결정립제어 레오로지 소재의 입자유동 해석

김현일*(부산대 대학원 정밀기계공학과), 강충길(부산대 기계공학부)

Particle Flow Analysis of Grain-Size Controlled Rheology Materials

H. I. Kim(Prec. Mecha. Eng. Dept, PNU), C. G. Kang(School of Mecha. Eng ., PNU)

ABSTRACT

A rheology casting technology has some advantages compared with conventional forming processes such as die casting, squeeze casting and hot/cold forming. The liquid segregation is important on mechanical properties of materials using rheology casting. In this study, so, molecular dynamics simulations were performed for the control of liquid segregation. Because the dynamics of fluid flow about nano-scaled materials is completely different from continuum, molecular dynamics simulations were used. The behavior of particles was far from the truth according to boundary conditions in simple flow. But various movement of particles appear at two or more molecular simulations.

Key Words : Grain-Size Control(결정립제어), Rheology Materials(레오로지 소재), Liquid Segregation(액상편석), Molecular Dynamics(분자 동력학)

1. 서론

결정립제어 레오로지 소재는 자동차, 항공기 등의 수송 수단의 고성능화 및 경량화 추세에 발맞추어 비약적인 발전을 하여 왔으며, 특히 최근에는 에너지 절약 및 환경보존이라는 새로운 시대적 요구에 부응하기 위해 고품질, 고기능의 소재 개발, 소재에 대한 기초연구와 성형공정에 관한 연구가 국내·외적으로 매우 다양하게 전개되어 오고 있다. 레오로지 소재의 해석은 기본적으로 액상과 고상을 분리하여 지배방정식을 만들어서 고상과 액상의 유동을 각각 해석하여 비교할 수 있는 장점이 있다. 즉 거시적인 고상과 액상의 분리현상 같은 재료의 성형공정 해석 시 재료의 특성을 파악할 수 있다는 장점이 있다. 레오로지 성형 시 발생하는 고액분리 현상(액상편석)은 기공발생과 불균일한 고상율 분포의 원인이 되어 제품의 기계적 성질을 저하시킨다. 따라서 액상편석의 방지는 성형품의 신뢰성 확보면에서 매우 중요하다.

이러한 액상편석을 방지하기 위해서는 결정립제어 레오로지 소재의 성형공정 시 액상과 고상입자의 거동에 대한 제어가 중요하므로, 입자의 거동에 대한 해석이 필요하다. 일반적인 유동 현상에서 해석을 하는 경우에 사용되어지는 유체역학은 연속체의 개념을 적용한다. 연속체에서는 유체를 구성하고 있는 원자 혹은 분자구조 등이 무시되고, 점도 또는 밀도, 그 외 거시적인 물성치 등에 의해 유동의 해석이 이루어진다 [1]. 그러나 레오로지 소재의 고상입자에 대한 유동을 해석하는 경우에는 각각의 입자들에 대해 위치와 속도, 에너지 등이 결정되어야 하기 때문에 입자들간의 상호 작용을 고려하여야만 해석이 가능해진다. 이러한 입자의 유동을 해석하기 위해 분자 동력학을 이용한다. 분자 동력학의 기본적인 개념은 포텐셜 함수를 이용하여 계를 구성하는 각 입자에 작용하는 힘을 계산하고 그에 따른 운동방정식을 반복적으로 풀어서 각각의 속도와 위치를 계산하는 것이다. 매 순간에 계를 구성하고 있는 입자에 작용하는 힘을 포텐셜 함수 [1] 에 의해 결정하고 속도와 위치의 변화를 계산한다. 이렇게 얻어진 입자의 새로운 위치에 대해 앞의 과정을 반복하면 계를 구성하는 모든 입자들의 시간에 따른 움직임을 계산할 수 있다. 이와 같은 방법을 이용하여 레오로지 소재의 성형공정 시 입자 사이의 상호 작용을 수치적으로 계산하여 모사함으로

써 입자의 유동 해석과 그에 따른 입자의 거동을 예측할 수 있다.

레오로지 소재의 성형 시 액상편석을 방지하기 위한 연구의 일환으로 고상입자가 단순히 선단 흐름을 타고 움직일 때 발생하는 점성현상에 대해 살펴보고, 2-분자 운동 및 다-분자 운동 모사 방법을 이용하여 입자의 거동에 대해 알아보고자 하였다.

