

컴퓨터 시뮬레이션 기법을 이용한 입계면 – 이상 입자 간 상호작용 모사 연구 동향

장근옥*

경희대학교 원자력공학과

Current Trend of Second Phase Particle-grain Boundary Interaction Research using Computer Simulations

Kunok Chang*

Department of Nuclear engineering, Kyung Hee University, Yongin-city, Republic of Korea

(Received August 6, 2020; Revised August 19, 2020; Accepted August 20, 2020)

Abstract Since the interaction between the second-phase particle and grain boundary was theoretically explained by Zener and Smith in the late 1940s, the interaction of the second-phase particle and grain boundary on the microstructure is commonly referred to as Zener pinning. It is known as one of the main mechanisms that can retard grain growth during heat treatment of metallic and ceramic polycrystalline systems. Computer simulation techniques have been applied to the study of microstructure changes since the 1980s, and accordingly, the second-phase particle-grain boundary interaction has been simulated by various simulation techniques, and further diverse developments have been made for more realistic and accurate simulations. In this study, we explore the existing development patterns and discuss future possible development directions.

Keywords: Second-phase particle, Zener pinning, Computer simulation

1. 서 론

금속이나 세라믹 다결정 물질은 그 특성 개선을 위해 통상적으로 열처리 과정을 거치게 되며 이 과정에서 입성장 (grain growth) 과정이 일어나게 된다. 통상 Hall-Petch 관계식에 의해 평균 입 크기 (grain size)가 증가할수록 금속의 강도와 같은 기계적 특성이 떨어지기 때문에 이 입 성장을 제어해야 하는 경우가 많이 있으며, 이를 위해 석출물과 같은 second-phase particle (이상 입자)를 넣는 공정을 널리 활용한다. 입계면 (grain boundary)와 이상입자 간의 상호작용은 Smith와 Zener에 의해 1940년대 후반에 그 이론적인 예측이 제시되었으며 [1], 해당연구에서는 모든 이상입자는 구형에 완전히 임의로 선택된 공간에 위치해 있으며 모든 입자의 크기는 동일하고 시간에 따라 크기가

모양이 변화하지 않는다고 가정하였다. 그러나 실제 상황에서는 판형 (plate-like) 석출물 등도 기저 상에 존재하며 [2] 또한 이상입자도 시간에 따라 그 모양이나 크기가 변화할 수 있다. 그리하여 이러한 실제적 상황을 모사하기 위해 전산모사 기법도 나날이 발전해왔으며, 본 연구에서는 여태까지의 발전 역사를 소개하고 향후 발전 방향에 대해 의논해보고자 한다.

2. 연구 현황 리뷰

2.1 시간에 따라 성장하거나 소멸하지 않는 불활성 (inert) 구형 (원형) 이상입자와 균일한 경계면 에너지 (interfacial energy) 가진 입계면 간의 상호작용

Zener의 가정에 가장 부합하는 상황으로 Monte Carlo

- 장근옥: 조교수

*Corresponding Author: Kunok Chang, TEL: +82-31-201-2782, FAX: +82-31-202-8106, E-mail: kunok.chang@khu.ac.kr

Potts model[3, 4], Finite element method(유한요소 법)[5], Phase-field method(상장모델)[6, 7] 등을 활용하여 연구가 진행되었고, 이를 통하여 Zener 예측의 유효성을 검증하는 한편 미세조직 모델링의 적용성을 검증하였다. 특히 3D에서 수행된 상장모델의 경우[6, 7] 그 확장 가능성을 보여주었고 MPI(Message-Passing Interface)와 같은 병렬 연산 기법까지 적용하여 large-scale simulation 연구의 가능성을 제시하였다[6].

