

컴퓨터 시뮬레이션에 의한 FRP 복합재료의 도전경로 형성에 미치는 제2상의 영향

신순기*[†] · 임현주 · 이준희

*동아대학교 신소형재 가공청정 공정개발 연구센터
동아대학교 공과대학 재료금속 · 화학공학부

Effect of Second Phase on the Conduction Path Forming in Composites FRP by Computer Simulation

Soon-Gi Shin*[†], Hyun-Ju Lim and Jun-Hee Lee

*Center for Advanced Net Shape Manufacturing and Clean Processes, Dong-A University
Division of Metallurgical and Materials and Chemical Engineering, Dong-A University

(2003년 7월 24일 받음, 2003년 10월 30일 최종수정본 받음)

Abstract Two dimensional computer simulations were conducted on percolative structure in which second phases with various short diameter were arranged in matrix phase. In case of prohibiting the overlap among the second phases, the maximum area fraction of second phase arranged in matrix was increased with higher short diameter. In case of allowing the overlap among the second phases, the critical area fraction was increased with higher short diameter and the total number of distributed second phase was decreased. This results represented that thickness variation of short diameter by grain growth on the production processes affect significantly forming the completion path.

Key words simulation, composites, conduction path, second phase

1. 서 론

단일재료로는 얻을 수 없는 새로운 기능을 발현하는 복합재료가 많이 연구되어짐에 따라 그러한 재료의 미세조직과 특성, 기능발현기구 등에 많은 관심이 집중되고 있다. 또 이러한 재료의 특성평가, 물성예측, 최적조성 도출 등의 분야에 있어서 새로운 기법들이 많이 시도되고 있으며 그 대표적인 예로 컴퓨터를 이용한 시뮬레이션이 있다.¹⁾

이 방법은 실제적인 재료의 제작없이 여러 가지 조건 하에서 가상적으로 재료를 제작하여 특성을 예측할 수 있기 때문에, 제작비용을 절감할 수 있으며 단시간에 재료 특성에 미치는 각종 인자들의 영향을 최적화 할 수 있다는 장점이 있다.

절연재료의 기지에 전기전도성을 띠는 물질을 부분적으로 첨가한 복합재료에서 첨가제(제2상)의 양이 일정 이상이 되면 소위 제 2상이 이루는 percolation구조²⁾의 완전경로(completion path)³⁾가 형성됨에 따라 도전성을 띠게 된다.

이러한 도전성을 이용하면 재료가 인장 또는 굽힘 등의 하중을 받을 때 내부조직변화(크랙 등의 생성)에 의

한 손상정도를 모니터링 할 수 있다. 다시 말하여 외부에서 가해지는 하중량에 따라서 전기저항의 변화를 나타낸다면 이것은 재료 스스로가 파괴예측 기능을 가지는 지적재료⁴⁾에의 응용이 가능함을 의미한다. CaF₂와 SiC 휘스커로 이루어진 복합체,⁵⁾ 탄소분말을 이용한 CPGFRP⁶⁾ (Carbon powder Glass Fiber Reinforced Plastics)등이 좋은 예이다. 한편 이러한 재료들이 도전성을 나타내기 시작하는 제 2상의 첨가량(임계체적)은 그 형상에 크게 의존할 것이다.

최근 저자들은 제 2상의 종횡비 변화에 따른 percolation구조의 형성과정을 컴퓨터 시뮬레이션을 통하여 연구한 결과, 각각의 종횡비에 대해 도전경로를 형성시키는 임계 체적을 구할 수 있었다.⁷⁾ 그러나 실제로는 이러한 초기상태의 조건변화는 물론 입자의 우선 성장면 존재 등에 의한 제조상태에서 일어나는 인자변화에 대한 영향도 고려되어야만 할 것이다.⁸⁾ 이것은 제 2상 입자의 우선 성장면에서 일어나는 예상치 못한 성장에 의해 percolation구조의 변화가 일어날 수 있기 때문이다.