2. 본론

2.1 유체 점성 유동

분자집합이 전체로서 운동하는 유체운동은, 분자운동의 미시성과 거시성을 결합하는 중요한 현상인데, 레이놀즈 수가 큰 흐름에서는 점성효과가 적어지는 분자운동의 미시성이 나타나는 것을 이해하지 않고, 그 결함을 해석하는 것은 어렵다. 이 현상을 이해하는 데에는 충분히 큰 분자계와 평균과정이 필요한데, 여기에서는 단순히 분자가 선단 흐름을 타고 움직일 때, 어떤 식으로 점성현상이 생기는가를 생각해본다. 아래에 분자운동의 지배방정식과 흐름의 조건에 대해 진술한다.

본 연구에서는 레나드존스 포텐셜[2]을 사용하였다. 레나드존스 포텐셜은 반데르 발스력에 의해 결합되어 있는 분자들을 해석하는데 널리 사용되고, 기본 포텐셜 식은 다음과 같다.

$$\Phi(r_{ij}) = 4\varepsilon\{(\frac{\sigma}{r_{ij}})^{12} - (\frac{\sigma}{r_{ij}})^{6}\} \quad r_{ij} \le r_c$$

$$\Phi(r_{ij}) = 0 \quad (r_{ij} > r_c) \qquad (1)$$

여기서 Φ 는 포텐셜 함수, r_{ij} 는 임의의 분자 i 와 j 사이의 거리이고, r_c 는 임계거리를 나타낸다. 어느 정도 분자간의 거리가 멀어지면 포텐셜 에너지 값은 영(zero)으로 수렴하기 때문에 분자간의 힘을 계산할 때 임계거리까지만 계산을 해도 오차는 크지 않은 것으로 알려져 있다[3]. σ 와 ε 은 재료 상수인데, σ 는 Φ=0 이 되는 두 원자 사이의 거리이며 ε 은 평형상태에 있는 두 원자간의 결합 에너지, 즉 최소 에너지 값을 나타낸다.

분자속도를 v_i, 질량중심속도를 V 로 하고 분자속도는 항상

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

을 만족한다고 가정한다. 분자의 위치는 운동방정식으로 결정되는 위치에 계산 되어진 위치가 가산되어 정해진다. 여기서 질량중심속도 V 의 같지 않은 성질이 분자운동에 의해 어떻게 같아지는가가 점성 효과인데, 여기에서는 역으로 이러한 같지 않은 성질을 보전하는 데에는 어떤 분자운동이 되는가를 본다. 즉 V 는 y 방향으로 직선적인 분포를 가정한다(V=(α y, 0)). 이때, 유체역학적인 점성계수 μ 는 선단응력 τ 에 대해

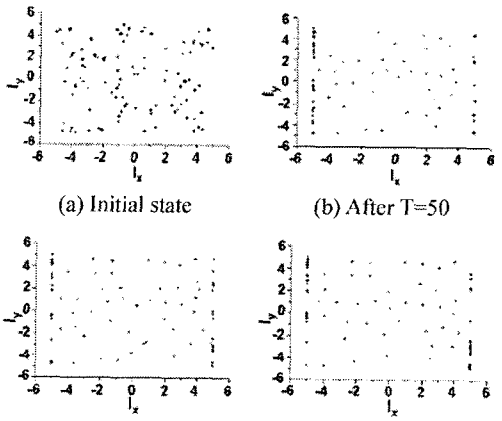
$$\tau_{xy} = -\frac{\partial V_x}{\partial x_y} = \alpha \qquad (3)$$

로 정의된다.

유출구에서 흘러나가는 분자는 유입구에서 재유입한다. 그리고 분자의 질량중심좌표가 0 이 되는 것처럼 분자를 임의로 배치한다. y 방향의 미소영역에 분자층(layer)을 정하면, 그 영역내의 온도의 분포는 다음과 같아진다.

$$T_l = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}(v_i^2)_{i\in l} \qquad (4)$$

위와 같은 조건들을 이용해서 전산 모사를 수행하여 다음과 같은 결과를 얻을 수 있었다.



