

레오로지 소재의 고상입자 거동 예측을 위한 결정립 동력학 해석

김현일*(부산대 대학원 정밀기계공학과), 강충길(부산대 기계공학부)

Analysis of Grain Size Controlled Rheology Materials Dynamics for Prediction of Solid Particles Behavior

H. I. Kim(Mecha. Eng. Dept. PNU), C. G. Kang(Mechanical Eng. Dept., 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 : Rheology Materials (레오로지 소재), Liquid Segregation (액상편석), Potential Function*(포텐셜 함수), Molecular Dynamics (분자 동력학)

1. 서론

결정립 제어 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 거시적으로 고상과 액상의 분리현상 같은 재료의 성형공정 해석 시 재료의 특성을 파악할 수 있다는 장점이 있다. 그러나 반응용 소재의 성형공정 해석은 유변성과 전단력이 가해지면 얇아지는 성질 때문에 매우 복잡하다. 이러한 복잡성은 반응용 성형공정 모델을 발전시키는데 어려움을 주게 된다.

그런 모델들 속에 복잡한 해석을 하는 전통적인 방법은 구조적인 식과 전단율, 고체 마찰, 냉각률과 같은 공정 변수들에 관계된 점성에 관련된 반 경험적인 식에 의한 것들이다¹. 그런 모델들이 반응용 성형공정 모델링에서 만들어지는 중요한 과정을 가능하게 한 반면에 이런 방법은 한계를 가지고 있다. 특히, 이러한 공식화의 대부분은 레오로지 실험을 수행하는 것에 의해서만 결정 될 수 있는 변수들을 포함한다.

레오로지 성형 시 발생하는 고액분리현상(액상편석)은 가공발생과 불균일한 고상을 분포의 원인이 되어 제품의 기계적 성질을 저하시킨다. 따라서 액상편석의 방지는 성형품의 신뢰성 확보 면에서 매우 중요하다. 레오로지 소재의 고상입자에 대한 유동을 해석하는 경우에는 각각의 입자들에 대해 위치와 속도, 에너지 등이 결정되어야 하기 때문에 입자들간의 상호 작용을 고려하여야만 해석이 가능해진다. 일반적인 유동 현상에서 해석을 하는 경우

에 사용되는 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^{2,3}. 이러한 입자의 유동을 해석하기 위해 분자 동력학을 이용한다. 분자 동력학을 이용하여 레오로지 소재의 성형공정 시 입자 사이의 상호 작용을 수치적으로 계산하여 모사함으로써 입자의 유동 해석과 그에 따른 입자의 거동을 예측할 수 있다.

레오로지 소재의 성형에 대한 연구의 일환으로 액상편석을 방지하기 위한 연구의 일환으로 고상입자가 움직일 때 발생하는 점성현상에 대해 살펴 보고자 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 결합을 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.

여기에 쓰이는 입자간 포텐셜은 콜로이드학에서 널리 사용되는 DLVO^{4,5} 모델에 기초를 두고 있다. 패어 포텐셜 P 는 다음에 주어진 것처럼, 인력 성분 P_A 과 척력 성분 P_R 의 합이다.

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

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 계산된 위치가 가산되어 정해진다. 여기서 질량중심속도 V 의 같지 않은 성질이 분자운동에 의해 어떻게 같아지는가가 점성효과인데, 여기에서는 역으로 이러한 같지 않은 성질을 보전하는 데에는 어떤 분자운동이 되는가를 본다. 즉 V 는 y 방향으로 직선적인 분포를 가정한다($V=(a_y, 0)$). 이때, 유체역학적인 점성계수 μ 는 선단응력 τ 에 대해

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

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.

