

# 미시역학적 접근에 의한 단결정 형상기억합금의 리오리엔테이션 거동 모델링

## Modeling of the Reorientation Behavior of a Single Crystalline Shape-Memory Alloy by a Micromechanical Approach

구 병 춘\*

Goo, Byeong-Choon

### ABSTRACT

A Helmholtz free energy for a martensitic transformation of a single crystalline shape-memory alloy is obtained by a micromechanical approach. 24 variants of the single crystal are taken into account. In the framework of irreversible thermodynamics, a kinetic relation, a martensitic nucleation criterion and the reorientation criterion of martensitic variants are obtained. These relations are valid for a three-dimensional proportional or non-proportional mechanical loading or a combination of mechanical and thermal loading. Reorientation behavior of a single crystalline shape-memory alloy CuZnAl is simulated. When a tensile load is applied to a thermally-induced martensite, 24 self-accommodated martensitic variants are reoriented to the most favorable variant. In the following unloading, the most favorable variant in the tensile load is reoriented to the most favorable variant in this loading condition.

### 1. 서 론

1950 년의 AuCd 합금의 형상기억효과 발견에 이어 1960 년대 전반 좀 더 실용적인 NiTi 형상기억합금의 발견으로 형상기억합금은 재료공학, 기계공학, 의공학 등에서 많은 연구와 더불어 실용화에 큰 진전이 있어 왔다. 초기의 많은 연구는 주로 재료공학의 영역에서 이루어졌고 열-기계적 거동에 관한 모델링의 관점에서는 70 년대에 들어 Erickson<sup>(1)</sup>에 의해 시작되었다고 할 수 있다. Erickson의 모델은 일차원 막대가 인장하중을 받는 경우에 관한 것으로 두 개의 상으로 이루어진 1 차원 막대가 인장하중을 받을 때 에너지의 최소화 즉 평행상태는 두 개의 상이 공존하는 상태를 보였다. 그 이후 Falk<sup>(2)</sup>, Niezgodka and Sprekels<sup>(3)</sup>, Müller, and Xu<sup>(4)</sup>, Abeyaratne and Knowles<sup>(5)</sup> 등이 가정된 자유에너지로부터 초탄성과 히스테리시스 현상을 설명하였고, Bondaryev and Wayman<sup>(6)</sup>, Graesser and Cozzarelli<sup>(7)</sup>, Raniecki and Lexcellent<sup>(8)</sup>은 비가역 열역학에 근거한 현상학적인 모델로부터 초탄성 등을 모델링하였다. 한편 Patoor *et al.*<sup>(9)</sup>과, Sun and Hwang<sup>(10, 11)</sup>, Goo and Lexcellent<sup>(12)</sup>은 미시역학적 접근을 시도하였다. 한편 실험결과에 의하면 형상기억합금의 초탄성은 하중이 가해지는 속도와 시편의 열전달 속도에 크게 의존한다. Leo *et al.*<sup>(13)</sup>은 많은 가정을 설정하여 NiTi 복결정에 대해 작용하중의 속도를 고려한 초탄성거동을 모델링하였다. 속도효과를 열역학적 모델로부터 설명한 연구로는 Lexcellent, Goo *et al.*<sup>(14)</sup>과 Kim and Abeyaratne<sup>(15)</sup> 등을 들 수 있다. 형상기억합금의 기계적 거동은 크게 오스테나이트 상의 초탄성(pseudo-elasticity), 오스테나이트 상과 마르텐사이트 상 사이에서 일어나는 기억효과, 그리고 마르텐사이트 상에서의 변형과 같이 세가지로 구분할 수 있다. 이러한 세가지 현상을 포괄적으로 기술할 수 있는 모델은 1 차원의 경우에도 찾아보기 어렵다. 단결정의 경우는 Goo and Lexcellent<sup>(12)</sup>이 미시역학적 접근으로 마르텐사이트 각 바리안트의 결정학적 구조를 고려하여 세가지 거동을 성공적으로 모델링할 수 있는 하나의 모델을 제시하였다. Goo and Lexcellent<sup>(16)</sup>은 복결정의 거동을 단결정의 거동으로부터 균질화법을 이용하여 예측하였고 Patoor *et al.*<sup>(9)</sup>은 셀프 콘시스턴트법(self-consistent method)으로 복결정의 거동을 예측하였다.

