_3'} e^{2\pi i(m_3' - m_3)(h_3 + l\epsilon_3)} \quad (3)$$

로 된다. 그리고 $n = m_3' - m_3$ 로 하면 식 (3)은

$$P'(2\theta) = \frac{KMF^2}{\sin^2\theta} N_1 N_2 \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} N_n(\text{column}) e^{2\pi i(h_3 + l\epsilon_3)n} \quad (4)$$

로 된다. 여기서 $N_n(\text{column})$ 은 N_3 개의 단위격자로부터 구성된 하나의 주체 중에서 n 개의 격자간격을 갖는 단위 격자 쌍의 수이며,

$$N_n(\text{column}) = N_3 - |n| \quad (5)$$

로 된다. 따라서 식 (4)는

$$\begin{aligned} P'(2\theta) &= \frac{KMF^2 N_1 N_2}{\sin^2\theta} \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} (N_3 - |n|) e^{2\pi i(h_3 + l\epsilon_3)n} \\ &= \frac{KMF^2 N_1 N_2}{\sin^2\theta} \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} (N_3 - |n|) \{\cos 2\pi(h_3 + l\epsilon_3)n\} \end{aligned} \quad (6)$$

로 된다. 이것이 (00l) 반사일 때 변형률 ϵ_3 을 갖는 결정에서 구성된 얇은 층에서의 회절강도 분포식으로 주어진다.

다음은 흡수를 고려하여 각 층의 강도 합을 구하면, 총 회절강도가 주어진 식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} P_t'(2\theta) &= \frac{KMF^2 N_1 N_2}{\sin^2\theta} \sum_{t=1}^{\infty} e^{-2\mu t \Delta / \sin\theta} \\ &\quad \times \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} (N_3 - |n|) \cos 2\pi(h_3 + l\epsilon_3)n \end{aligned} \quad (7)$$

ϵ_3 을 깊이 $t\Delta$ 의 함수로서

$$\epsilon_3 = \epsilon_0 + \gamma t \Delta \quad (8)$$

에 근사시키면

$$\begin{aligned} P_t'(2\theta) &= \frac{KMF^2 N_1 N_2}{\sin^2\theta} \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} \sum_{t=1}^{\infty} e^{-2\mu t \Delta / \sin\theta} (N_3 - |n|) \\ &\quad \times \cos 2\pi\{h_3 n + nl(\epsilon_0 + \gamma t \Delta)\} \end{aligned} \quad (9)$$

로 되기 때문에, cosine항을 가법정리로 전개하고, 또한 흡수항을 포함한 무한 합을 적분으로 근사시키면 $\psi=0$ 인 경우의 전체 회절강도분포가 주어진 관계로서 다음 식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} P_t'(2\theta) &= \frac{KMF^2 N_1 N_2}{\sin^2\theta} \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} (N_3 - |n|) \left\{ \left(\frac{2\mu\Delta}{\sin\theta} \right)^2 + (2\pi n l \gamma \Delta)^2 \right\}^{-1} \\ &\quad \times \left\{ \frac{2\mu\Delta}{\sin\theta} \cos 2\pi n(h_3 + l\epsilon_0) - 2\pi n l \gamma \Delta \sin 2\pi n(h_3 + l\epsilon_0) \right\} \end{aligned} \quad (10)$$

임의 ψ 에 대한 강도분포식을 구하기 위하여 주변형률 $\epsilon_1(t)$, $\epsilon_2(t)$ 및 $\epsilon_3(t)$ 을

$$\begin{cases} \epsilon_1(t) = \epsilon_1^0 + \alpha t \Delta \\ \epsilon_2(t) = \epsilon_2^0 + \beta t \Delta \\ \epsilon_3(t) = \epsilon_3^0 + \gamma t \Delta \end{cases} \quad (11)$$

로 한다. 여기서 $\epsilon_1^0, \epsilon_2^0, \epsilon_3^0$ 은 표면에서의 변형률, α, β, γ 는 변형률구배이다. 좌표계를 Fig. 2처럼 하면, 임의방향에 대한 수직변형률 $\epsilon_{\phi\psi}(t)$ 는

$$\begin{aligned} \epsilon_{\phi\psi}(t) &= \epsilon^0 + \zeta t \Delta \\ \epsilon^0 &= \epsilon_3^0 + (\epsilon_1^0 \cos^2\phi + \epsilon_2^0 \sin^2\phi - \epsilon_3^0) \sin^2\psi \end{aligned} \quad (12)$$

$$\zeta = \gamma + (\alpha \cos^2\phi + \beta \sin^2\phi - \gamma) \sin^2\psi$$

로 나타낼 수 있다.