본 연구에서는 이러한 사실을 전산모사할 수 있는 기초적 자료를 얻고자 이를 간략화 하여 제 2상의 단경 변화가 percolation구조의 완전경로 형성시의 임계체적에 미치는 영향을 고찰하고자 하였다.

[†]E-Mail : e841780@mail.donga.ac.kr

2. 실험 방법

Fig. 1에는 본 연구에서 행한 컴퓨터 시뮬레이션의 작업순서와 시뮬레이션에서 채택한 기지중의 제 2상의 배치 형태를 모식적으로 나타내었다. 격자 위에 존재하는 검은 입자와 흰 부분은 각각 제 2상과 기지를 나타낸다. 제 2상이 주어진 크기와 양에 따라 기지 중에 어떻게 배열되어지는가를 시뮬레이션하게 된다. 소프트웨어는 FORTRAN으로 프로그래밍 되었으며, 하드웨어는 SUN사의 BLADE100 워크스테이션을 사용하였다.

시뮬레이션은 제 2상을 기지중에 배열시킬 때 이들 간의 overlap을 금지할 경우와 허용할 경우의 두 가지로 나누어 시행하였다. 전자의 경우는 제 2상이 기지 중에 percolation 구조를 이루지 않고 최대한 배치될 수 있는 포화 체적을 구하기 위함이며, 후자의 경우는 제 2상이 overlap 등에 의해 완전경로를 형성할 때 그것이 일정방향(본 연구에서는 x방향)으로 형성하고 있는 제 2상의 수등을 측정함으로써 이 경로 형성에 영향을 미치는 여러 변수들을 정량화하기 위함이다. 시뮬레이션을 시행하기 전에 격자의 크기를 나타내는 X, Y(본 연구에서는 각각 1000)와 격자 내에 배치시킬 제 2상의 단경(d), 종횡비(a), 제 2상의 개수(n)등을 먼저 입력한다. (여기서 단경의 단위는 격자크기에 대한 입자단경 크기의 비이므로 무차원이 된다.) 입력된 X, Y값에 의해 결정되는 격자의 크기만큼 제 2상이 분포될 영역을 준비한 다음, 배치입자의 기울기를 나타내 주는 각 θ ($0 < \theta < 180$) 및 격자 내에 배치시킬 입자의 위치좌표 x, y를 지정해 준다. 이때 x, y, θ 값들을 임의의 값으로 정하기 위한 난수발생은 혼

합동법¹⁾을 이용하였다. 이러한 과정을 거친 후, 입력한 변수에 맞고 θ 의 각으로 생성된 입자를 정해진 좌표 (x,y)에 위치시키기 전에 그 입자의 도메인이 이미 분포되어 있는 입자와 overlap이 되는지 여부를 확인한다. 만약 제 2상의 overlap을 허용하지 않는 시뮬레이션임에도 불구하고 이 입자들이 overlap이 된다면, 위치를 다시 설정하기 위해 위치설정 루틴으로 되돌아가게 된다. 제 2상의 overlap을 허용하는 조건일 경우에는 앞의 연구⁷⁾에서 설명한 대로 이러한 overlap 여부를 확인하지 않고 이어서 시뮬레이션이 진행된다. 이러한 과정은 시뮬레이션 하고자 설정된 제 2상의 수에 도달할 때까지 반복되며 끝나면 배열 결과를 그래픽으로 나타내게 된다.

배열결과를 토대로 overlap을 허용하지 않는 경우에는 입자배치 시행횟수에 대하여 최대 면적분율 값을, overlap을 허용하는 경우에는 완전경로에 기여하는 제 2상의 수와 임계체적분율 값을 구하여 각각의 단경변화에 대하여 비교하였다.