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

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

$$\underline{F}_i = \sum_{i \neq j} \underline{F}_{i,j} - 6\pi R \eta \Delta v_i \quad (5)$$

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

$$\underline{v}_i(t + \delta t) = \underline{v}_i(t) + \frac{3 \underline{F}_i}{4 \pi R^3 \rho} \delta t \quad (6)$$

$$\underline{x}_i(t + \delta t) = \underline{x}_i(t) + \underline{v}_i(t) \delta t + \frac{3 \underline{F}_i}{8 \pi R^3 \rho} \delta t^2 \quad (7)$$

윗면은 속도 V 로 미끄러지고 있는 반면에 고정되어 있는 아래 표면에 있는 영역을 고려하자. 부유하는 매개물이 경계면에서 슬립이 없는 단순한 뉴턴 유체가 된다고 가정한다면, 우리는 Δv_i 를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Delta v_i = v_i - \frac{z_i}{d} V \hat{i} \quad (8)$$

\hat{i} 는 판이 움직이는 방향의 단위 벡터이고 z_i 는 입자 i 를 아래 면으로부터 측정된 수직 위치이다. 응력 텐서는 다음에 주어진 것과 같다.

$$\sigma = \sum_j \underline{F}_{ij} \cdot \underline{r}_{ij} \quad (9)$$

여기서 F_{ij} 는 입자 i 와 j 사이의 보존력이고 r_{ij} 는 서로간의 거리이다. 부유물의 선단 점성율은 보통 응력 텐서 σ 로부터 구해진다.

$$\eta = \frac{\sigma_{xy}}{\dot{\gamma}} = \frac{\sigma_{yx}}{\dot{\gamma}} \quad (10)$$

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

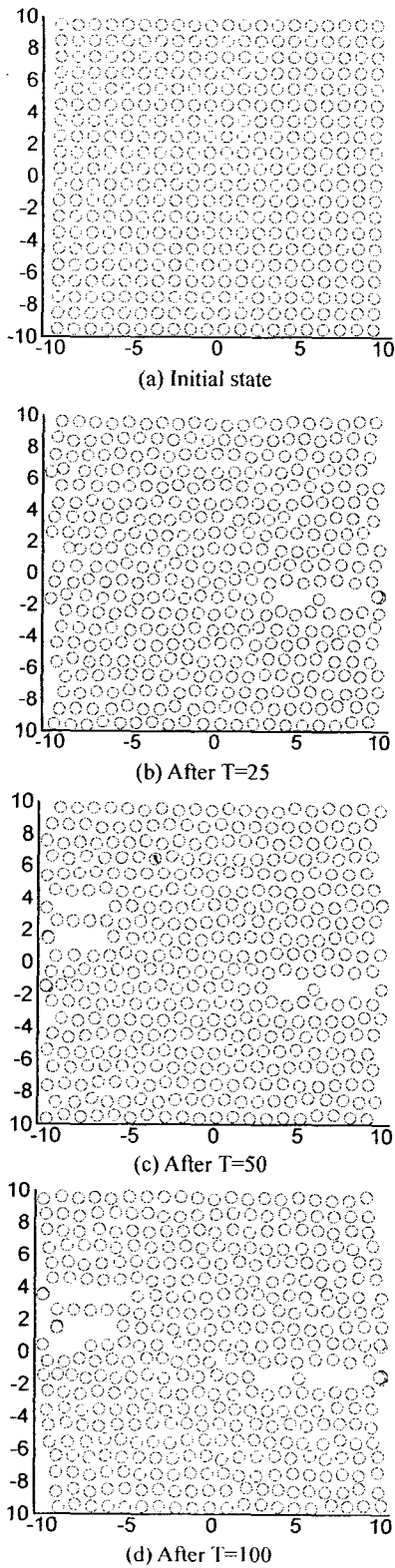


Fig. 1 Simulation result of particles at $T_f=1.0$

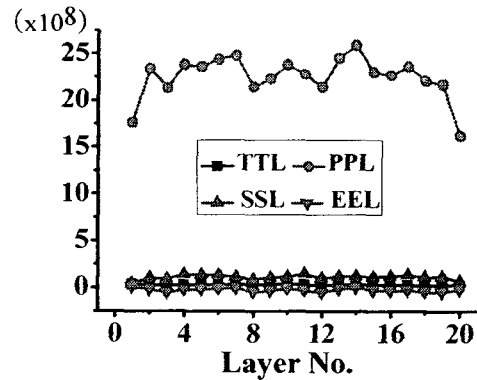
두꺼워지는 막의 형성으로 될 것이다.