\* 한국철도기술연구원 차량연구본부, 정회원

외국에서의 형상기억합금의 응용에 관한 자료는 여러 잡지에서 쉽게 구할 수 있으므로 여기서는 구체적으로 소개하지 않고자 한다. 다만 차량분야에서의 응용사례를 몇 가지 소개하면<sup>(17)</sup> 철도의 디젤엔진차에 사용되는 것으로 냉각수의 온도를 감지하여 바이패스 회로를 개폐시키는 데 사용되는 형상기억 용수철, 닛산 자동차에서 1985년 모터쇼에 출품한 NISSAN MID-4에 설치된 에어 아우터래트는 보닛 위에 설치한 플랩을 라디에이터의 배열온도에 따라서 개폐시키는 것으로 온도감지와 구동소자로 동시에 작용하는 형상기억 용수철을 사용하였다. 추운지방에 운행하는 철도차량의 객차용 스팀 난방장치에 사용되는 증기배수밸브에 형상기억용수철을 사용하면 동결되더라도 파괴되는 일이 없어 종래의 가스봉입 벨로우즈에 비해 내구성이 크게 향상된다. 기타 수동 변속기의 달가닥거리는 소리를 방지하는 기구, 연료증발 가스배출 억제장치 등이 있고 일본에서는 형상기억합금 스프링을 활용하여 열차의 구동기어 윤활유의 양을 자동으로 조정하는 장치를 개발하여 신간선 노조미에 적용하여 구동전동기의 소비전력을 정회전시 40~50%, 역회전시 20% 정도 줄일 수 있었다.<sup>(18)</sup>

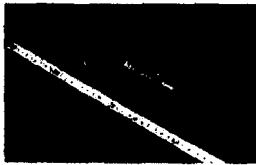


Fig. 1 신간선용 형상기억합금 윤활유 조정장치

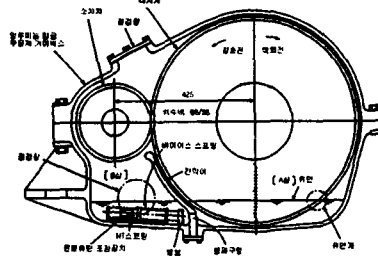


Fig. 2 신간선 기어 박스 및 윤활유 조정장치

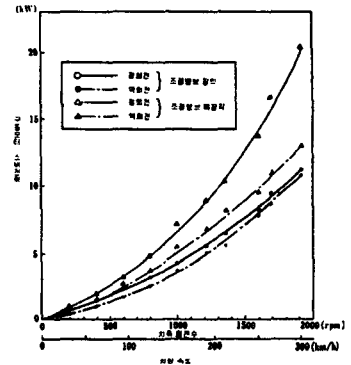


Fig. 3 윤활유 조정장치에 의한 기어의 동력손실 절감

외국에 비해 국내에서의 형상기억합금에 대한 연구는 최근의 일로 약 10여년의 짧은 역사를 지나 최근 많은 관심을 끌고 있다. 1990년에 KS에 '형상기억 합금 용어(KS D 0057-1990)'가 정의되었고 이어 '형상기억 합금의 변태점 측정 방법 (KS D 0058-1990)', TiNi계 형상기억 합금선의 정온 인장 시험 방법 (KS D 0072-1993)', 형상기억 합금 코일 스프링의 정온 하중 시험방법 (KS D 0302-1993)', 형상기억 합금 코일의 일정 변형 시험 방법 (KS D 0304-1995)', 그리고 '형상기억 합금 코일의 일정변형 열 사이클 시험 방법 (KS D 0303-1995)'이 제정되어 국내 산업계에서도 형상기억합금을 활용할 수 있는 기틀을 마련하였으나 응용된 사례는 많지가 않다. 국내의 연구자료 데이터 베이스를 검색한 결과 현재까지 국내에서의 연구는 연구보고서, 학술지 논문, 학위논문을 통틀어 100여편 정도로 매우 취약한 상황이다. 연구분야는 주로 재료분야이고 열 기계적 거동에 관한 모델링 영역에서는 연구가 많지 않음을 알 수 있다. 구병춘<sup>(19)</sup>은 미시역학적 접근으로 단결정의 초탄성 거동을 모델링하고 복결정의 거동을 균질화법으로 예측하였다. 그는 상변환시의 잠열의 영향을 고려하여 작용하중의 속도가 초탄성의 거동에 미치는 영향을 검토하였다. 김상주<sup>(20)</sup>는 마르텐사이트가 생성되는 경계가 상변환과 함께 지수함수적으로 증가한다는 가정으로부터 일차원 거동을 모델링 하였다. 국내에서 형상기억합금의 응용으로는 김명순 등<sup>(21)</sup>이 열처리조건 변화가 형상기억합금 스프링의 특성에 어떠한 변화를 주는가를 연구하였고 이광호와 이승기<sup>(22)</sup>는 형상기억합금 스프링과 스테인레스 스트립을 이용하여 밴딩 액추에이터를 개발하였다. 그리고 나승우와 이승기<sup>(23)</sup>는 형상기억합금 스프링을 이용하여 관내에서 일본에 34mm를 주행할 수 있는 주행기구를 제작한 사례가 있다.

본 연구에서는 우선 미시역학과 비가역 열역학으로부터 임의의 하중조건에서 초탄성, 형상기억 효과 그리고 마르텐사이트 바리안트(variant)의 리오리엔테이션(reorientation)을 모델링 할 수 있는 모델을 제시하고 리오리엔테이션 거동을 시뮬레이션 하였다.

