

컴퓨터시뮬레이션을 이용한 복합재료의 percolation구조인자의 정량화

Quantification of percolation structure factor in composites using computer simulation

동아대학교 임현주, 신순기, 이준희

1. 서론

복합재료의 미세조직과 특성, 기능 등을 컴퓨터를 이용하여 평가·설계하는 방법은 새로운 기능의 발현을 목표로 하는 재료의 연구개발에 중요한 지원기술로 기대되고 있다. 절연성재료를 제1상으로, 도전성 재료를 제2상으로 하여 제조된 복합재료의 전기적 특성은 재료내에 첨가된 제2상의 형상과 그 양에 크게 의존한다. 본 연구에서는 2차원 컴퓨터 시뮬레이션 시 기지로 상정한 계산 영역에 다양한 크기의 제2상을 임의로 배치하는 방법으로, 복합재료 내의 percolation구조형성인자의 영향을 정량적으로 구하였다.

2. 실험방법

본 시뮬레이션에는 포트란을 이용하였다. 먼저 X, Y(이차원 격자의 크기), n(배치시킬 제2상의 개수), d(제2상의 단경), a(제2상의 종횡비), 제2상의 위치(x,y), 각도 θ 를 지정해 준다. 이때 위치와 각도는 난수발생법으로 임의값으로 발생시킨다. 시뮬레이션은 제2상이 겹침을 허용하지 않는 경우와 허용하는 두가지 경우로 나누어 수행하였다.

3. 실험결과

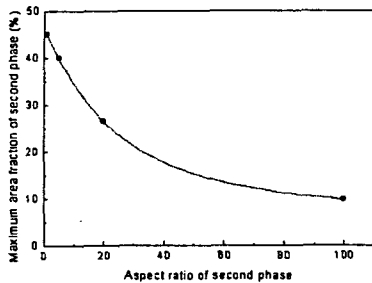


Fig. 1 Relation aspect ratio of second phase to maximum area fraction of second phase

Fig. 1에는 배치된 제2상간의 겹침을 금지하는 조건하에서 시뮬레이션하였을 경우에 있어서 제2상의 종횡비에 따른 포화시의 최대 배치량의 변화를 그래프로 나타내었다. 종횡비가 증가함에 따라 배치 가능량은 대수적으로 감소함을 알 수 있다. 이와같은 겹침을 금하는 조건하에서의 배치계산은 계산영역에서 percolation구조가 형성되지 않는 제2상의 최대 배치량을 산출해 준다. 다시 말해, 이것은 최대 배치량보다 조금이라도 배치량이 증가하면, 제2상이 부분적으로 겹쳐지면서 percolation구조가 형성되기 시작한다는 것을 의미한다. 따라서 제2상의 종횡비를 크게 하면 보다 적은 배치량으로 percolation구조의 형성이 가능하다는 것을 정성적으로 구한 것으로 해석되

어진다.

Fig. 2는 각각의 종횡비에 대해 제2상을 계산 영역 내에 배치하였을 때 면적분율의 함수로서 제2상의 완전경로 형성 여부를 나타낸 것이다. 격자상에 배열된 제2상의 수는 면적분율이 증가함에 따라 거의 직선적으로 증가하며, 종횡비가 클수록 적다는 것을 잘 나타내 준다. 제2상의 임계체적은 종횡비 1, 5, 20, 100의 경우대하여 각각 59%, 43%, 19%, 4%로 나타났다.

이로써 제2상의 종횡비가 클수록 적은 첨가량으로 완전경로를 형성시킬수 있음을 알 수 있다. 이러한 결과는 절연체 기지에 부분적으로 첨가된 제2상의 도전경로를 결정짓는 percolation구조를 설계하는데 유용하게 응용될 수 있다.

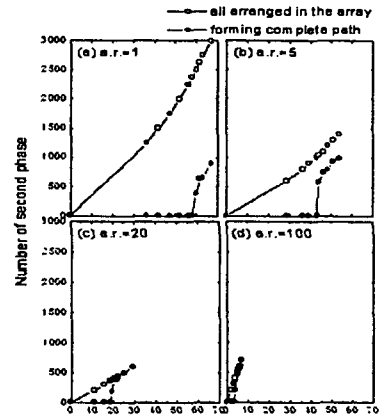


Fig. 2 Number of second phases as a function of an area fraction of second phase