2.2 시간에 따라 성장하거나 소멸하지 않는 불활성(inert) 구형(원형) 외 이상입자와 균일한 경계면 에너지(interfacial energy) 를 가진 입계면 간의 상호작용

2009년에 N. Moelans 에 의해 제시된 이상입자를 포함한 입성장 상장 모델[7]을 활용하여 2D 시스템에서 침상(needle-shaped) 이상입자에 의한 Zener pinning 효과를 평가하였으며[8] 이를 활용하여 같은 면적과 개수를 갖는 침상 이상입자가 원형 입자보다 Zener pinning에 더 효과적이며 또 정렬된 방향이 감소할수록 더 효과적이라는 사실을 발견하였다. Ryum, Nes 그리고 Hunderi[9]에 의해 타원체 이상입자에 의해 입계면에 가해지는 힘이 계산되었고 그것은 타원의 이심률에 대한 함수로 입계면과 이상입자가 수직된 각도로 만날 때에 한정해 힘을 예측하였다. 2012년에 상장 모델을 활용해 타원체 이상입자 외에도 큐빅 모양의 이상 입자에 의해 입계면에 가해지는 힘의 크기가 계산되었으며[10] 불활성 이상입자와 등방성 입계면 에너지를 갖는 입계면의 상호작용을 평가하였다. MPI 병렬 연산 기술을 적용하여 3D에서 실제 grain growth 상황에서 구형의 이상입자와 큐빅 모양의 이상입자의 Zener pinning 효과도 비교하였으며 큐빅 모양의 이상입자가 입성장을 억제하는데에 더 효과적이라는 사실을 발견하였다[11]. 또한 평균 이웃한 grain 숫자가 이상입자의 크기가 증가할수록 감소하는 추세 역시 보고 되었다[11]. 해당 상장 모델을 활용하여 판상형 이상입자 역시 시스템에 포함시킬 수 있으며, 이는 지르코늄 합금 내의 수소화물 등에서 자주 발견되는 형태다[2]. 그림 1과 2는 각각 1,000 time step과 12,000 time step에서 한방향으로 정렬된 판형 이상입자를 포함한 시스템에서 입성장에 의해 변화한 미세구조를 나타내었다.

2.3 시간에 따라 성장하거나 소멸하지 않는 불활성(inert) 구형(원형) 이상입자와 균일하지 않은 경계면 에너지(interfacial energy) 를 가진 입계면 간의 상호작용

이상입자와 기저상간의 경계면 에너지가 균일하지 않을 때에 대한 분석은 이론적으로 Li와 Eastering에 의해 수행된 바 있으며[12], 균일하지 않은 정도는 이상입자와 기저

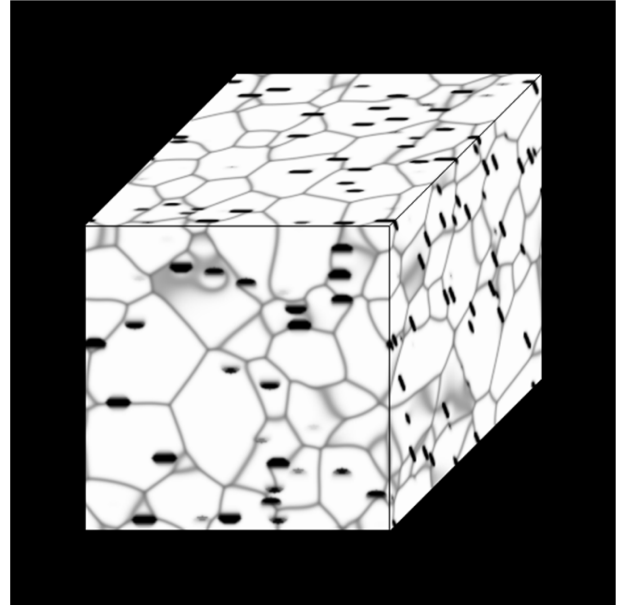


Fig. 1. The grain structure obtained by the phase-field grain growth modeling in the presence of platlet-shaped second-phase particles. The simulated cell size is $256 \times 256 \times 256$. As a result of the 1000 time step, all hydride sizes are the same, the number of particles is 100, and the volume fraction of the second-phase particles is 2.26%.

