

레오로지 소재의 압축 실험 시 고상입자 거동 예측을 위한 결정립 동역학 해석

김현일*(부산대 대학원 정밀기계학과), 김우영(부산대 대학원 정밀기계학과), 강충길(부산대 기계공학부)

Analysis of grain size controlled rheology material dynamics for prediction of solid particle behavior during compression experiment

H. I. Kim(Mecha. & Prec. Eng. Dept., PNU), W. Y. Kim(Mecha. & Prec. Eng. Dept., PNU), C. G. Kang(Mecha. Eng. Sch., PNU)

ABSTRACT

It is reported that semi-solid forming process takes many advantages over the conventional forming process, such as long die life, good mechanical properties and energy saves. Rheology material has a thixotropic, pseudo-plastic and shear-thinning characteristic. Therefore, general plastic or fluid dynamic analysis is not suitable for the behavior of rheology material. So it is difficult for a numerical simulation of the rheology process to be performed because complicated processes such as the filling to include the state of the free surface and solidification in the phase transformation must be considered. Moreover, it is important to predict the deformation behavior for optimization of net shape forging process with semi-solid materials and to control liquid segregation for mechanical properties of materials. In this study, so, molecular dynamics simulation was performed for the control of liquid segregation in compression experiment as a part of study on analysis of rheology forming process.

Key Words : Compression experiment (압축 실험), Liquid segregation (액상 편석), Potential function (포텐셜 함수), Rheology materials (레오로지 소재)

기호설명

P= Inter-particle potential function

fs= Solid fraction

a1= Hamaker constant

a2= Surface potential

a3= Debye length

1. 서론

반응용 공정은 반응용 상태에서 복잡형상 부품을 성형하는 공정이다. 반응용 가공은 액상과 고상이 공존하는 상태에서 성형하므로 편석, 기공 등을 감소시킬 수 있고 변형저항이 작아 적은 하중으로도 가공한계성을 증대시킬 수가 있어 최근 새로운 가공법으로써 각광받고 있다.

레오로지 소재는 요변성과 전단을 가하면 얇아지는 특징을 가지고 있다¹. 그리고 레오로지 소재의 성형 공정 중에 고상과 액상의 분리 현상이 액상 편석이 발생하고, 액상편석에 의한 불규칙한 고상분포는 성형품에 있어 내부결함으로 작용하여 기계적 성질을 저하시킬 뿐만 아니라 성형 공정시 복잡한 유변학적인 거동을 야기시킨다. 그러므로 일반적인 소성역학이나 유체역학적인 해석은 레오로지 재료의 거동을 모사하는데 적합하지 않게 된다. 그래서 자유 표면의 상태와 상변태에서의 응고 같은 복잡한 공정들을 고려해야만 하기 때문에, 레오로지 소재의 성형 공정을 전산 모사하는 것은 어렵다.

그리고 반응용 재료는 압축성형 시 고상입자에 대한 액상 영역의 분리현상 때문에 응력-변형률 곡

선이 변형율이 증가하면 응력이 증가하는 것이 아니고 액상분리에 의한 응력감소 현상을 나타내고 있다. 위와 같은 현상은 기공결함과 불균일한 고상을 분포의 원인이 되므로 반응용 재료의 변형시 발생하는 액상분리의 방지는 성형품의 신뢰성 확보 면에서 아주 중요하다.

최근에 컴퓨터를 이용한 전산 모사에 의해 유동과 응고 과정의 정량적인 해석이 가능해졌고 고상과 액상의 미시적인 분리현상을 예측할 수 있는 레오로지 이론에 응용할 수 있게 되었다. 그래서 본 연구에서는 레오로지 소재의 성형공정해석 연구의 일환으로 압축 실험 시 액상 편석을 제어하기 위해 분자동역학^{2,3}을 이용하여 고상입자들의 거동을 예측할 수 있도록 전산 모사를 수행하였다.