## 2. Helmholtz 자유에너지

일반적으로 형상기억합금의 상변환에서 낮은 온도의 상은 마르텐사이트라 불리며 높은 온도의 상은 오스테나이트라 불린다. 모델의 단순화를 위해 두 상이 같은 크기의 탄성계수  $E$ , 푸아송비  $\nu$  그리고 밀도  $\rho$ 를 갖는다고 가정한다. Wechsler 등<sup>(24)</sup>의 현상학적인 이론에 의하면 마르텐사이트 상변환은 변형과 회전 없는 하비트 평면(habit plane)에서 이 평면에 수직성분과 이 평면에 평행한 성분으로 구성되며 이 때의 변형률  $\epsilon_s^p$ 은 식 (1)과 같이 주어진다.

$$\epsilon_s^p = gR_s = \frac{1}{2}g(e_s \otimes n_s + n_s \otimes e_s) \quad (1)$$

여기서  $e_s$ 는 상변환의 변위방향의 단위벡터이고  $n_s$ 는 하비트 평면에 수직인 단위벡터이다.  $g$ 는 변형의 크기를 나타내는 재료상수이다.  $R_s$ 는 바리안트  $s$ 의 방향텐서이고 기호  $\otimes$ 는 다이아딕곱(dyadic product)을 나타낸다. 모든 벡터와 텐서는 굵은 문자로 표현되며 시험실에 고정된 동일한 기준좌표계에 대해 기술된다. 바리안트  $s$ 는 동일한  $e_s$ 와  $n_s$ 를 갖는 마르텐사이트 전체로 정의된다. 따라서 하나의 바리안트는 한개 혹은 많은 수의 마르텐사이트 판들로 이루어 질 수 있다. 각 마르텐사이트 바리안트의 부피비  $f_s = V_s/V$  ( $s=1, \dots, n$ )가 모델의 내부상태변수(internal state variable)로 사용될 것이다. 여기서  $V_s$ 는 마르텐사이트 바리안트  $s$ 의 부피이고  $V$ 는 해석대상인 시편의 전체부피이다. 해석영역은 하나의 바리안트에 비해 충분히 크다고 가정되어 무한체에서 얻어진 해가 사용될 것이다.

미소변형의 가정하에서 해석대상인 시편의 전체변형률(global strain)  $E$ 는 탄성변형률  $E^e$ 와 상변환에 의한 변형률  $E^p$ 로 나누어진다. 전체변형률  $E$ 는 모든 바리안트에 대한 국부변형률  $\epsilon$ 의 평균값으로부터 얻어진다.

$$\begin{aligned} E &= E^e + E^p = \langle \epsilon^e \rangle_V + \langle \epsilon^p \rangle_V \\ &= M : \Sigma + f \langle \epsilon^p \rangle_{V_n} = M : \Sigma + g \sum_{s=1}^N f_s R_s \end{aligned} \quad (2)$$

여기서  $\langle \cdot \rangle$ ,  $M$  그리고  $f = V_n/V$ 는 각각 부피평균, 탄성 콤포지언스 텐서 그리고 시편에 대한 전체 마르텐사이트의 부피비이다. 두 텐서 사이의 기호  $:$ 는 텐서의 콘트랙트곱(contracted product)을 나타낸다.

무한체로 가정되는 오스테나이트에 타원체 형상으로 가정되는 하나의 마르텐사이트가 생성되면 오스테나이트와 타원체 사이에는 변형의 차이에 의해 내부응력이 생성된다. 이 타원체에 생성되는 응력은 잘 알려진 Eshelby의 해<sup>(25)</sup>로 주어진다. 그러나 타원체의 수가 많거나 여러종류의 타원체가 있는 경우 Eshelby의 해를 직접 이용할 수 없다. 무한체내에 동일한 형상의 타원체가 무작위로 흩어져 있는 경우 평균내부응력은 Mori와 Tanaka<sup>(26)</sup>에 의해 얻어졌다. 그러나 형상기억합금의 상변환에서 각 바리안트는 무작위로 생성되지 않으므로 Mori와 Tanaka의 개념을 적용할 수 없으므로 여기서는 K.B.W. (Kröner<sup>(27)</sup>, Budiansky and Wu<sup>(28)</sup>)의 균질화의 개념으로 평균응력과 평균변형률을 구한다. 동일한 바리안트를 구성하는 마르텐사이트판들은 타원체로서 두 주반경이 같고 나머지 주반경은 두 주반경에 비해 매우 작다고 가정한다 ( $a_1 = a_2$ ,  $a_3/a_1 \ll 1$ ). 두 주반경  $a_1$ ,  $a_2$ 는 하비트평면상에 있고  $a_3$ 는 하비트평면에 수직으로  $n_s$ 의 방향과 일치한다. K.B.W.의 균질화 개념에 의하면 상변환에 의한 타원체의 변형률은 Eshelby 문제에서의 고유변형률(eigenstrain)에 해당하므로 바리안트  $s$ 에 작용하는 국부내부응력  $\sigma_s$ 는 Eshelby의 해에 의해 아래와 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \sigma_s &= L : (S_s - I) : (\epsilon_s^p - E^p) \\ &= L : (S_s - I) : (\epsilon_s^p - \sum_{i=1}^N f_i \epsilon_i^p) = L : (S_s - I) : \epsilon_s^p - L : (S_s - I) : \sum_{i=1}^N f_i \epsilon_i^p \end{aligned} \quad (3)$$