측면경사법(side inclination method)의 일반적인 강도분포식은 식 (10)의 μ 대신에 $\mu/\cos\psi$, ϵ_0 및 γ 대신에 각각 식 (12)의 ϵ^0 및 ζ 를 대입한 식으로 나타낼 수 있다.

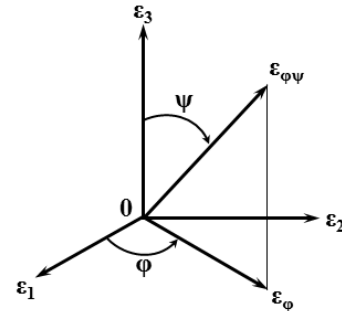


Fig. 2. Relationship between $\epsilon_{\phi\psi}$ and principal strain ϵ_1 and ϵ_2 are principal strains parallel to the specimen surface, and ϵ_3 is the strain perpendicular to the specimen surface.

3. 가중평균해석법

3.1. 가중평균변형률

깊이 $z = t\Delta$ 을 연속변수로 생각하면, Fig. 2에 나타난 임의방향 (ϕ, ψ) 에 대한 수직변형률 $\varepsilon_{\phi\psi}$ 는

$$\varepsilon_{\phi\psi}(z) = \varepsilon^0 + \zeta z \quad (13)$$

로 주어진다. 측면경사법인 경우를 생각하면, X선 흡수영향을 고려하여 대입한 가중평균변형률 $\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle$ 는

$$\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle = \frac{\int_0^\infty e^{-2\mu z/\sin\theta \cos\psi} \varepsilon_{\phi\psi}(z) dz}{\int_0^\infty e^{-2\mu z/\sin\theta \cos\psi} dz} \quad (14)$$

이므로, 식 (13)을 대입하여 다음 식을 얻을 수 있다.

$$\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle = \varepsilon^0 + \zeta \frac{\sin\theta \cos\psi}{2\mu} \quad (15)$$

식 (12) 및 Bragg의 관계, $\lambda = 2d \sin\theta$ 를 이용하여 구체적으로 나타내면

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle &= \varepsilon_3^0 + (\varepsilon_1^0 \cos^2\phi + \varepsilon_2^0 \sin^2\phi - \varepsilon_3^0) \sin^2\psi \\ &\quad + \{ \gamma + (\alpha \cos^2\phi + \beta \sin^2\phi - \gamma) \sin^2\psi \} \\ &\quad \times \frac{\lambda}{4\mu d} \sqrt{1 - \sin^2\psi} \end{aligned} \quad (16)$$

로 되며, 변형률구배 α, β, γ 에 따라서 $\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle$ 는 더 이상 $\sin^2\psi$ 에 대하여 선형관계로는 되지 않는 것을 알 수 있다.

3.2. 가중평균변형률과 회절선위치의 특성값과의 관계

뒤에서 설명하겠지만, 급격한 변형률구배가 존재할 때에 회절선 그 자체에 비대칭성을 나타낸다. 식 (16)의 $\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle$ 는 변형률의 가중평균값이지만, 측정가능한 양은 회절선의 위치[피크위치(peak position), 반가폭 위치(half-maximum position), 중심위치(centroid position) 등]이다. 따라서 실제로 관찰된 회절분포곡선에서 어떠한 특성값이 $\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle$ 에 대응하는 것인지에 대하여 파악할 필요가 있다.

이제 $h_3 = l + \Delta h$ 로 하면 다음 식을 유도할 수 있다.

$$\varepsilon = \frac{l - h_3}{h_3} = \frac{-\Delta h}{l + \Delta h} = \quad (17)$$

$$-\frac{\Delta h}{l} + \frac{(\Delta h)^2}{l^2} - \dots \approx \frac{l - h_3}{l}$$

여기서, Fig. 3(b)와 같이 역공간의 원점에서 역격자점 $00l$ 까지 거리 $|l|$ 에 비하여 $00l$ 점 주변의 회절에 기여하는 영역 $|\Delta h|$ 를 작게 하였다. 이것은 실제공간에서는 Fig. 3(a)와 같이 회절선을 덮어버리는 퍼짐 δ 가 Bragg 각도 θ_0 에 비해서 양이 매우 작다는 것과 동일하다. $|\Delta h|$ 및 δ 가 각각 $|l|$ 및 θ_0 에 비하여 미소량이라는 가정은 일반적인 경우라면 항상 성립한다.