2. 본론

2.1 포텐셜 함수

여기에 쓰이는 입자간 포텐셜은 콜로이드학에서 널리 사용되는 DLVO^{5,6} 모델에 기초를 두고 있다. 페어 포텐셜 P 는 다음에 주어진 것처럼, 인력 성분 P_A 과 척력 성분 P_R 의 합이다.

$$P = P_A + P_R = -\frac{a_1}{12\pi r^2} + 2\pi a_2 \text{Re xp}(-a_3 r) \quad (1)$$

여기서 a_1-3 은 상수이다. 포텐셜 함수 P 의 전형적인 그래프는 fig. 1 에 주어져 있다. 포텐셜 곡선의 형태는 조정 가능한 곡선의 모양을 결정하는 3 자유도로 주어져 있는 파라미터 a_1-a_3 에 의해 설명할 수 있다. 그러나, 반응용 입자 사이의 결합에서 대부분의 그럴 듯한 형태는 $2R$ 에 있는 P 가 최소가 되도록 요구하는 목의 형성에 의한 표면 부착이다. 그리고 f_s 와 전단력의 한 값의 모델 점도의 등급을 정하는 두 번째 자유도를 사용할 것이다. 이

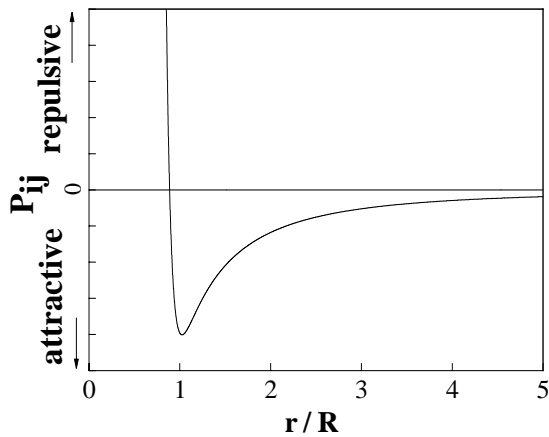


Fig. 1 Typical DLVO inter-particle potential

것은 함수 P 의 모양을 정하는 자유도를 한 개로 남게 한다. 표면 부착을 시뮬레이션 하기 위해 최소값에서 좁은 골을 형성하는 파라미터 세트를 사용해 왔다. 임의의 어떤 것을 선택 할지라도, $r=4R$ 일 때 최소한 두 번째 요소에 의해 포텐셜의 등급이 감소한다면 이 요구가 만족된다고 간주했다.

2.2 지배방정식

분자속도를 v_i , 질량중심속도를 V 로 하고 분자속도는 항상

$$\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N v_i = 0 \quad (2)$$

을 만족한다고 가정한다. 분자의 위치는 운동방정식으로 결정되는 위치에 계산 된 위치가 가산되어 정해진다. 분자의 질량중심좌표가 0 이 되는 것처럼 분자를 임의로 배치한다. y 방향의 미소영역에 분자층(layer)을 정하면, 그 영역내의 온도의 분포는 다음과 같아진다.

$$T_l = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (v_i^2)_{i \in l} \quad (3)$$

전체 입자들을 합하고, 점성력의 효과를 포함하는 입자 i 의 net force 는 다음과 같다.

$$\underline{F}_i = \sum_{i \neq j} \underline{F}_{i,j} - 6\pi R \eta \Delta v_i \quad (4)$$

여기서 Δv_i 는 중앙의 매개물과 입자 i 의 국소적인 속도 차다. 힘 F_i 이 거의 일정하다고 여길 정도로 충분히 짧은 시간 증분 δt 에 대해, 시간 $t + \delta t$ 에서 밀도 ρ 를 가지는 입자 i 의 속도와 위치는 다음에 주어진 것과 같다.

$$\underline{v}_i(t + \delta t) = \underline{v}_i(t) + \frac{3F_i}{4\pi R^3 \rho} \delta t \quad (5)$$

$$\underline{x}_i(t + \delta t) = \underline{x}_i(t) + \underline{v}_i(t) \delta t + \frac{3F_i}{8\pi R^3 \rho} \delta t^2 \quad (6)$$

입자 사이의 주된 힘은 수학적으로 표현될 수 있는 어떠한 형태로도 가능하다. 그러나, 모델은 입자간 힘이 오직 입자 거리의 함수이면은 특히 간단한 형태를 가진다. 그리고 그것은 여기서의 모델을 설명하는데 사용할 수 있는 상호작용의 형태이다. 실제로는 비록 고체 입자들 사이의 결합이 그들 모체 안에서 떨어져 있더라도 용해는 시간에 따라 두꺼워지는 목의 형성으로 될 것이다.