여기서  $L$ 은 탄성 스티프니스 텐서이고  $S_s$ 는 바리안트  $s$ 에 대한 Eshelby 텐서이며  $I$ 는 단위텐서이다. 하나의 바리안트  $s$ 만이 있는 경우 바리안트  $s$ 의 내부응력  $\sigma_s$ 는 식 (4)로 주어지며 Mori와 Tanaka<sup>(26)</sup>에 의해 얻어진 해와 일치함을 알 수 있다.

$$\sigma_s = (1 - f_s)L : (S_s - I) : \epsilon_s^p \quad (4)$$

내부응력  $\sigma_s$ 에 의해 시편의 단위질량당 저장된 에너지  $W^{int}$ 는 아래와 같이 주어진다<sup>(29)</sup>.

$$\begin{aligned} W^{int} &= -\frac{1}{2\rho V} \int_V \sum_{s=1}^N \epsilon_s^p : \sigma_s dV \\ &= -\frac{1}{2\rho} \sum_{s=1}^N f_s \epsilon_s^p : L : (S_s - I) : \epsilon_s^p + \frac{1}{2\rho} \sum_{s=1}^N \sum_{i=1}^N f_s f_i \epsilon_s^p : L : (S_s - I) : \epsilon_i^p \end{aligned} \quad (5)$$

여기서, 식 (5)를 간략히 표현하기 위해

$$W_s = -\frac{1}{2} \epsilon_s^p : L : (S_s - I) : \epsilon_s^p \quad (6)$$

그리고

$$W_{si} = -\frac{1}{2} \epsilon_s^p : L : (S_s - I) : \epsilon_i^p \quad (7)$$

라 하면 식 (5)는 아래 식 (8)과 같이 표현된다.

$$W^{int} = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^N f_s (1-f_s) W_s - \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^N \sum_{i=1}^N f_s f_i W_{si} \quad (8)$$

식 (8)의 첫번째 항은 바리안트  $s$ 에 의해 저장된 에너지이며 두번째 항은 바리안트들 사이의 간섭에 의한 에너지이다. 한편, Colonnetti의 정리<sup>(29)</sup>에 의하면 외력에 의한 에너지  $W^{ext}$ 와 내부응력에 의한 에너지  $W^{int}$  사이에는 간섭이 없으므로  $W^{ext}$ 는 아래와 같이 주어진다.

$$W^{ext} = \frac{1}{2\rho} E^e : L : E^e \quad (9)$$

오스테나이트의 비열을  $c_A$ , 오스테나이트의 온도에 의존하는 단위질량당의 에너지, 마르텐사이트의 비열을  $c_M$ , 마르텐사이트의 온도에 의존하는 단위질량당의 에너지  $\Psi_M^T$ 라 하면 오스테나이트와 마르텐사이트로 구성된 시편의 경우 온도에 의존하는 에너지  $\Psi^T$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \Psi^T &= (1-f) \Psi_A^T + f \Psi_M^T \\ &= -c_A T \text{Log}(T) + C_1^A T + C_2^A + f C^* (T - T_0) + f (c_M - c_A) [T_0 \text{Log}(T_0) - T \text{Log}(T)] \end{aligned} \quad (10)$$

여기서  $C_1^A$ ,  $C_2^A$ ,  $C_1^M$ ,  $C_2^M$ 는 상수이고  $T_0$ 는  $\Psi_A^T(T_0) = \Psi_M^T(T_0)$ 로 정의되는 열평형온도이고  $C^* = (C_1^M - C_1^A)$ . 따라서 시편의 Helmholtz 자유에너지는 아래와 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \Psi &= W^{ext} + W^{int} + \Psi^T \\ &= \frac{1}{2\rho} (E - g \sum_{s=1}^N f_s R_s) : L : (E - g \sum_{s=1}^N f_s R_s) + \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^N f_s (1-f_s) W_s - \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^N \sum_{i=1}^N f_s f_i W_{si} \\ &\quad - c_A T \text{Log}(T) + C_1^A T + C_2^A + f C^* (T - T_0) + f (c_M - c_A) [T_0 \text{Log}(T_0) - T \text{Log}(T)] \end{aligned} \quad (11)$$

식을 간단히 하기 위하여 모든 바리안트의 모든 마르텐사이트의  $\beta = a_3/a_1$ 가 동일하다고 가정하면  $W_s$ 는 상수가 된다. 더하여 지금부터 두 상은 같은 비열을 갖는다고 가정한다( $c = c_A = c_M$ ).