3. 실험결과 및 고찰

Fig. 2에는 기지에 제 2상을 배치할 때 서로 겹치지 않는(non-overlap) 조건하에서 장경을 40으로 하였을 경우에 대하여 단경을 5, 10, 20으로 변화시켜 시뮬레이션한 결과를 나타내었다.

이 그림으로부터 예상대로 단경이 증가할수록 제 2상의 굵기가 두꺼워짐을 확인할 수 있다. 또 겹치지 않도록 하여 격자 내에 배열되므로, 단경이 증가할수록 입자들 사이의 채워지지 않은 공간은 더 넓게 나타나며 배열되는 입자의 개수는 줄어들음을 알 수 있다

Fig. 3에는 Fig. 2와 동일한 조건하에서 장경을 100으로 증가시킨 경우에 대하여 시뮬레이션한 결과를 나타내었다.

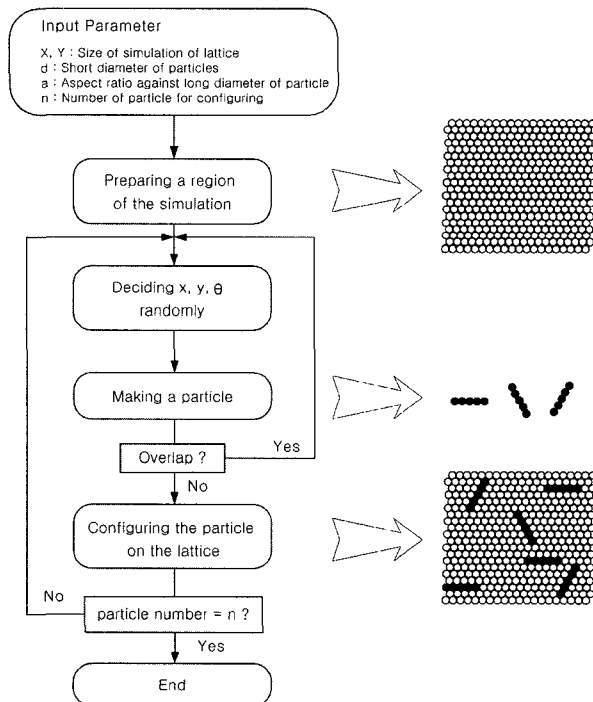


Fig. 1. Program flowchart of simulation and schematic diagram of the array two dimensional.

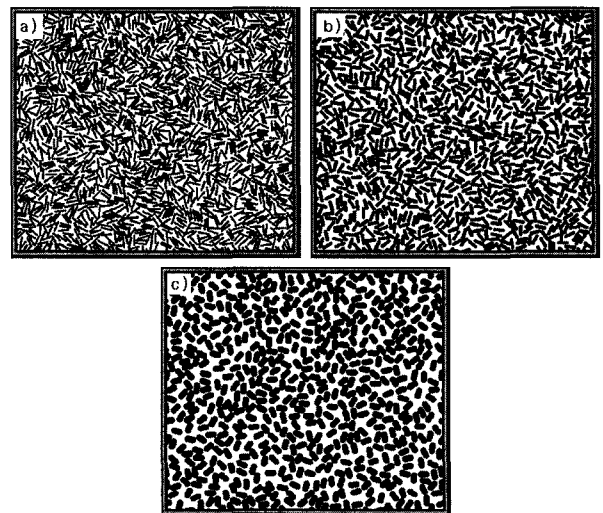


Fig. 2. Computer graphics of the simulation non-prohibiting the overlap among second phases which long diameter is 40. Short diameter of the second phase is (a) 5, (b) 10, (c) 20.