그리고 가중평균변형률은 식 (17)을 이용하면

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &= \frac{\int_0^\infty I(z) \varepsilon(z) dz}{\int_0^\infty I(z) dz} \\ &= \frac{\int_0^\infty I(z) \left(1 - \frac{h_3}{l}\right) dz}{\int_0^\infty I(z) dz} = 1 - \frac{\langle h_3 \rangle}{l} \end{aligned} \quad (18)$$

로 나타낼 수 있으며, h_3 에 대한 강도분포의 가중평균 $\langle h_3 \rangle$ 에 대응하는 변형률은

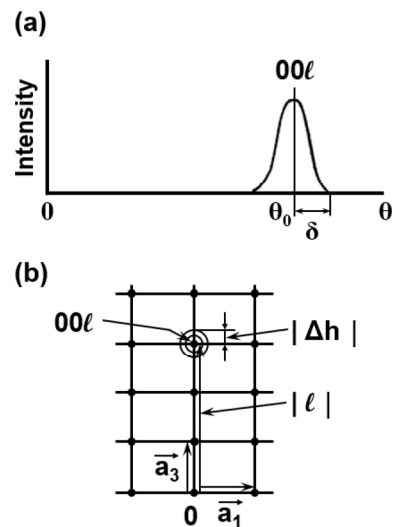


Fig. 3. The relationship between the Bragg angle and the size of the reflection area in real space and reciprocal space. (a) Illustration of the $00l$ reflection curve and its width. (b) Representation of the area width of the $00l$ reflection in reciprocal space.

$$\varepsilon^* = \frac{l - \langle h_3 \rangle}{\langle h_3 \rangle} \approx \frac{l - \langle h_3 \rangle}{l} = 1 - \frac{\langle h_3 \rangle}{l} \quad (19)$$

로 나타낼 수 있기 때문에 식 (18)과 식 (19)로부터

$$\langle \varepsilon \rangle = \varepsilon^* \quad (20)$$

즉, 변형률분포의 가중평균값 $\langle \varepsilon \rangle$ 은 실제 회절강도 분포 곡선의 중심위치에 대응하는 변형률 ε^* 과 일치하는 것을 알 수 있다. 다시 말하면, 식 (16) 우변의 변형률인자(ε_1^0 , ε_2^0 , ε_3^0 , α , β , γ)와 대응관계에 있는 것은 회절선 피크위치도 아니고, 반가폭 위치도 아니며, 중심위치만이 의미를 가진다는 것이다.

4. 회절강도 분포곡선의 계산결과와 $\sin^2\psi$ 다이어그램

4.1. 계산조건

등방 2축 응력상태를 고려하여 변형률분포를

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_2 = \varepsilon_1^0 + \alpha t \Delta, \\ \varepsilon_3 &= \varepsilon_3^0 + \gamma t \Delta \quad (t = 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (21)$$

로 주어진다. 식 (10)에서

$$K' = \frac{KMF^2 N_1 N_2}{\sin^2\theta}$$

로 바꾸면, 이때의 전체 강도분포식은

$$\begin{aligned} P'_t(2\theta, \psi) &= K' \sum_{n=-N_3+1}^{N_3-1} (N_3 - |n|) \left\{ \left(\frac{2\mu\Delta}{\sin\theta \cos\psi} \right)^2 + (2\pi n l \zeta \Delta)^2 \right\}^{-1} \\ &\times \left\{ \frac{2\mu\Delta}{\sin\theta \cos\psi} \cos 2\pi n (h_3 + l\varepsilon^0) - 2\pi n l \zeta \Delta \sin 2\pi n (h_3 + l\varepsilon^0) \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

$$\varepsilon^0 = \varepsilon_3^0 + (\varepsilon_1^0 - \varepsilon_3^0) \sin^2\psi, \quad \zeta = \gamma + (\alpha - \gamma) \sin^2\psi \quad (23)$$

이다. 이 식을 이용하여 Table 1에 나타낸 조건으로 다양한 변형률을 부여하여 회절강도 분포곡선을 그려서 피크 위치, 반가폭 위치 및 중심위치를 수치계산을 이용하여 구하였다. h_3 에 대응하는 변수 θ 의 변동은 θ_0 부근에서

Table 1. Characteristic values in the calculation of the diffraction profiles.

| | |
|--------------------------------------|--|
| Characteristic X-ray | CrK_α ($\lambda = 2.29092 \text{ \AA}$) |
| Diffraction plane | Fe (002) |
| Lattice constant | $a = 2.8664 \text{ \AA}$ |
| Bragg angle | $\theta_0 = 53.05685^\circ$ |
| Linear absorption coefficient | $\mu = 905.05 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ |
| The number of unit cells along [00l] | $N_3 = 350$ |
| Diameter of coherent domain | $D = 1,000 \text{ \AA}$ |
| Thickness of sub-divided layer | $\Delta = 1,000 \text{ \AA}$ |
| Young's modulus | $E = 21,000 \text{ (kg/mm}^2\text{)}$ |
| Poisson's ratio | $\nu = 0.28$ |

매우 작기 때문에 일정하게 하였고, 비례상수 K' 는 1로 하였다. 특히 계산을 간단하게 하기 위해서 표면의 변형률 ε_1^0 , ε_2^0 , ε_3^0 는 모두 0으로 하였다.