Helmholtz 자유에너지로부터 글로발 응력은 다음과 같이 주어진다<sup>(30)</sup>.

$$\Sigma = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial E} = L : (E - g \sum_{s=1}^N f_s R_s) \quad (12)$$

상태변수  $f_s$ 에 대응하는 변수  $F_s$ 는 아래와 같이 정의된다.

$$\begin{aligned}
 F_s &= -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial f_s} \\
 &= g R_s \cdot \mathbf{L} \cdot \left[ E - g \sum_{s=1}^N f_s R_s - \alpha(T - T_r) \mathbf{J} \right] - (1 - 2f_s) W_s + 2 \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq s}}^N f_i W_{si}^* + \rho C^* (T - T_0)
 \end{aligned} \quad (13)$$

여기서  $W_{si}^* = \frac{1}{2}(W_{si} + W_{is})$ 는  $s$ 와  $i$ 에 대해 대칭이다.

### 3. 구성방정식

상태변수  $f_s$ 의 변화는 바리안트  $s$ 의 상변환 그 자체와 다른 마르텐사이트 바리안트로부터 바리안트  $s$ 로의 리오리엔테이션에 기인하므로 아래와 같이 표현될 수 있다.<sup>(11)</sup>

$$\dot{f}_s = \dot{f}_{s0} + \dot{f}_{s,j} + \dots + \dot{f}_{s,j-1} + \dot{f}_{s,s+1} + \dots + \dot{f}_{s,N}, \quad s=1, \dots, N \quad (14)$$

여기서  $\dot{f}_{s0}$ 는 상변환에 의한 변화율로  $\dot{f}_{s0} > 0$ 는 정방향상변환(오스테나이트→마르텐사이트)을 나타내고,  $\dot{f}_{s0} < 0$ 은 역방향상변환(마르텐사이트→오스테나이트)을 나타낸다.  $\dot{f}_{s,i}$ 는 마르텐사이트 바리안트  $i$  ( $i \neq s$ )와  $s$ 사이의 변화율로  $\dot{f}_{s,i} > 0$ 이면 바리안트  $i$ 가 바리안트  $s$ 로 리오리엔테이션되는 것을 나타내고  $\dot{f}_{s,i} < 0$ 이면 그 반대이다. 따라서 아래와 같은 관계가 성립한다.

$$\dot{f}_{s,i} = -\dot{f}_{i,s} \quad (15)$$

상변환에 있어 손실은 두 상의 경계면에서의 마찰, 결합의 생성, 소성변형, 음향방출, 열손실 등이다. 리오리엔테이션 과정에서도 손실은 유사한 원인으로 생기나 잠열에 의한 열손실은 무시된다. 상변환의 기계적 손실을  $\dot{W}_d^n$ 은 아래와 같은 간단한 지수형으로 가정된다.

$$\dot{W}_d^n = \pm \sum_{s=1}^N \dot{h}_0 F_s \left( \pm (F_s - D_r^{(i)}) \right)^n \quad (16)$$

여기서  $\dot{h}_0$ 와  $n$ 은 상수이고,  $i=1$ 은 정방향상변환을 나타내고  $i=2$ 는 역방향상변환을 표시한다.  $\pm$ 의  $+$ 는 정방향을  $-$ 는 역방향을 나타낸다. 어떤 바리안트의 손실은 다른 바리안트와는 독립적이라 가정되었다. 함수  $\langle H(x) \rangle$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$H(x) \geq 0, \langle H(x) \rangle = H(x); \quad H(x) < 0, \langle H(x) \rangle = 0 \quad (17)$$

$D_r^{(i)}$ 는 일반적인 형태로 다음과 같이 표시될 수 있다.

$$D_r^{(i)} = D_0^{(i)} + D_r^{(i)}(f_s) \quad (18)$$

여기서  $D_0^{(i)}$ 는 상수이고  $D_r^{(i)}(f_s)$ 는  $f_s$ 의 함수로 경화를 나타내는 항이다. 리오리엔테이션에 기인하는 손실률  $\dot{W}_d^n$ 은  $\dot{f}_{s,i}$ 의 함수로 아래와 같이 가정되었다.

$$\dot{W}_d^n = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^N \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq s}}^N D_{re}^{(i)} \dot{f}_{s,i} \quad (19)$$

여기서  $D_{re}^{(i)}$ 는 아래와 같이 일반적인 형태로 표현할 수 있다.

$$D_{re}^{(i)} = D_3^{(i)} + D_4^{(i)}(f_s) \quad (20)$$

여기서  $D_3^{(i)}$ 은 상수이고  $D_4^{(i)}(f_s)$ 는 경화를 나타내는 항이다.  $i=1$ 는 바리안트  $t$ 로부터 바리안트  $s$ 로의 리오리엔테이션을 나타내고  $i=2$ 는 바리안트  $s$ 로부터  $t$ 로의 리오리엔테이션을 나타낸다. 따라서 기계적 손실에 관한 식들로부터 다음과 같은 관계가 얻어진다.