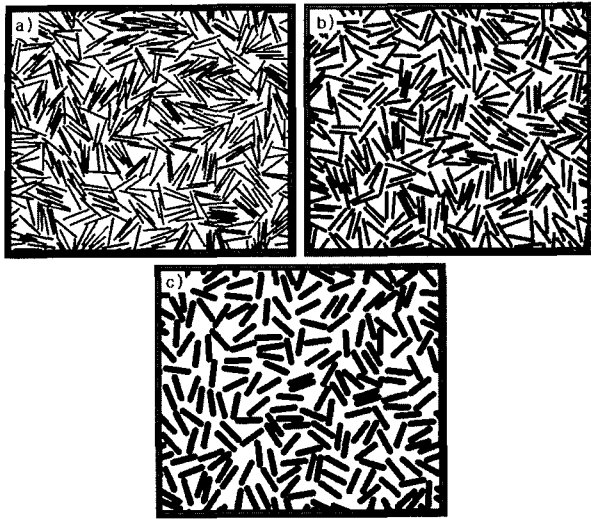


Fig. 3. Computer graphics of the simulation non-prohibiting the overlap among second phases which long diameter is 100. Short diameter of the second phase is (a) 5, (b) 10, (c) 20.

장경을 40으로 하였을 때와 마찬가지로 단경이 증가할수록 입자들 사이의 채워지지 않은 공간이 더 넓게 나타나며 배열되는 숫자는 줄어들음을 알 수 있다. 다시 말하여 이러한 결과는 장경을 일정하게 한 뒤 단경을 증가시키면 격자 내에 배치되는 제 2상의 개수가 감소된다는 것을 의미한다.

Fig. 4에는 장경을 각각 40, 60, 100으로 일정하게 한 뒤 단경을 각각 5, 10, 20으로 변화시켰을 때의 각 시뮬레이션의 시행횟수와 그 때 배치된 제 2상의 면적분율(f)과의 관계를 나타내었다. 여기서 f 는 격자전체의 면적에 대하여 제 2상이 차지하는 비율을 말한다. 그림 중의 (a)는 Fig. 2, (c)는 Fig. 3의 결과에 대응된다. 겹침을 허용하지 않는 조건이므로 제 2상의 수가 적은 배치 초기단계에는 시행횟수에 따라 면적분율이 거의 직선적으로 증가하지만, 배치가 진행될수록 기존에 배치된 제 2상과 겹치는 횟수가 많아져 재시행 횟수가 증가하므로 완만한 상승곡선으로 변화되어 어느 시점에서는 완전히 포화됨을 알 수 있다. 이를 저자들의 이전 연구결과와⁷⁾ 다른 연구자들의 결과⁹⁾를 비교해 보면 중형비가 커질수록 제 2상이 격자 내에서 차지하는 면적분율이 작아진다는 결과와 잘 일치함을 알 수가 있다. 여기서 제 2상의 단경이 면적분율에 미치는 영향을 정리해보면 장경이 40인 (a)에서 단경을 5, 10, 20으로 변화시켰을 경우, 격자 내에 제 2상을 채울 수 있는 최대 면적분율은 33.93%, 42.82%, 47.91%, 장경을 60으로 하고 단경이 각각 5, 10, 15로 변화시켰을 경우에는 30.26%, 40.41%, 46.31%, 그리고 장경을 100으로 하고 그때 단경을 5, 10, 20으로 변화시켰을 경우는 각각 25.77%, 35.58%, 40.88%를 나타내었다. 즉 단경이 증가할수록 시행횟수는 줄어들며 최대 면적분율은 조금씩 커짐을 알 수 있다. 여기서 그림 중에 표시된 시행의 중단(\times)은 시뮬