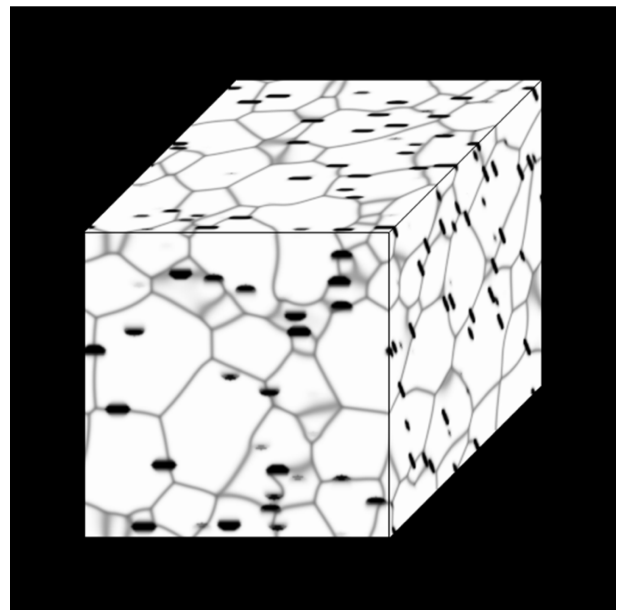


Fig. 2. The grain structure obtained by the phase-field grain growth modeling in the presence of platlet-shaped second-phase particles. The simulated cell size is $256 \times 256 \times 256$. As a result of the 12000 time step, all hydride sizes are the same, the number of particles is 100, and the volume fraction of the second-phase particles is 2.26%.

상 간의 정합성(coherency)로 표현된다. 실제 3D 입성장 시뮬레이션에서 해당 정합성 효과를 탐색해본 바 있으며

[13] 이를 통해 입성장 키네틱스에 경계면-입 간의 정합성 효과를 정량적으로 평가하였다.

2.4 시간에 따라 변화하는(evolving) 이상입자와 균일하지 않은 경계면 에너지(interfacial energy) 를 가진 입계면 간의 상호작용

이상입자들이 모양은 변화하지 않지만 입계면의 이동에 따라 이상입자가 이동하는 시스템의 경우 interaction 역시상장 모델을 통해 수행되었으며[14], 이를 통하여, 입계면 이동을 위한 driving force가 낮을 때에는 이상입자와 입계면이 붙어서 상대적으로 느린속도로 이동하지만, 이 driving force가 높아지게 되면, 입계면과 이상입자가 떨어지는 현상을 모사하였다. 이를 통하여, 입계면의 이동속도에 따라 이상입자와-입계면의 상호작용 모드가 변화한다는 사실을 확인하였으며 이를 더 정량적으로 설명할 수 있는 추가적인 연구가 필요할 것으로 판단한다.

2.5 이동하는(mobile) 이상입자와 입계면 간의 상호작용

상기연구를 통하여, 입계면의 진행속도에 따라 이상입자가 용해되는 상호작용 모드와 용해되지 않고 통과하는 상호 작용 모드에 대해 그 조건을 경계면 에너지의 비로서 탐색하는 연구가 수행되었다[15]. 이를 통하여 확인할 수 있는 것은, 이상입자와 기저상 입계면의 상호작용에는 입계면 이동속도도 중요한 요인이며 이는 바꿔 말하면 기저상의 조성 혹은 평균 입 크기 등이 이 상호작용에 중요한 요인으로 작용할 수 있다는 사실을 확인하였다.