$$\sum_{s=1}^N F_s \dot{f}_s = \pm \dot{h}_0 \sum_{s=1}^N F_s (\pm(F_s - D_{re}^{(i)}))^n + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^N \sum_{\substack{t=1 \\ t \neq s}}^N D_{re}^{(i)} \dot{f}_{s,t} \quad (21)$$

식 (14)과 (15)를 (21)에 대입하면 아래의 식이 얻어진다.

$$\sum_{s=1}^N [\dot{f}_{s0} \mp \dot{h}_0] (\pm(F_s - D_{re}^{(i)}))^n F_s + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^N \sum_{\substack{t=1 \\ t \neq s}}^N (F_s - F_t - D_{re}^{(i)}) \dot{f}_{s,t} = 0 \quad (22)$$

이 식이 임의의  $F_s$ 와  $\dot{f}_{s,t}$ 에 대해 만족하기 위해서는 두 항이 각각 영이 되어야 한다.

$$\dot{f}_{s0} = \pm \dot{h}_0 (\pm(F_s - D_{re}^{(i)}))^n \quad (23)$$

$$F_s - F_t - D_{re}^{(i)} = 0 \quad (24)$$

식 (23)은 상변환시의 바리안트  $s$ 의 거동을 나타내고 식 (24)는 바리안트  $t$ 와  $s$ 사이의 리오리엔테이션의 판별식이다.  $Y_{st} = 0$ 이면 바리안트  $t$ 가 바리안트  $s$ 로 리오리엔테이션 되고 이때의 리오리엔테이션을  $\dot{f}_{s,t}$ 은 아래의 식으로부터 얻어진다.

$$\dot{Y}_{st} = \dot{F}_s - \dot{F}_t - \dot{D}_{re}^{(i)} = 0; \quad \dot{f}_s = \dot{f}_{s0} + \sum_{\substack{t=1 \\ t \neq s}}^K \dot{f}_{s,t}; \quad \dot{f}_t = \dot{f}_{t0} - \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq t}}^M \dot{f}_{m,t} \quad (25a,b,c)$$

여기서  $K$ 는 바리안트  $s$ 로 리오리엔테이션 중인 바리안트의 수이고  $M$ 은 바리안트  $t$ 로 리오리엔테이션 중인 바리안트의 수이다.

#### 4. 단결정의 리오리엔테이션 거동 모델링

냉각에 의해 오스테나이트가 마르텐사이트로 상변환될 때 각각 4개의 바리안트로 이루어진 6개의 그룹이 생겨 총 24개의 바리안트가 만들어진다. 각 그룹은 전체적으로 변형이 없으므로 (self-accommodated) 24개의 바리안트로 이루어진 오스테나이트도 체적변화를 제외하고는 전체적인 변형은 없다. Sabury 등의<sup>(32)</sup> 실험에 의하면 온도변화에 의해 생성된 단결정 형상기억합금의 24 마르텐사이트 바리안트에 인장하중이 작용할 때 각 그룹에서 3개의 바리안트는 그 그룹에서 작용하중에 대해 가장 안정된 바리안트로 리오리엔테이션되고 각 그룹의 최후 바리안트들은 24 바리안트 중에서 작용하중에 대해 가장 안정된 바리안트로 리오리엔테이션 되었다. 때때로 각 그룹의 최후 바리안트는 이웃 그룹의 최후 바리안트로 리오리엔테이션되었다가 최후의 바리안트로 리오리엔테이션 되는 경우도 관찰되었다. 이러한 리오리엔테이션 거동을 모델링하기 위해서 리오리엔테이션의 판별식(식 24)에서  $D_{re}^{(i)}$ 를 아래와 같이  $f_s$ 의 함수로 가정한다.

$$D_{re}^{(i)} = \pm D_{re}^0 + \lambda(f_s - f_s^{mem}) \quad (26)$$

여기서  $D_{re}^0$ 와  $\lambda$ 는 상수이고  $f_s^{mem}$ 은 작용하중이 방향을 바꾸는 순간의 바리안트  $s$ 의 볼륨비이다.  $\pm$ 의  $+$ 는 바리안트  $t$ 에서 바리안트  $s$ 로의 리오리엔테이션을 나타내고  $\pm$ 의  $-$ 는 바리안트  $s$ 에서 바리안트  $t$ 로의 리오리엔테이션을 나타낸다. 바리안트  $s$ 와  $t$ 사이의 콘시스턴스 식은 (consistence equation) 다음과 같이 표현된다.

$$\dot{Y}_{st} = g(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_t) : \dot{\Sigma} + 2 \sum_{n=1}^N \dot{f}_n W_{sn}^* - 2 \sum_{n=1}^N \dot{f}_n W_{tn}^* - \lambda \dot{f}_s = 0, \quad s \neq t \quad (27)$$

식 (25), (26) 및 (27)을 사용하여 마르텐사이트 바리안트의 리오리엔테이션 거동을 시뮬레이션한 결과는 Figs. 4, 5 와 같다.  $E=20000$  Mpa,  $\nu=0.3$  이고 나머지 파라미터의 값은 Table 1 과 같다.  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ 은 작용된 인장하중의 방향이 단결정의 세 축  $[1\ 0\ 0]$ ,  $[0\ 1\ 0]$ ,  $[0\ 0\ 1]$ 과 이루는 각이다.