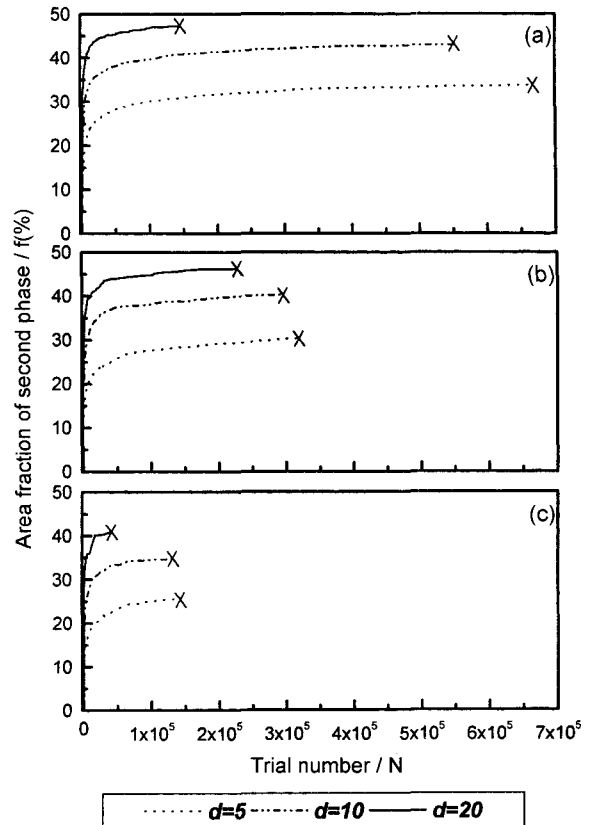


Fig. 4. Area fraction of the second phase as a function of trial number for arranging the second phase which long diameter is 40(a), 60(b), 100(c).

레이션이 진행되다가 완전한 포화상태 즉, 제 2상이 더 이상 가지 내에 배치될 수 있는 공간이 없는 상태에 이르면 사전에 지정된 n 값(가지 내에 배치되는 제 2상의 개수)에 관계없이 멈추었기 때문이다. 또 제 2상의 장경이나 단경이 클수록 상대적으로 시뮬레이션이 포화 값에 빠르게 도달함을 알 수 있다. 한편 면적분율의 증가는 입자가 클수록 입자와 입자 사이에 또 다른 입자 하나를 채울 수 있는 공간이 작아지므로 배치된 제 2상의 수는 감소하지만 입자 하나가 차지하는 면적이 크기 때문에 배치가 끝난 후의 면적분율은 크게 나타나는 것으로 사료된다.

Fig. 5에는 제 2상의 겹침을 허용하는 조건에서 장경을 40으로 일정하게 하고 단경을 각각 5, 10, 20으로 변화시킨 제 2상을 배치할 때의 시뮬레이션 결과를 나타내었다. (A)에는 격자 내에 배치된 제 2상의 전부를, (B)에는 그 때 완전경로를 형성한 제 2상들만을 분리하여 나타내었다.

이러한 결과를 이용하여 제 2상의 면적분율에 따라 배치된 전체 제 2상의 수와 그 때 완전경로를 형성하는데 기여한 제 2상 수와의 관계를 Fig. 6에 나타내었다. 그림 중에 표시된 좌표는 Fig. 5에 나타낸 바와 같이 가지 중에서 제 2상이 완전경로를 형성하기 시작할 때의 값이다.