(a) Initial state (b) After T=50

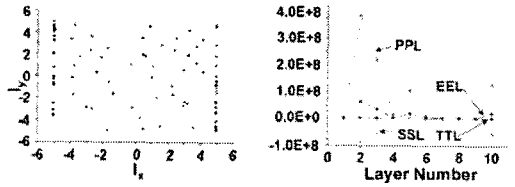
(c) After T=200 (d) After T=500

Fig. 1 Simulation result of particles at T_r=1.0

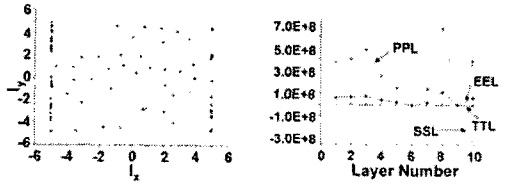
Fig. 1 에 무차원온도 T_r=1.0 인 경우 시간에 따른 입자들의 분포가 어떤 형태로 변하는지에 대해 나타내었다. 시간 T=100 은 실제로 1 초를 의미하며 처음의 분포에서 시간이 흐를수록 유출구와 유입구에 입자들이 모이는 것을 확인할 수 있다.

선단흐름에서의 경계조건 설정 과정에서 유출구에서 흘러나가는 분자는 유입구에서 재유입함을 가정하였다. 이로 인해 분자의 시간의 흐름에 따른 위치의 변화를 고려해 볼 때 실제 현상에 비해 큰 오류가 발생할 것임을 예상할 수 있었고, 결과에서 분자계 내에 존재할 수 있는 분자들에 대해 상대적으로 경계면에 존재하는 분자들의 수가 월등히 많음을 확인할 수 있다. 이런 오류로 인해 fig. 2 에 나타나 있는 무차원온도가 0.5, 1.0, 1.5 일 때 1 초가 지난 후 실제적인 선단응력(SSL)을 비롯한 에너지(EEL), 압력(PPL), 온도(TTL) 등의 물성치를 각 Layer number 에 대해 구한 값 또한 정확하다고 볼 수는 없을 것이다.

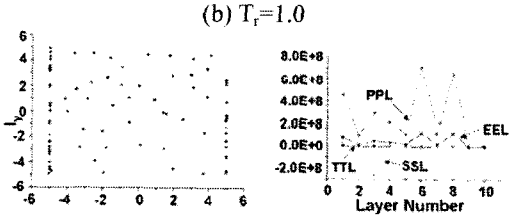
보다 정확한 해석을 위해 경계조건에 대한 보다 현실적인 대안을 제시하고 이를 통하여 분자들의 거동에 대한 정확한 예측을 할 수 있도록 연구가 필요하다.



(a) T_r=0.5



(b) T_r=1.0



(c) T_r=1.5

Fig. 2 Position and shear stress, energy, pressure, temperature at T_r=0.5, 1.0, 1.5 and T=100

2.2 2-분자 운동

다음으로 두개의 분자(질량 m_1, m_2)가 초기위치 $(x_{1,0}, y_{1,0})$ $(x_{2,0}, y_{2,0})$, 초기속도 $(v_{1,0}, \Theta_{1,0})$ $(v_{2,0}, \Theta_{2,0})$로 표현 될 때의 분자운동에 대해 생각해본다. 외력이 작용하지 않는다고 가정하므로 질량중심 x_0 및 그 속도 v_0 는 일정하게 되고, 이 질량중심위치 및 질량중심속도를 원점으로 취해서 $x\text{-}x_0 \rightarrow x$, $v\text{-}v_0 \rightarrow v$ 로 한다. 초기 절대 속도는

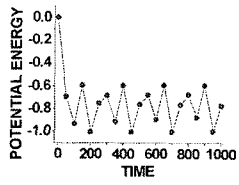
$$v_{1,0} = \sqrt{2T_{1,0}}(\cos\theta_{1,0}, \sin\theta_{1,0})$$

$$v_{2,0} = \sqrt{2T_{2,0}\frac{m_1}{m_2}}(\cos\theta_{1,0}, \sin\theta_{1,0}) \qquad (5)$$