3. 향후 전망 예측

3.1 병렬 연산 기법을 적용한 시뮬레이션 효율 증대

MPI와 OpenMP같은 CPU 병렬화를 통한 상장 모델을 활용한 시뮬레이션 효율 증대는 2000년대 중반 이후 적용된 사례가 늘어나고 있으며[6, 13, 16] 최근에는 미국의 Idaho National Lab. 중심으로 MOOSE(Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment) framework 을 활용한 상장모델을 활용한 입성장 연구가 수행 중에 있는데, 이 경우에도 효율높은 CPU 병렬화 기술이 적용된다. 최근 2010년 이후에는 CUDA와 같은 GPU를 활용한 계산효율

을 높이는 연구들이 보고되고 있으며[17-19], 최근 들어 보고되는 연구의 양이 점점 증가되고 있다. 아직 GPU의 경우는 사용할 수 있는 메모리의 크기가 제한적이라 많은 메모리를 요구하는 입성장 모델링에는 부적합 함한 면이 있으나, GPU당 코어수가 수천-수만개로 수십개 정도의 CPU보다는 압도적으로 많아 이제 GPU 병렬화를 통한 연산 효율증대는 향후 미세조직 모델링 쪽에 큰 기회를 열어줄 것이라 판단한다.

3.2 미세구조 정량화

미세구조 모델링을 수행하여 그 미세구조를 정량적으로 특성화하는 것은 재료의 특성 예측을 위해 매우 중요하다. 예를 들어, 입성장의 경우에는 입(grain) 개수와 평균 입 크기, 이웃한 입들의 개수 등 여러 평가가능한 특성 등이 있으나 입계면의 곡률이나 삼중선의 길이 등은 평가가 용이하지 않아 왔다. 시뮬레이션 상에서는 물리량들이 통상 불연속적으로 나타나게 되며, 이 상황에서 입계면의 곡률 등을 평가하고 삼중선 길이 등을 평가하기 위해 다양한 시도들이 모색되었으며[20, 21], 향후에는 더 신뢰도 있는 3D 상에서의 미세구조 특성 분석을 위한 많은 연구들이 진행될 것으로 예상되며, 이렇게 고안된 방법론은 실험적으로 평가된 미세구조를 평가하는 데에도 널리 활용될 수 있을 것으로 판단한다. 또한, 머신러닝 기법을 동원하여 평가의 신뢰성을 높일 수 있을 것으로 기대한다. 삼중선 모색을 위해서는 여러 가지 방안이 모색될 수 있으나, 일단 각 삼중선 상의 점들의 좌표를 추출한 뒤 이를 선형대수분야에서 널리 활용되는 PCA(Principal Component Analysis)[20] 방법을 통해 주성분을 추출하고 이를 바탕으로 선의 길이를 측정하는 방안이 제안된 바 있으며, 다만 이것은 직선에 대해서만 적용될 수 있는 방안이라 추가적인 고려가 필요하다.

현재까지는 기저상의 결정방위와 이상입자의 결정방위를 고려한 경계면 에너지를 평가한 사례가 극히 드물었다. 입계면 에너지 이방성의 경우에는 입계면의 5개의 자유도를 고려하여 bcc Fe의 입계면 에너지를 결정방위에 따라 분자동역학적으로 데이터베이스화해 미세구조를 예측한 연구가 이미 수행된 바 있으며[22] 이를 확장한 방법론을 이상입자와 기저상간의 계면에너지 평가에도 적용하기 위

Table 1. List of studies for interaction modes of second-phase particle - grain boundary and associated references

이상입자-입계면 상호작용 방식	참고문헌
불활성 구형(원형) 이상입자와 균일한 경계면 에너지를 가진 입계면 간의 상호작용	3,4,5,6,7
불활성 구형(원형) 외 이상입자와 균일한 경계면 에너지를 가진 입계면 간의 상호작용	7,8,9,10,11
불활성 구형(원형) 이상입자와 균일하지 않은 경계면 에너지를 가진 입계면 간의 상호작용	12,13
변화하는 이상입자와 균일하지 않은 경계면 에너지를 가진 입계면 간의 상호작용	14
이동하는 이상입자와 입계면 간의 상호작용	15