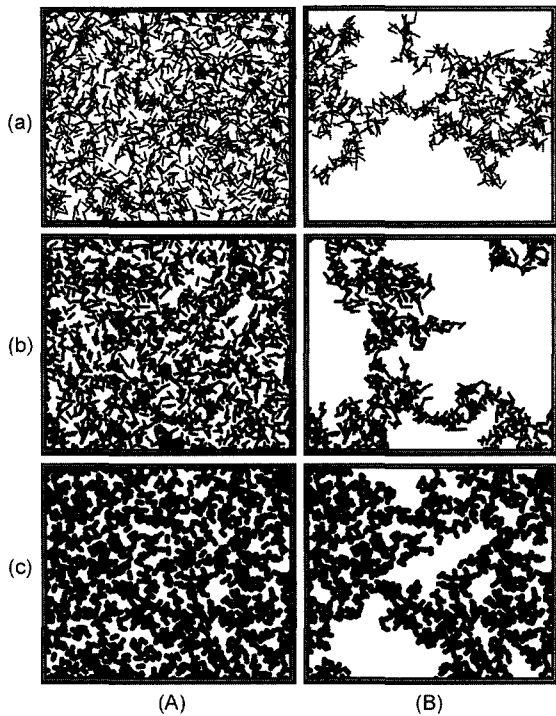


Fig. 5. Computer graphics of the simulation prohibiting the overlap among second phases with 40 long diameter. Short diameter of the second phase is (a) $d=5$ (b) $d=10$ (c) $d=20$. (A) shows all second phase arranged in the array, (B) shows the second phase forming completion path.

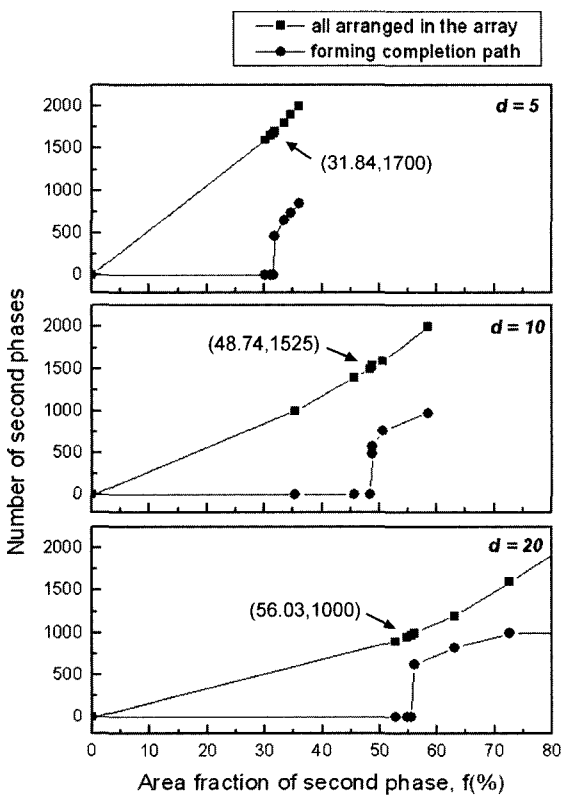


Fig. 6. Number of second phases as a function of an area fraction of the second phase arranged in the array of the second phase with 40 long diameter.

이 그림으로부터 제 2상들은 면적분율이 적을 경우 percolation 구조를 이루기는 하지만 완전경로를 형성하지 않다가 어떤 특정한 값에서 완전경로를 형성하기 시작함을 알 수 있다. 이때의 면적분율이 소위 임계면적분율¹⁰⁾ 이라고 불리어지는 값으로 본 연구에서는 각각 31.84%, 48.94%, 56.03%가 얻어졌다. 다시 말하여 Fig. 5와 Fig. 6으로부터 단경이 5에서 20으로 커짐에 따라 완전경로를 형성하는데 필요한 전체 제 2상의 수는 1700에서 1000으로 감소하지만 제 2상이 차지하는 면적은 31.84%에서 56.03%로 오히려 증가하고 있음을 알 수 있다. 이 결과는 단경이 증가할수록 완전경로를 형성하는데 더 많은 양의 제 2상이 필요하다는 것을 의미한다.

Fig. 7에는 Fig. 5와 동일조건 하에서 장경이 100일 경우에 대하여 시뮬레이션한 결과를 나타내었다. Fig. 5에 비하여 제 2상의 수가 상당히 적음을 알 수 있다. Fig. 6과 동일한 방법으로 정리한 결과를 Fig. 8에 나타내었다. 이들 결과로부터 배열시키는 제 2상의 수를 증가시키면 어떤 시점부터 완전경로를 형성하며 그 이상으로 첨가량을 늘이면 Fig. 6과는 달리 거의 모두가 완전경로 형성에 참여함을 알 수 있다. 이 때의 임계면적분율은 각각 18.09%, 29.50%, 48.21%의 값을 나타내었다.