4.2. 변형률구배가 있을 때의 회절강도 분포곡선과 $\sin^2\psi$ 다이어그램

등방 2축 응력상태에서 다양한 변형률구배를 부가하여 회절강도 분포곡선을 계산하였다. Fig. 4는 $\psi = 0^\circ$ 에 대하여 3개의 변형률구배를 부여한 것, Fig. 5는 $\alpha = 1.13/\text{cm}$, $\gamma = -0.9/\text{cm}$ 에 대하여 ψ 각도에 따른 분포곡선의 차이를 나타낸 것이다.

표면변형률이 0임에도 불구하고, 변형률구배가 클 때와 ψ 이 작을 때의 값에 대하여 피크위치가 Bragg각도 θ_0 로부터 편향되고, 또한 분포곡선이 비대칭으로 되는 것이

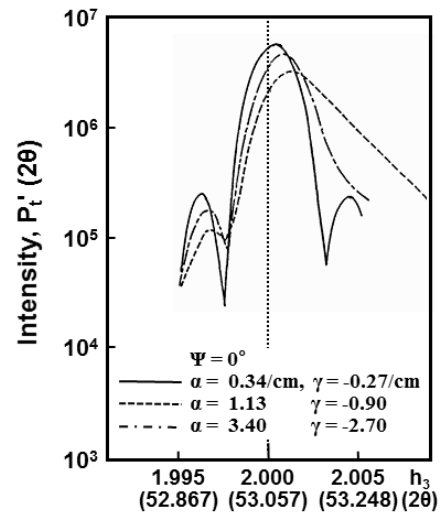


Fig. 4. The result of calculating the diffraction intensity distribution curves by giving three strain gradients for $\psi = 0^\circ$.

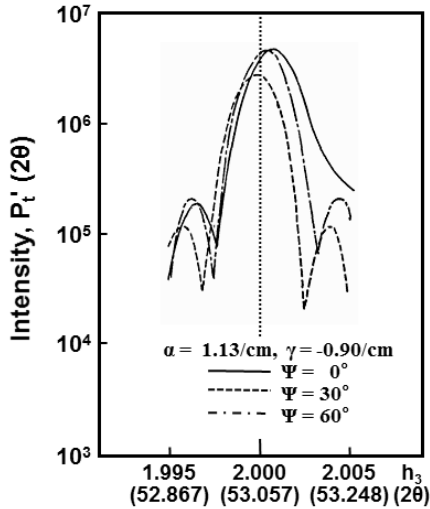


Fig. 5. Results showing the difference in diffraction intensity distribution curves according to $\psi = 0^\circ, 30^\circ$ and 60° for $\alpha = 1.13/\text{cm}$ and $\gamma = -0.9/\text{cm}$.

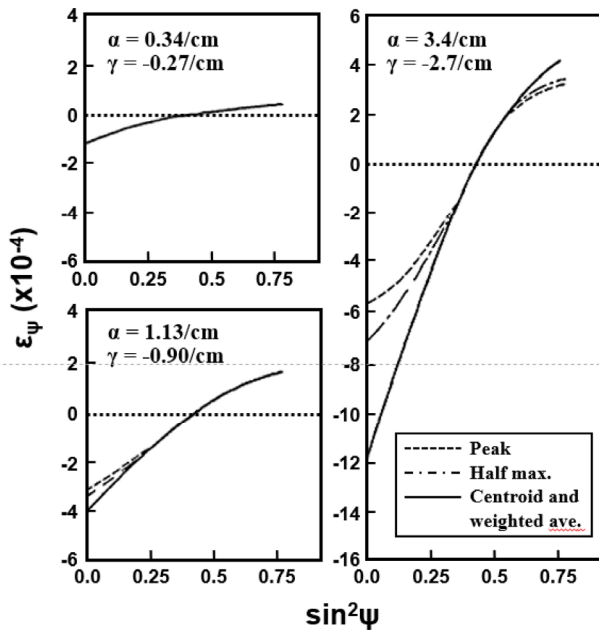


Fig. 6. Relationship between the strain corresponding to each X-ray diffraction position and $\sin^2\psi$ diagram.

뚜렷하게 나타났다. 이와 같은 분포곡선으로부터 피크위치, 반가폭 위치 및 중심위치를 계산하여 각각의 회절선 위치에 대응하는 변형률을 구하여 $\sin^2\psi$ 다이어그램에 나타내면 Fig. 6과 같이 된다.