3. 결과 및 고찰

Table 1 에 나타나 있는 해석 조건들을 이용해서 전산 모사를 수행하여 다음과 같은 결과를 얻을 수 있었다.

Table 1 Simulation parameters

Test	1	2
T	0.5	0.3
DL	0.8	$2^{(1/6)}$
Viscosity	60	50

해석결과를 fig. 3 과 fig. 4 에 나타내었다. x 축으로 구속하지 않고 자유로이 입자가 이동할 수 있도록 경계 조건을 설정하였기 때문에 시간이 지남에 따라 입자들이 아래 쪽에서 무질서 하게 움직이는 것을 볼 수 있다. 이것은 입자 상호 작용에 의해 입자 사이가 가까울수록 큰 힘을 받게 되고, 멀어

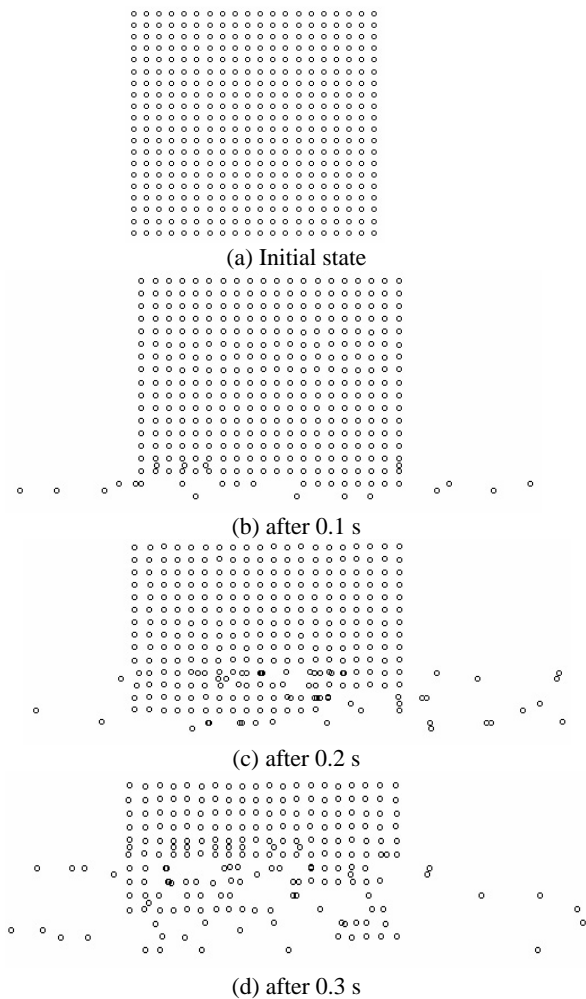


Fig. 3 Simulation result of particles behavior during compression by Test 1 parameters

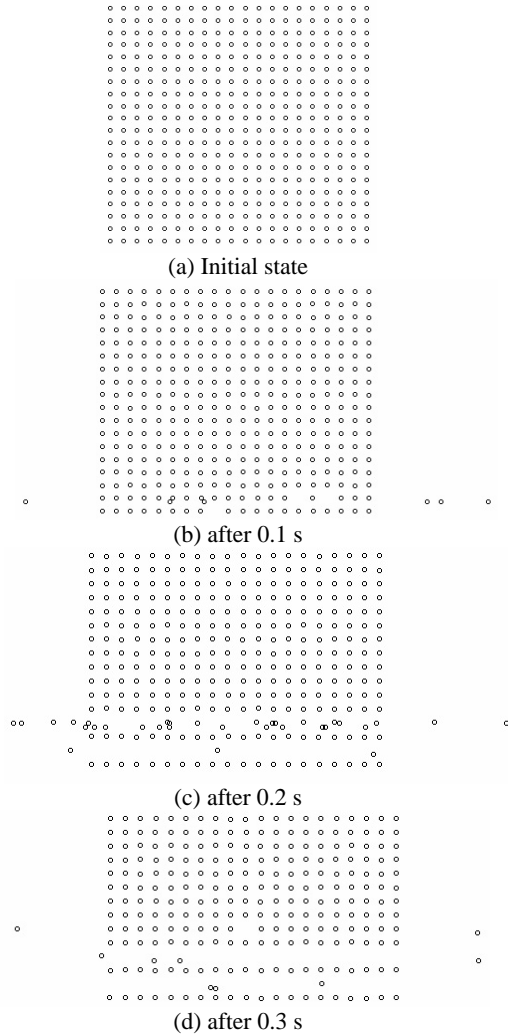


Fig. 4 Simulation result of particles behavior during compression by Test 2 parameters