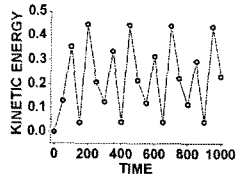
질량중심속도는

$$v_0 = \frac{v_{1,0} + (m_2/m_1)v_{2,0}}{1 + (m_2/m_1)} \qquad (6)$$

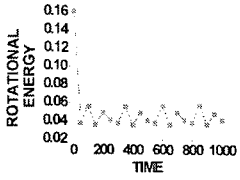
로 한다. 이와 같은 조건을 이용해서 2-분자 운동에 대해 0.5 초 간격으로 계산하여 위치에너지, 운동에너지, 병진에너지, 회전에너지, 진동에너지 값 및 각각의 그래프를 얻을 수 있었다(Fig. 3). 두 분자의 질량과 상대좌표, 온도, 속도방향에 대해서 서로 근접함에 따라 상대적으로 변하는 에너지의 값을 얻을 수 있었다. T=50 간격으로 결과값을 얻었다. 분자 1 과 분자 2 가 떨어져있는 가운데 서로 0 도 및 180 도 방향으로 상대운동(분자 1 은 +X 방향 분자 2 는 -X 방향으로 이동)으로 서로 가까워짐에 따라 발생하는 분자간의 인력으로 인한 에너지의 변화를 전산모사를 통해 얻을 수 있다.



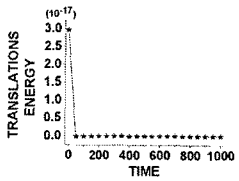
(a) Potential energy



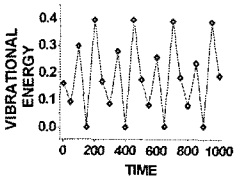
(b) Kinetic energy



(c) Rotational energy



(d) Translations energy



(e) Vibrational energy

Fig. 3 Various energy of particles after simulation

2.3 다-분자 운동

다음으로 분자운동의 기본적인 것 중 하나인 한 개의 분자와 다수 분자와의 상호작용에 의한 운동이다. 그 중에서도 하나의 분자(질량 m_m)와 다수 분자(클러스터, 질량 m_c 의 분자 N 개)의 운동에서 초기온도가 각각 T_{m0}, T_{c0} 일 때 임자의 운동에 대해 알아본다. 다-분자 운동에서 초기 위치는 2-분자운동과 같이 하였다. 초기 속도를 규정하기 위해서 충돌 분자 속도는 아래와 같이 하였다.

$$v_m = \sqrt{\frac{wT_{m0}}{m_m}}(\cos\theta_{m0}, \sin\theta_{m0}) \qquad (7)$$

분자집단속도 v_{ci} 는 분자집단 온도가 T_{c0} 인 조건

$$\sum_{i=1}^{N} v_{ci}^2 = 2NT_{c0} \qquad (8)$$

와 분자계 전체의 질량중심속도가 0 이 되는 조건을 만족하도록 하기 위해서, 평균값이 거의 $\sqrt{2NT_{ci}}$ 가 되는 속도 V_{ci} 를 가정한다. 2-분자 운동과 동일하게 총 모사시간 T=1000 이고, 실제시간은 10 초.

즉 T=100 은 1 초를 의미한다.

전산 모사 한 결과 하나의 분자가 10 개의 분자 집단(크러스트)으로 이동함에 따라 충돌 분자와 분자집단의 좌표 및 속도, 에너지(운동, 위치)의 변화 값을 얻을 수 있다.

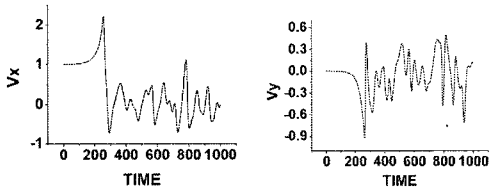
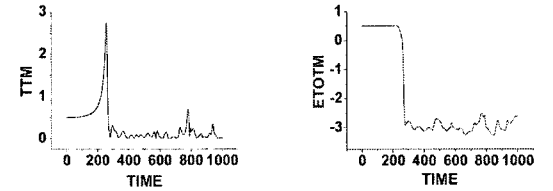
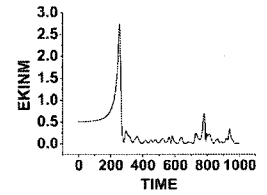