변형률구배가 존재할 때는 ϵ_ψ 과 $\sin^2\psi$ 과의 관계는 예상한 것처럼 곡선으로 나타나는 것이 확인되었다. 그러나 변형률구배가 작을 때는 3가지 회절선 위치결정법 사이에 차이는 나타나지 않았지만, 변형률구배가 커질수록 차

이가 뚜렷하게 나타난 것이 특히 주목된다.

그리고 식 (16)에 따른 가중평균변형률 $\langle \epsilon_\phi \rangle$ 은 Fig. 4 와 Fig. 5에 나타낸 그래프의 중심위치에 대응하는 변형률 분포와 거의 일치한다는 것이 명확해졌다. 이것은 3.2.절에서 설명한 결론에 대하여 실제로 계산된 회절강도 분포 곡선을 사용하여 재확인되었다.

5. 정규 분포된 기본프로파일(principle profile) 중첩을 이용한 회절다이어그램의 시뮬레이션

5.1. 중심위치 결정방법

3.2.절과 4.2.절에서 설명한 바와 같이 식 (16)에서 우변의 변형률인자($\epsilon_1^0, \dots, \alpha, \dots$)와 직접적으로 관계가 있는 것은 회절선 중심위치에 대응하는 변형률이기 때문에 실제로 측정된 회절선 그래프의 중심위치를 정확하게 파악해야 한다. 중심위치는 측정각 2θ 에서 강도를 $I(2\theta)$ 로 하면

$$\langle 2\theta \rangle = \frac{\int I(2\theta)2\theta d(2\theta)}{\int I(2\theta)d(2\theta)} \quad (24)$$

로 주어지지만, 이 방법은 실제로 back ground 강도의 통계변동에 따라 더욱 정확한 back ground 직선을 그리는 것이 곤란하며, 중심위치를 결정할 때에 오차가 크게 나타난다고 보고되었다.⁸⁾

Fig. 1과 같이 표면으로부터 두께 Δ 인 얇은 층으로 분할하여 각 층의 회절강도곡선을 기본프로파일로 하고, 모든 층에서 얻은 합성프로파일을 구하였다. 계산을 용이하게 하기 위하여 다음과 같은 가정을 설정하였다.

- (1) 기본프로파일은 정규 분포곡선을 나타낸다.
- (2) 회절강도는 표면에서 깊이방향으로 지수함수적으로 감소한다.
- (3) 응력(변형률)분포는 표면에서 선형적으로 변화한다.
- (4) 기본프로파일의 표준편차는 각 층에서 모두 동일하다.

측면경사법인 경우를 고려하여, 가정 (1) 및 (2)를 바탕으로 t 번째 층에서 얻은 기본프로파일 $f_t(2\theta)$ 을 다음 식으로 나타내었다.

$$f_t(2\theta) = \exp\left[-\frac{2\mu t \Delta}{\sin\theta_0 \cos\psi}\right] \exp\left[-\frac{(2\theta - 2\theta_t)^2}{2s^2}\right] \quad (25)$$

$2\theta_t$ 는 기본프로파일의 피크위치에서 등방2축 응력상태

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_0 + \alpha' t \Delta \quad (26)$$

로 가정한다면

$$2\theta_t = 2 \arcsin \left\{ \frac{\lambda}{2(1 + \varepsilon_\psi) d_0} \right\} \quad (27)$$

$$\varepsilon_\psi = \frac{1}{E} \{-2\nu + (1 + \nu) \sin^2 \psi\} (\sigma_0 + \alpha' t \Delta) \quad (28)$$

로 주어진다. 여기서, σ_0 은 표면의 응력값, α' 은 표면아래의 응력구배이다. 식 (27) 및 식 (28)을 식 (25)에 대입하면 기본프로파일의 완전한 형태가 얻어지므로 합성프로파일 $f(2\theta)$ 는 다음 식과 같이 된다.

$$f(2\theta) = \sum_{t=0}^{\infty} f_t(2\theta) \quad (29)$$

이 식을 사용하여 Table 2 조건에서 다양한 s , α , σ_0 및 ψ 에 대한 합성프로파일을 구할 수 있다. 여기서, 총합의 상한값은 X선 침입깊이 또는 합성프로파일의 수렴성을 고려하여 $t_{\max} = 600$ 까지로 하였다.