지면 서로에 대해 미치는 영향이 거의 없어지기 때문에 아래 쪽에 위치한 입자들이 위쪽의 입자들이 아래로 내려오면서 밀집하게 되면서 점점 그 위치에서 벗어나게 되고 상호 작용이 미치지 않은 범위까지 벗어나게 되면 초기 속도를 가지고 계속 운동하기 때문이다. 온도가 높아 짐에 따라 점도는 낮아 지게 되어 입자 들의 거동을 방해하는 방향으로의 힘이 작아지게 된다. 따라서 fig. 3 에 나타나 있는 입자들이 fig. 4 에 나타나 있는 입자들보다 같은 상호 작용력에 의한 이동이 더 작게 된다.

다음으로 압축속도를 변화 시켜서 해석을 수행하였을 때 입자의 거동이 어떻게 나타나는지 fig. 5 에 나타내었다. Fig. 5 의 (a)에는 Test 1 의 변수들을 사용하였고, (b)에는 Test 2 의 변수들을 사용하여 속도를 1.5 배로 하여 해석을 수행하였는데 앞선 해석 결과와 비슷한 양상을 보이고 있다. 그러나 속도가

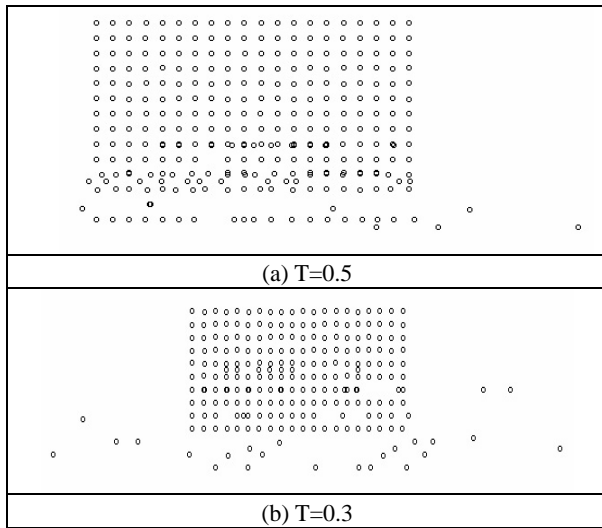


Fig. 5 Simulation result of particles behavior during compression by different velocity after 0.2 s

빨라 질수록 같은 조건에서 해석한 결과에 비해 입자들이 고른 분포를 보이는 것을 알 수 있다. 일반적으로 압축 시 속도가 빨라지면 액상 편석의 발생이 억제 되는 것으로 알려져 있다. 이번 해석을 통해서 이런 결과를 예측 할 수 있었다.

4. 요약

결정립제어 레오로지 소재의 압축 시 액상편석을 제어 하기 위한 연구의 일환으로 고상입자가 온도와 속도에 따라 어떻게 움직이는 지에 대해 분자

동력학을 이용하여 전산 모사를 수행하였다. 온도가 높아짐에 따라 입자들이 좀더 활발하게 움직이는 것을 확인 할 수 있었고, 속도가 빨라질수록 같은 시간에서의 입자들의 분포가 고르게 되는 것을 알 수 있었다. 하지만 해석을 수행 함에 있어서 좀더 정확한 결과를 얻기 위해서 변수들과 기타 작용력을 고려해야만 할 것이다.

후 기

본 연구는 과학기술부 국가지정연구소(NRL) 사업으로 진행되었습니다.

참고문헌

1. Mullis A.M, "Towards a microstructural model of semi-solid rheology" Proc. 5th Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloys & Composites, pp. 265-272, 1998
2. Yosiyuki, G, "Molecular dynamics and Monte Carlo computing simulation," Chap. 2, 1996.
3. Rapaport, D.C, "The art of molecular dynamics simulation," Cambridge university press, Chap2, 1995.
4. Derjaguin B.V, Landau L., Acta Physiochem. URSS(14), pp 633, 1941
5. Verwey E.J.W, Overbeek J.Th.G., "The theory of the stability of lyophobic colloids," Elsevier, 1948