Fig. 4 Velocity of impinging particle on x and y direction

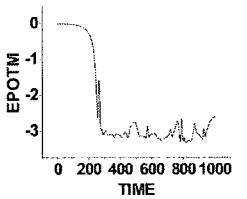


(a) Temperature of particle

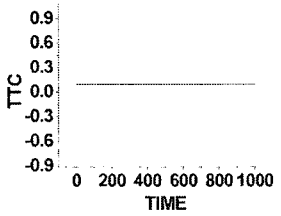
(b) Total energy of particle



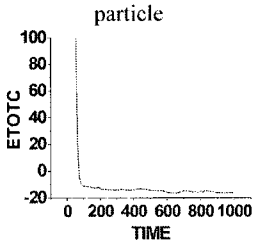
(c) Kinetic energy of particle



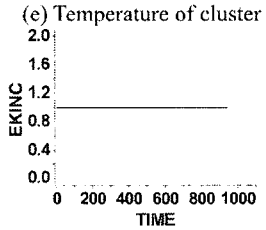
(d) Potential energy of particle



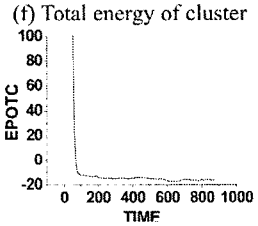
(e) Temperature of cluster



(f) Total energy of cluster



(g) Kinetic energy of cluster



(h) Potential energy of cluster

Fig. 5 Temperature and potential, kinetic, total energy of impinging particle and cluster

한 분자와 다른 분자집단(클러스트)의 속도분포 및 시간에 대한 한 분자 및 분자집단의 온도 에너지변화는 그래프로 1 초 간격으로 도시하였다(Fig. 4, Fig. 5). 계산식에서 포텐셜 함수를 레나드존스 포텐셜로 하여 모두 1 로 두고 계산하였다. 분자집단의 운동에너지는 시간에 무관하게 일정(10 개의 분자를 하나의 집단으로 가정 에너지 보존법칙에 의해서) 하지만, 충돌 분자의 경우 시간에 따라 변함을 알 수 있다.

총 에너지(ETOTM, ETOTC)는 운동에너지와 위치에너지의 합이며 위의 그래프로도 그 결과가 일치함을 알 수 있다. 그리고 충돌 분자의 경우 분자집단으로 근접하다가 분자간의 인력 및 반발력에 의해 다시 밀려나는 거동을 좌표의 변화로도 알 수 있다.

3. 결론

결정립제어 레오로지 소재의 유동 해석을 위한 연구의 일환으로 고상입자가 단순히 선단흐름을 타고 움직일 때 발생하는 점성효과와 2-분자 및 다-분자의 경우 입자가 어떤 거동을 보이는지에 대해 분자동력학을 이용하여 전산 모사하였다. 점성 유체 유동의 경우 무차원온도에 따라 여러 값들이 변하는 것을 확인 할 수 있었지만, 경계조건을 좀더 현실적으로 보완할 필요가 있다. 2-분자의 운동에서는 분자간 위치, 운동, 병진, 회전, 진동 에너지를 구할 수 있었다. 마지막으로 다-분자 운동의 경우 충돌분자가 분자집단과의 분자간 인력 및 척력에 의해 다양한 운동을 하는 것을 알 수 있었다.

후 기

본 연구는 과학기술부 국가지정연구실(NRL) 사업으로 진행되었습니다.

참고문헌

1. Yosiyuki, G, "Molecular dynamics and Monte Carlo computing simulation," Chap. 2, 1996.
2. 우영석, 이우일, "탄소나노튜브 내 유체유동의 분자동역학 모사," 한국소성가공학회 추계학술대회 논문집, pp. 347-354, 2003.
3. Lennard-Jones, "The determination of molecular fields. I. From the variation of the viscosity of a segregated grain boundaries of iron," Proc. Ray. Soc., Vol. 144, pp. 441-462, 1924.
4. Rapaport, D.C, "The art of molecular dynamics simulation," Cambridge university press, Chap2, 1995.