Fig. 7은 $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$, $\alpha' = 10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$, $\psi = 0^\circ$ 인 경우에 대하여 기본프로파일의 표준편차 s 를 변화시켰을 때의 합성프로파일이다. s 가 작을 때에는 상당한 비대칭성이 나타났지만, s 가 커짐에 따라 합성프로파일의 폭이 넓어지며 점점 대칭성에 가까워진다. Fig. 8은 Fig. 7에서 합성프로파일의 피크위치와 중심위치를 s 에 대하여 나타낸 것이다. σ_0 및 α' 을 일정한 값으로 한다면 중심위치는 s 에 의존하지 않고 일정하며, 가중평균변형률인 식 (14)를 이용하여 계산한 값(Fig. 8에서 $s=0$ 일 때 \odot 표시 값)과 일치하지만, 피크위치는 s 에 대한 의존성이 크다. 즉, 가중

Table 2. Characteristic values in the calculation of the result profiles.

| | |
|--------------------------------|---|
| Characteristic X-ray | CrK_β ($\lambda = 2.08480 \text{ \AA}$) |
| Diffraction plane | Fe (211) |
| Bragg angle | $\theta_0 = 62.96823^\circ$ |
| Lattice spacing | $d_0 = 1.17024 \text{ \AA}$ |
| Linear absorption coefficient | $\mu = 647 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ |
| Thickness of sub-divided layer | $\Delta = 10^{-5} \text{ (cm)}$ |
| Young's modulus | $E = 21,000 \text{ (kg/mm}^2\text{)}$ |
| Poisson's ratio | $\nu = 0.28$ |

평균은 기본프로파일의 폭을 고려하지 않고 계산한 것이지만, 각 기본프로파일이 폭을 나타낸다고 하여도 정규분포곡선과 같이 최대위치에 대하여 대칭함수라고 하면, 그것들에 의한 합성프로파일의 중심위치는 가중평균위치와 일치한다는 것을 알 수 있다. 따라서 3.2.절과 4.2.절과 같이 응력인자(σ_0 , α')를 결정한다면 식 (14)의 $\langle \varepsilon_{\phi\psi} \rangle$ 에 대응하는 것은 합성프로파일(회절선)의 피크위치가 아닌 중심위치이다. 단, 기본프로파일의 폭, 즉 합성프로파일의 폭이 충분히 큰 경우에는 근사적으로 피크위치를 중심위치로 치환하는 것이 가능하다.

Fig. 9는 $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$, $\alpha' = 10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$, $s = 0.1 \text{ deg}$. 일 때에 다른 $\sin^2 \psi$ 값으로 구한 합성프로파일이다. Fig. 5와 동일하게 $\alpha' > 0$ 인 때는 $\sin^2 \psi = 0$ 일 때 고각도쪽으로 길게 늘어져서 비대칭으로 되지만, $\sin^2 \psi = 0.4$ 에서 거의

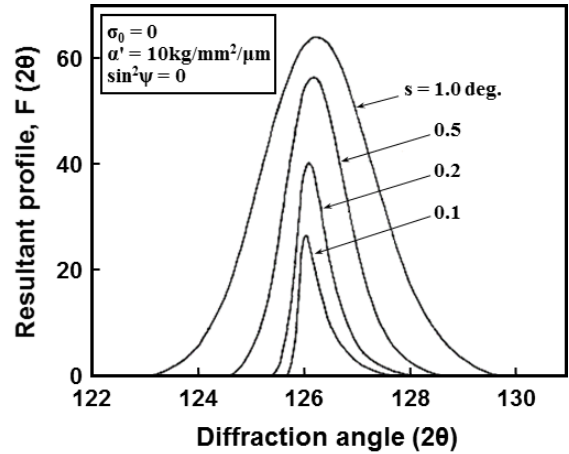


Fig. 7. Synthetic profile result when standard deviation s of the basic profile is changed at $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$, $\alpha' = 10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$, and $\psi = 0^\circ$.

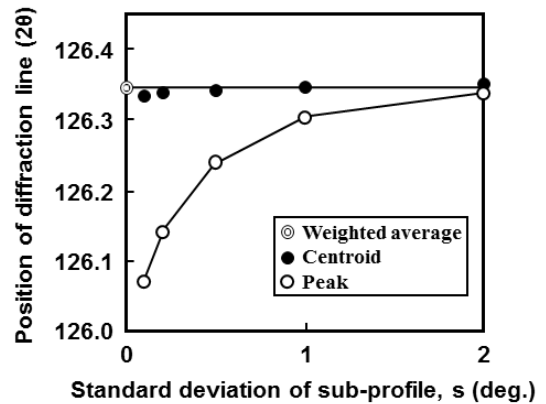


Fig. 8. Results of peak position and centroid position for s in the synthetic profile of Fig. 7. In this case σ_0 and α' are the fixed values of 0 kg/mm^2 and $10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$, respectively.

대칭으로 되며 $\sin^2\psi=0.8$ 에서는 반대로 낮은 각도쪽으로 길게 늘어지는 것을 알 수 있다.