Table 1 Used values of the parameters for the simulation

	$(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ in degree	$D_{re}^0$ (MJ/m <sup>3</sup> )	$\lambda$ (MJ/m <sup>3</sup> )	$a_3/a_1$	g
Fig. 4	(45,45,45)	1.0	1.0	$10^{-6}$	0.206
Fig. 5	(10,20,30)	1.0	0.5	$10^{-6}$	0.206

Fig. 4 는  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)=(45^\circ, 45^\circ, 45^\circ)$  일 때의 결과로 4.5%의 잔류 스트레인이 남는다. Fig. 5 는  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)=(10^\circ, 20^\circ, 30^\circ)$  일 때 인장하중, 압축하중 그리고 다시 인장하중을 받는 경우의 리오리엔테이션 거동이다. 인장하중에서 얻어진 최후의 바리안트는 압축하중이 작용할 때 이 하중에서 가장 안정된 바리안트로 리오리엔테이션 되었다. 스트레스-스트레인 곡선이 비대칭임을 알 수 있다.

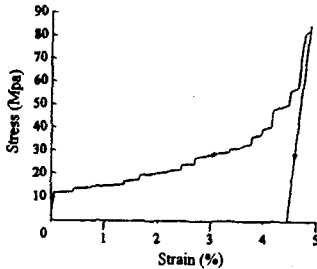


Fig. 4 Reorientation behavior of 24 martensitic variants,  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)=(45^\circ, 45^\circ, 45^\circ)$

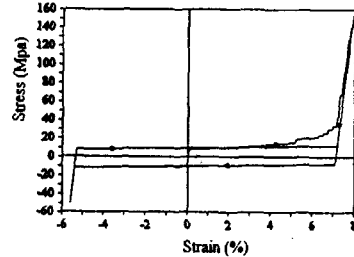


Fig. 5 Reorientation behavior of 24 martensitic variants,  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)=(10^\circ, 20^\circ, 30^\circ)$

## 5. 결론

형상기억합금의 상변환에서 마르텐사이트 바리안트의 리오리엔테이션 거동과 양방향기억효과에 대한 모델링은 아직도 해결되지 않는 많은 문제중의 하나이다. 본 연구에서는 단결정 형상기억합금의 리오리엔테이션 거동을 미시역학적인 접근으로 성공적으로 기술할 수 있었다. 오스테나이트의 냉각으로 생성된 24 개의 마르텐사이트 바리안트에 인장하중이 작용할 때 23 개의 바리안트가 24 바리안트 중에서 하중에 대해 가장 안정된 하나의 바리안트로 리오리엔테이션 되었다. 인장하중 후 하중을 제거하고 압축하중을 가할 때 인장하중에서 얻어진 최후의 바리안트는 압축하중에서 가장 안정한 바리안트로 직접 리오리엔테이션되었다.

## 참고문헌

1. Ericksen, J. L., 1975, "Equilibrium of Bars," J. of Elasticity, Vol. 5, pp. 191~201.
2. Falk, F., 1980, "Model Free Energy, Mechanics and Thermodynamics of Shape Memory Alloy," Acta metall. mater., Vol. 28, 1773~1780.
3. Niezgodka, M. and Sprekels, J., 1988, "Existence of Solutions for a Mathematical Model of Structural Phase Transitions in Shape Memory Alloys," J. Math. Methods in the Applied Sciences, Vol. 10, pp. 197~223.
4. Müller, I. and Xu, H., 1991, "On the Pseudoelastic hysteresis," Acta metall. mater., Vol. 39, pp. 263~271.
5. Abeyaratne, R. and Knowles, J. K., 1993, "A Continuum Model of a Thermoelastic Solid Capable of Undergoing Phase Transformation," J. Mech. Phys. Solids, Vol. 41, pp. 541~571.
6. Bondaryev, E. N. and Wayman, C. M., 1988, "Some Stress-Strain-Temperature Relationships for Shape