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

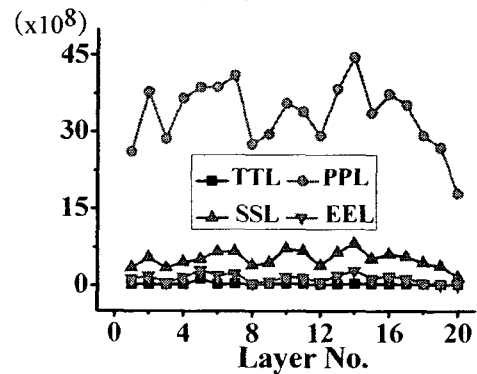
Fig. 1 에 무차원온도 $T_f=1.0$ 인 경우 시간에 따른 입자들의 분포가 어떤 형태로 변하는지에 대해 나타내었다. 시간 $T=100$ 은 실제로 1 초를 의미하며 처음의 분포에서 시간이 흐를수록 유출구와 유입구에 입자들이 모이는 것을 확인할 수 있다.

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, 2.0 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.

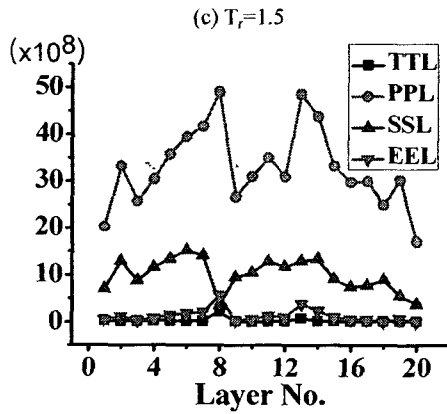
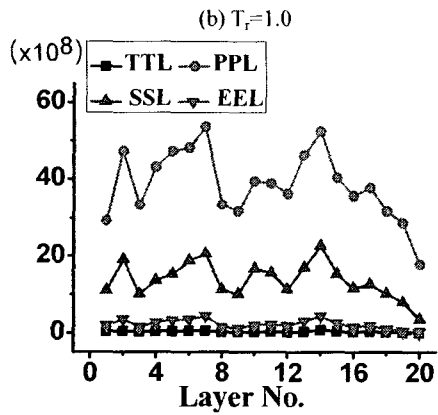
보다 정확한 해석을 위해 경계조건에 대한 보다 현실적인 대안을 제시하고 이를 통하여 분자들의 거동에 대한 정확한 예측을 할 수 있도록 연구가 필요하다.



(a) $T_f=0.5$



Layer No.



(c) $T_r=2.0$
 Fig. 2 shear stress, energy, pressure, temperature at $T_r=0.5, 1.0, 1.5, 2.0$

3. 결론

결정립제어 레오로지 소재의 유동 해석을 위한 연구의 일환으로 고상입자가 단순히 선단흐름을 타고 움직일 때 발생하는 점성효과의 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. 실제적인 거동을 예측하기 위해서는 입자의 크기와 점도를 수정하여 모사할 필요가 있다.

후 기

본 연구는 과학기술부 국가지정연구실(NRL) 사업으로 진행되었습니다.

참고문헌

1. Mullis A.M, 빛owards 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, 빛 olecular dynamics and Monte Carlo computing simulation,? Chap. 2, 1996.
3. Rapaport, D.C, 빛 he 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, 빛 he theory of the stability of lyophobic colloids,? Elsevier, 1948