이와 같은 합성프로파일에 대하여 Fig. 10에 삽입하여 나타낸 그래프와 같이 2θ 축에 평행한 직선을 그어서 합성프로파일의 중심위치 $2\theta_c$ 가 프로파일을 2등분 하는 높이 I_c 를 구하면, 프로파일의 피크 높이 I_{max} 와의 비인 I_c/I_{max} 는 σ_0, α', ψ 의 값에 관계없이 $s < 0.5$ 인 범위에서는 약 1/5이 되며, $s > 0.5$ 에서는 프로파일의 대칭성이 증가하기 때문에 그래프에서 구하는 I_c/I_{max} 의 범위가 넓어지는 것을 알았다(Fig. 10). 이 결과로부터 실제로 측정된 회절선 프로파일에서 back ground로부터 1/5 I_{max} 인 높이에서 back ground에 평행한 직선을 그어서 중점위치(midpoint)를 구하면 식 (24)를 대신해서 근사적으로 회절선의 중심위치(centroid position)를 부여하게 된다. 그리고 프로파일 폭이 더 넓어질수록 반가폭 중점위치(half-maximum mid-

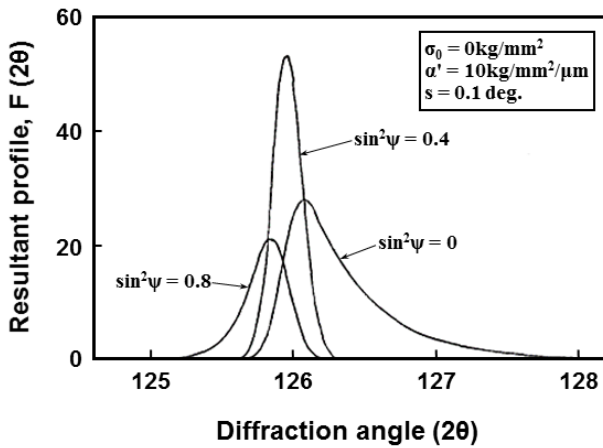


Fig. 9. The synthesis profile obtained with different $\sin^2\psi$ values when $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$, $\alpha' = 10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$, and $s = 0.1 \text{ deg}$.

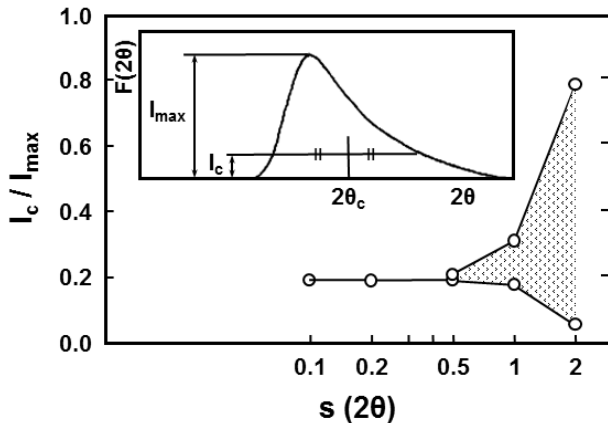


Fig. 10. Centroid position of the resulting profiles. The height relative to the centroid location is approximately 1/5 of the peak height.

point position) 또는 피크위치에서 중심위치로 대체할 수 있다는 것을 파악하였다.

5.2. $\sin^2\psi$ 다이어그램과 응력인자 평가

합성프로파일로 피크위치와 중심위치를 구하고, 각각에 대응하는 격자상수를 계산하여 $\sin^2\psi$ 다이어그램을 구하였다. $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$, $s = 0.1 \text{ deg}$ 로서 다른 α' 에 대하여 계산하면, Fig. 6과 같이 α' 이 작으면 σ_0 와 s 가 근사적으로 일치하여 직선에 가깝게 되지만, α' 이 클수록 σ_0 와 s 의 차이는 커진다. Fig. 11은 $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$, $\alpha' = 10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$ 로 하여 다른 s 에 대하여 구한 결과이다. 중심위치는 s 에 관계없이 동일한 곡선을 나타내었지만, 피크위치는 s 가

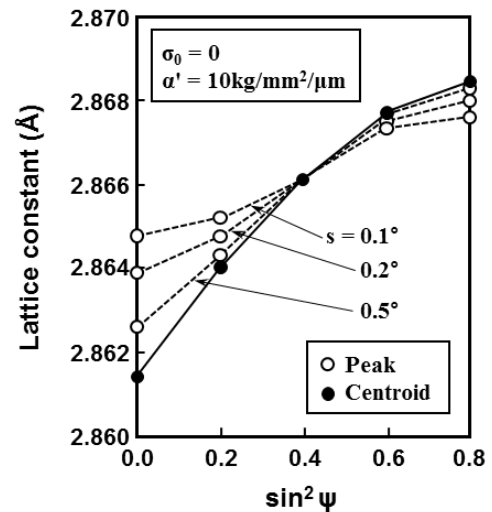


Fig. 11. The results obtained for different s when $\sigma_0 = 0 \text{ kg/mm}^2$ and $\alpha' = 10 \text{ kg/mm}^2/\mu\text{m}$.