Fig. 9에는 제 2상의 겹침을 허용하는 경우의, 각각의 장경에 대하여 단경의 변화에 따른 임계면적분율값을 나타내었다. 제 2상의 단경이 증가할수록 완전경로를 형성

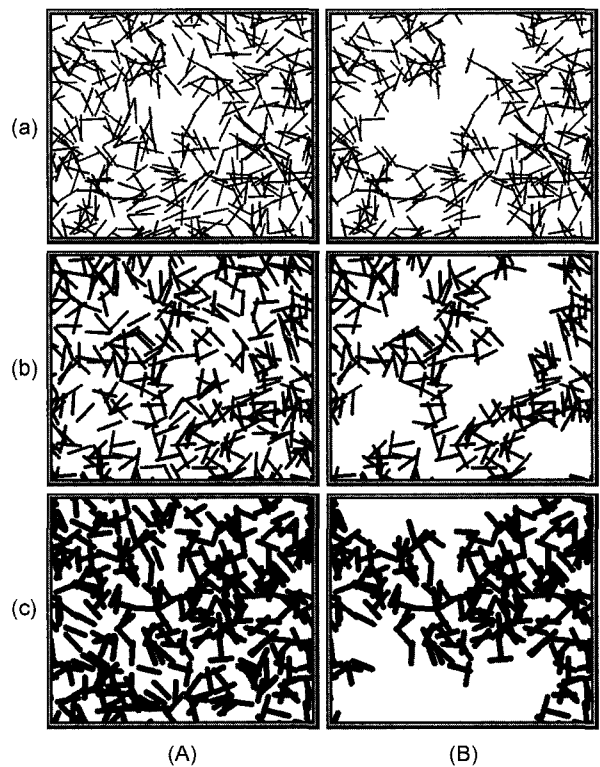


Fig. 7. Computer graphics of the simulation prohibiting the overlap among second phases with 100 long diameter. Short diameter of the second phase is (a) $d=5$ (b) $d=10$ (c) $d=20$. (A) shows all second phase arranged in the array, (B) shows the second phase forming completion path.

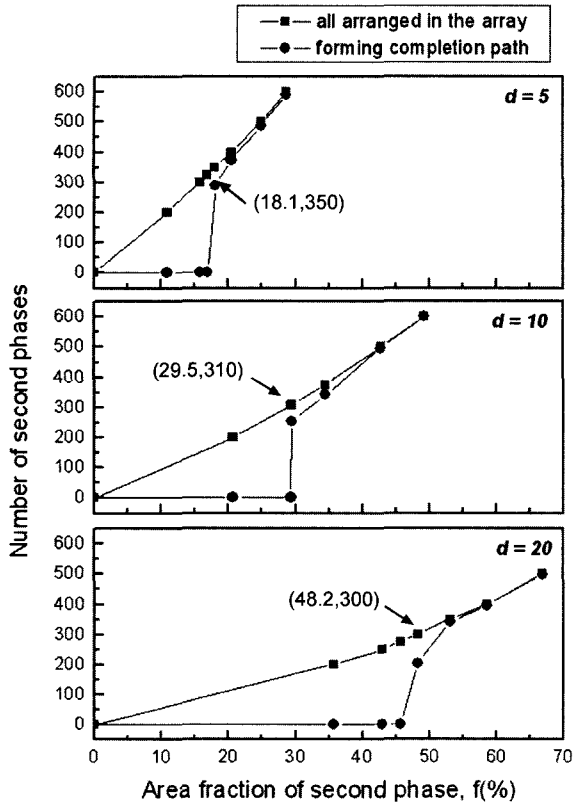


Fig. 8. Number of second phases as a function of an area fraction of the second phase arranged in the array of the second phase with 100 long diameter of second phase.