- Memory Alloys," *Metall. Trans. A*, Vol. 19A, pp. 2407~2413.
7. Graesser, E. J. and Cozzarelli, F. A., 1994, "A Proposed Three Dimensional Constitutive Model for Shape Memory Alloys," *J. Intell. mater. Systems and Structures*, Vol. 5, pp. 78~89.
  8. Raniecki, B. and Lexcellent, C., 1994, "RL-Models of Pseudoelasticity and Their Specification for Some Shape Memory Solids," *Euro. J. Mech. A/Solids*, Vol. 13, pp. 21~50.
  9. Patoor, E., Eberhardt, A. and Berveiller, M., 1987, "Potential Pseudo lastique et Plasticité de Transformation Martensitique dans les Mono et Polycristaux Martensitiques," *Acta metall. mater.*, Vol. 35, pp. 2779~2789.
  10. Sun, Q. P. and Hwang, K. C., 1993, "Micromechanics Modelling for the Constitutive Behavior of Polycrystalline Shape Memory Alloys-I. Derivation of General Relations," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 41, pp. 1~17.
  11. Sun, Q. P. and Hwang, K. C., 1993, "Micromechanics Modelling for the Constitutive Behavior of Polycrystalline Shape Memory Alloys-II. Study of the Individual Phenomena," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 41, pp. 19~33.
  12. B. C. Goo and C. Lexcellent, 1997, "Micromechanics-based modeling of two-way memory effect of a single crystalline shape-memory alloy," *Acta mater.*, 45, pp. 727~737.
  13. Leo, P. H., Shield, T. W. and Bruno, O. P., 1993, "Transient Heat Transfer Effects on the Pseudoelastic Behaviour of Shape Memory Wires," *Acta metall. mater.*, Vol. 41, pp. 2477~2485.
  14. C. Lexcellent, B. C. Goo, Q. P. Sun and J. Bernardini, 1996, "Characterization, thermomechanical behavior and micromechanics-based constitutive model of shape-memory alloys," *Acta metal. mater.* Vol. 44, No 9, pp. 3773~3780.
  15. S-J. Kim and R. Abeyaratne, 1995, "On the effect of the heat generated during a stress-induced thermoelastic phase transformation," *Cont. Mech. Thermo.*, 7, pp. 311~332.
  16. B. C. Goo and C. Lexcellent, 1996, "Modeling of polycrystalline behavior of a shape-memory alloy by a homogenization method," 19th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Kyoto, Japan, August 25-31.
  17. 日刊工業新聞社, 昭和 62, 形状記憶合金 その 使 い 方
  18. K. Kanbayashi and H. Onoda, 1993, "Development of Driving Gear Unit Using Aluminum Alloy for Gear," *Proceedings of the International Conference on Speedup Technology for Railway and Maglev Vehicles*, Number 22-26, Yokohama, Vol 1., pp. 494~499.
  19. 구병춘, 1998, "미시역학적 접근에 의한 형상기억합금의 기계적 거동 모델링," 대한기계학회 논문집 A 권, 22 권 6 호, pp. 1063~1072.
  20. S-J. Kim, 1996, "Simulation of the behavior of NiTi shape-memory alloys using a multiple nucleation criterion," *서울시립대학교 산업기술연구소*, 4, pp. 183~190.
  21. 김명순, 이승기, 나승우, 이상훈, 1997, "열처리 조건변화에 따른 형상기억 합금 스프링의 특성 변화," *전기학회논문집*, Vol. 46, No. 3, PP. 445~449.
  22. 이광호, 이승기, 1997, "형상기억합금스프링과 스테인레스 스트립을 이용한 bending 액츄에이터," *전기학회논문집*, Vol. 46, No. 12, PP. 1864~1869.
  23. 나승우, 이승기, 1998, "형상기억합금스프링을 이용한 관내주행기구의 설계 및 제작," *전기학회 논문집*, Vol. 47, No. 7, PP. 1062~1068.
  24. Wechsler, M. S., Lieberman, D. S. and Read, T. A., 1953, "On the Theory of the Formation of Martensite," *Trans. AIME*, Vol. 197, pp. 1503~1515.
  25. Eshelby, J. D., 1957, "The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems," *Proc. Roy. Soc. A*, Vol. 241, pp. 376~396.
  26. Mori, T. and Tanaka, K., 1973, "Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions," *Acta. metall. mater.*, Vol. 21, pp. 571~574.
  27. Kröner, E., 1961, "Zur plastischen Verformung des Vielkristalls," *Acta metall. mater.*, Vol. 9, pp. 155~161.
  28. Budiansky, B. and Wu, T. T., 1962, "Theoretical Prediction of Plastic Strains of Polycrystals," *Procd. 4th U.S. Nat. Cong. of Applied Mech.* pp. 1175~1185.
  29. Mura, T., 1987, *Micromechanics of defects in Solids*, 2nd ed. Martinus Nijhoff, Dordrecht, pp. 212.
  30. Lemaître, J. and Chaboche, J. C., 1985, *Mécanique des Matériaux Solids*, ed. Dunod, Paris, pp.58~69.
  31. Goo, B. C. and Lexcellent, C., 1996, "Micromechanics-based Modeling of Two-way Memory Effect of a Single Crystalline Shape-Memory Alloy," *Acta. metall. mater.* Vol. 21, pp. 727~737.
  32. Sabury, T., Wayman, K., Tanaka K and Nenno, S., 1980, "The Shape Memory Mechanism in 18R Martensitic Alloys," *Acta metall.*, Vol. 28, pp.15~32.