해 많은 연구가 수행중에 있다. 이러한 계면에너지와 기저상간의 경계면 에너지를 정량평가한 뒤 미세구조 평가에 입력자료로 활용된다면 훨씬 더 신뢰도 있는 주어진 실제 시스템의 미세구조 예측이 가능해질 것으로 기대하고 있다. 또한 신뢰도있는 입계면과 계면 에너지 데이터베이스를 확보할 경우 실제 측정된 집합조직을 반영한 입성장 시뮬레이션도 가능할 것으로 예상된다.

4. 결 론

여태껏 상장 모델을 중심으로 입계면과 이상입자의 상호작용을 연구해온 시뮬레이션 기법을 살펴보았다. 2000년대부터 본격적인 연구가 진행되어, 현재는 그 예측능력이 20년전에 비해 현저하게 향상되었으며, 이제는 분자동역학 등의 원자단위 모델링을 활용한 (입)계면 에너지 데이터베이스 활용, GPU 등 첨단기술을 활용한 연산 효율 증대, 다양한 미세구조 정량화 기술 개발 등을 통해 과거보다 훨씬 더 직접 활용가능한 미세구조 예측 결과를 생성해낼 수 있으며, 발전속도를 감안할 때, 향후 10년 안에 여러 상용 금속의 집합조직 반영 이상입자 포함 실제 미세구조를 예측해내는 것이 가능할 것으로 기대한다.

References

- [1] C. S. Smith: Trans. Metall. Soc. AIME, 175 (1948) 15.
- [2] S.-S. Kim, S. Lim, D.-H. Ahn, G.-G. Lee and K. Chang: Met. Mater. Int., **25** (2019) 838.
- [3] J. Gao, R. G. Thompson and B. R. Patterson: Acta Mater., **45** (1997) 3653.
- [4] M. P. Anderson, G. S. Grest, R. D. Doherty, K. Li and D. J. Srolovitz: Scr. Metall., **23** (1989) 753.
- [5] B. Kim and T. Kishi Acta Mater., **47** (1999) 2293.
- [6] Y. Suwa, Y. Saito and H. Onodera: Scr. Mater., **55** (2006) 407.
- [7] N. Moelans, B. Blanpain and W. Patrick: Acta Mater., **53** (2005) 1771.
- [8] K. Chang, W. Feng and L.-Q. Chen: Acta Mater., **57** (2009) 5229.
- [9] N. Ryun, O. Hunderi and E. Nes: Acta Metall., **33** (1985) 11.
- [10] K. Chang and L.-Q. Chen: Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., **20** (2012) 055004..
- [11] K. Chang, J. Kwon and C. Rhee: Comput. Mater. Sci., **124** (2016) 483.
- [12] W. B. Li and K. E. Easterling: Acta Metall., **38** (1990) 1045.
- [13] K. Chang, J. Kwon and C. Rhee: Comput. Mater. Sci., **142** (2018) 297.
- [14] S. Vedantam and A. Mallick: Acta Mater., **58** (2010) 272.
- [15] K. Chang and N. Moelans: Philos. Mag. Lett., **95** (2015) 202.
- [16] K. Chang and H. Chang: Results Phys., **12** (2019) 1262.
- [17] A. Yamanaka, T. Aoki, S. Ogawa and T. Takaki: J. Cryst. Growth, **318** (2011) 40.
- [18] J. Lee and K. Chang: Comput. Mater. Sci., **169** (2019) 109088.
- [19] S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta and T. Aoki: Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., **27** (2019) 1.
- [20] K. Chang, C. E. Krill, Q. Du and L.-Q. Chen: Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., **20** (2012) 1.
- [21] K. Chang and N. Moelans: Acta Mater., **64** (2014) 44.
- [22] H. Kim, S. Kim, W. Dong, I. Steinbach and B. Lee: M Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., **22** (2014) 1.