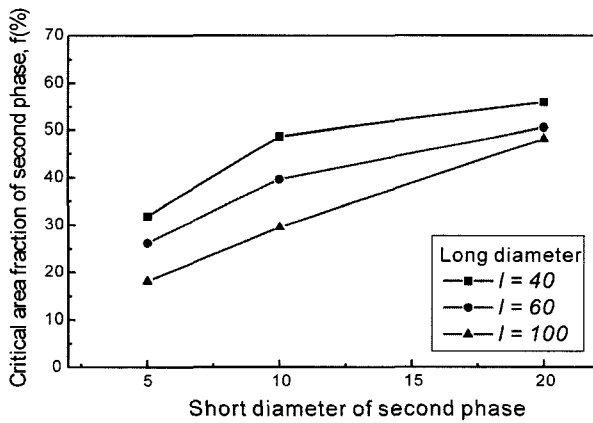


Fig. 9. Relation critical area fraction of the second phase and short diameter of second phase in the simulation allowing the overlap among second phases.

하는 임계면적분율의 값은 증가하고 있음을 볼 수 있다. 여기서 단경이 증가함에 따라 임계면적분율을 나타낼 때, 전체 제 2상의 수가 감소함에도 불구하고 임계면적

분율이 증가하는 것은 겹침을 허용하지 않을 경우에서 살펴보았던 것처럼 배치되는 제 2상 하나하나가 차지하는 면적이 크기 때문이라고 사료된다. 이러한 단경의 변화에 대한 임계체적분율의 변화는 종횡비가 커질수록 임계체적분율 값은 줄어들고 배치된 제 2상의 총수 역시 줄어든다는 앞의 연구결과⁷⁾와 비교해 볼 때 매우 흥미로운 사실이다.

4. 결 론

절연성 재료를 제1상(기지)으로, 도전성 입자를 제 2상으로 하여 제조한 복합재료를 상정하여 도전성의 척도가 되는 완전경로 형성에 미치는 제 2상의 단경의 영향을 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 알아보았다. 제 2상의 겹침을 허용하지 않았을 때 장경이 40, 60, 100일 경우에 대해 각각 단경을 증가시키면 최대 채울 수 있는 제 2상의 면적분율은 증가하였다. 제 2상의 겹침을 허용하는 경우에는 단경이 증가할수록 임계체적분율 값은 증가하였으며 그 때 배치된 제 2상의 총수는 감소하였다. 이러한 결과는 제조과정에서 일어나는 입자성장 등에 의한 제 2상의 두께변화는 이 재료의 도전경로 형성에 큰 영향을 미친다는 것을 의미한다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단(kosef) 지정 신소형재 가공청정 공정개발 연구센터(R12-2002-058-01003-0) 지원으로 수행되었음.

참 고 문 헌

1. Y. H. Lee and D. K. Back, Kyungmunsa, System Simulation, 242 (1998).
2. S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys., **45**, 574 (1974).
3. T. Owada, Percolation Science, Syowado (1997).
4. N. Muto, H. Yanagida, T. Nakatsuji, M. Sugita, Y. Ohatsuka and Y. Ari, J. Am. Ceram. Soc., **101**, 860 (1993).
5. A. Ishida, M. Miyayama and H. Yanagida, J. Am. Ceram. Soc., **77**, 1057 (1994).
6. Y. Okuhara S. G. Shin H. Matsubara and H. Yanagida, Transactions of the Materials Research Society of Japan, **25**, 2 (2000).
7. S. G. Shin, Y. S. Lee and J. H. Lee, J. Mater. Res., **11**(11), 929 (2001).
8. Y. Okamoto, N. Hirosaki and H. Matsubara, J. of the Ceramic Society of Japan, **107**(2), 109 (1999).
9. A. Ishida, H. Matsubara and K. Furukawa, J. of the Ceramic Society of Japan, **103**(10), 996 (1995).
10. I. Balberg and N. Binenbaum, Phys. Rev. B, **28**(7), 3799 (1983).