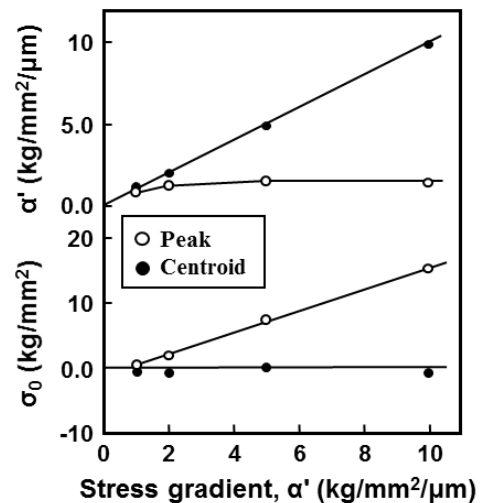


Fig. 12. Inverse calculation of σ_0 and α' .

작을수록 중심위치와의 차이가 많고, s 가 커지면 근사적으로 중심위치와 일치하게 되는 것을 알 수 있다. 그리고 이 중심위치 곡선은 가중평균변형률인 식 (16)에서 구한 $\langle \alpha_\psi \rangle$ 의 곡선과도 거의 일치한다.

다음은 Fig. 11에 나타낸 데이터를 사용하여 식 (16)을 이용하여 σ_0 와 α' 을 역산하였다. 예를 들어, s 가 일정한 경우에는 Fig. 12와 같이 중심위치를 이용하면 α' 에 관계 없이 가정한 σ_0 과 α' 을 구할 수 있지만, 피크위치를 이용하면 α' 이 클 때에 오차가 커진다. α' 을 일정하게 하였을 때에도 마찬가지로, 피크위치를 이용하면 s 가 작을 때 가정한 값과의 차이가 크다는 것을 파악하였다.

6. 결 론

Warren의 회절이론에 따른 직교함수법과 정규분포의 기본프로파일을 합성하는 방법으로 표면에서 선형변형률(응력)구배가 있을 때의 회절선 프로파일을 계산하여 검토한 결과, 아래와 같은 현상이 명확하게 되었다.

- (1) 변형률구배가 존재하면 회절선 프로파일은 비대칭으로 되며, 그 결과 피크위치, 반가폭 위치 및 중심위치는 각각 다른 값을 나타내었다.
- (2) 피크위치와 중심위치와의 차이는 변형률(응력)구배가 클수록, 그리고 기본프로파일 폭이 작을수록 뚜렷하게 나타났다.
- (3) 변형률인자 또는 응력인자에 의존하지 않는 것은 회절선의 중심위치이며, 특히 변형률(응력)구배가 클 때나 회절선 폭이 작을 때에는 피크위치, 반가폭 위치는 변형률(응력)인자를 나타내는 대표값이 아니다.

- (4) 가중평균변형률은 식 (16)으로 나타낼 수 있으며, 회절선의 중심위치에 대응하는 변형률값에 따라 변형률(응력)구배가 있을 때의 응력해석이 가능하게 되었다.
- (5) 회절선의 $1/5 I_{\max}$ 높이에서 back ground에 평행한 직선을 그려서 회절선을 2등분 하는 위치가 근사적으로 중심위치에 해당한다.

References

1. I. G. McDonald, W. M. Moehlenkamp, D. Arola and J. Wang, *Exp. Mech.*, **59**, 111 (2019).
2. T. Sakakibara and Y. Sato, *Powder Diffr.*, **20**, 117 (2005).
3. C. S. Han and Y. J. Kwon, *Korean J. Mater. Res.*, **31**, 697 (2021).
4. B. Ortner, *Int. J. Mater. Res.*, **99**, 933 (2008).
5. I. C. Noyan and J. B. Cohen, *Adv. X-Ray Anal.*, **27**, 129 (1983).
6. A. Baczmanski, R. J. Lark and S. J. Skrzypek, *Mater. Sci. Forum*, **404/407**, 29 (2002).
7. H. S. Lipson, *Acta Crystallogr., Sect. A: Cryst. Phys., Diffr., Theor. Gen. Crystallogr.*, **27**, 192 (1971).
8. T. Shiraiwa, Y. Sakamoto, S. Kobayashi, S. Anezaki, H. Kato and A. Kuwabara, *Automatica*, **17**, 613 (1981).

<저자소개>

한창석

호서대학교 자동채CT공학과 교수

이찬우

호서대학교 자동채CT공학과 학부생