

입자 분산 복합재료의 기계적 성질 추정

文卓珍 · 任大澤

고려대학교 공과대학 재료공학과
(1981. 8. 13 접수)

Estimation of Mechanical Properties for Particle Dispersed Composites

Tak Jin Moon and Dae Soon Im

Materials Science Department, Korea University, Seoul 132, Korea

(Received Aug. 13, 1981)

요약. 유한요소법을 이용하여 니켈입자가 분산된 폴리에틸렌의 기계적 성질을 추정하였다. 이 해석에서 다음 2단계의 과정을 통해 조사하였다. 첫 단계는 모재의 중심부에 구상의 물질을 포함하는 이른바 단일요소 모델을 생각하여 이것을 유한요소법에 의해 계산하였고, 다음 단계는 이러한 단일요소 모델이 모여 전체를 구성하고 있으므로 이 단일 모델이 조합된 형태의 전체 모델을 설정하여 해석 하는 것이다. 이 두 과정에서 니켈과 폴리에틸렌의 두상만을 고려한 2상 모델과, 니켈과 폴리에틸렌의 복합재료에서 이른 바 transcrystalline 구역이 관찰되어 이 구역을 고려한 3상 모델의 두 모델을 각각 사용하여 그 차이를 살펴 보았다. 유한요소법은 임의의 하중에서 응력 및 변위의 계산을 가능하게 한다. 이 컴퓨터로 계산된 출력으로 부터 탄성계수, poisson 비 및 복합재료의 응력 분포등을 얻을 수 있었다. 이 유한요소법에 의한 계산과 인장 실험을 통한 실험결과를 서로 잘 일치한다.

ABSTRACT. The mechanical properties of nickel particle polyethylene composites were estimated by using a finite element method. Two steps were carried out in this analysis; the first step was to consider an unit model composed of spherical cell in the center of the matrix and the second step was to consider a total model composed of unit model. Two phase and three phase models were used, since another third phase were observed between matrix and nickel particle. Finite element method permits the calculation of the stress and displacement, assuming the arbitrary loads. Elastic modulus, Poisson's ratio and stress distribution of composites were obtained from this output. Comparison of the calculation by finite element method and the experimental results for Ni-filled polyethylene showed good agreement in tensile properties.

1. 서 론

복합재료는 서로 다른 두 종류 이상의 재료로 되어 있으므로 이 재료의 기계적 성질을 추정하는 문제는 복잡하다. 따라서 복합재료의 기계적 성질을 정확히 추정하기 위한 연구가 계속되어 왔다. Paul¹은 최소 에너지 법칙을 이용하여 다상 재료의 상하한을 결정하는 식을 유도하였으

며, Hashin²과 Strikman³ 등은 등방성 복합재료의 탄성계수를 정확히 얻기 위한 연구를 하였다.

Miyamoto와 Oda⁴는 Glass Fiber Reinforced plastics와 구상화 흑연주철을 예르 들어 유한요소법(Finite Element Method)을 이용하여 탄성계수 및 Poisson 비를 추정하고, 이 결과를 실험 결과와 비교하여 유한요소법의 타당성 여부를 연구하였다. 한편 Sahu⁵ 등은 epoxy와 pol-

yester resin 등에 glass bead 가 분산된, 복합재료의 탄성계수와 인장강도 등을 유한요소법에 의해 추정하였으며 실험결과와 잘 일치함을 발표한 바 있다. 이렇듯 충전제가 분산된 복합재료의 기계적 성질을 결정하려면 복잡한 계산이 필요하므로 최근 컴퓨터를 이용한 연구가 많이 진행되고 있다.

본 실험에서는 지금까지 다루어지지 않은 polyethylene-nickel 분말 복합재료를 대상으로 유한요소법의 모델을 설정하여 기계적 성질을 추정하였다. 이 복합재료는 현미경 조직점사를 통해 Schonhorn 등⁶⁻⁹이 보고한 바와 같이 이른바 transcrystalline 지역 (TCR)이 관찰되었기 때문에 transcrystalline 의 제 3의 상을 고려한 3상 모델을 사용하여 transcrystalline 지역을 고려치 않은 2상모델과의 차이를 살펴 보았다.

본 연구에서는 유한요소법¹¹⁻¹⁶을 사용하여 모델을 설정, 유한개의 삼각형 요소로 분할한 후 가상 일 (Virtual work)의 개념을 이용해서 요소의 결점 (node)에서의 가상의 힘과 변위의 관계로부터 각 결점에서의 변위를 컴퓨터로 계산하여 탄성계수 및 Poisson 비를 얻었다. 아울러 각 요소에서의 응력을 계산해 넘으로써 nickel 충전제 주위의 응력관계를 살펴 보았다. 이와같이 복합재료의 morphology 에 따른 정확한 모델의 설정으로 기계적 성질을 계산하고, 이것을 실험결과와 비교하여 유한요소법을 이용한 계산의 유용성을 검토하였다.

2. 유한요소법에 의한 계산

2.1 해석절차

본 해석에 사용된 복합재료를 미시적으로 관찰하면 filler 를 포함하는 부분 [Fig. 1(b)]과 matrix 로만 되어있는 부분 [Fig. 1(c)]이 분포되어 있음을 알 수 있다. 그러므로 먼저 각 부분에 대한 탄성계수 및 poisson 비를 구한다. 다음, 이 단일요소들이 적당히 분포된 모델을 설정하여 앞에서 설명한 각 부분의 탄성계수 및 poisson 비를 데이터로 하여 전체 모델을 하나의 복합재료로 생각하여 각 변위점을 컴퓨터 계산으로 얻어내어 평균 범위를 구해 탄성계수 및 poisson 비를 얻는다.

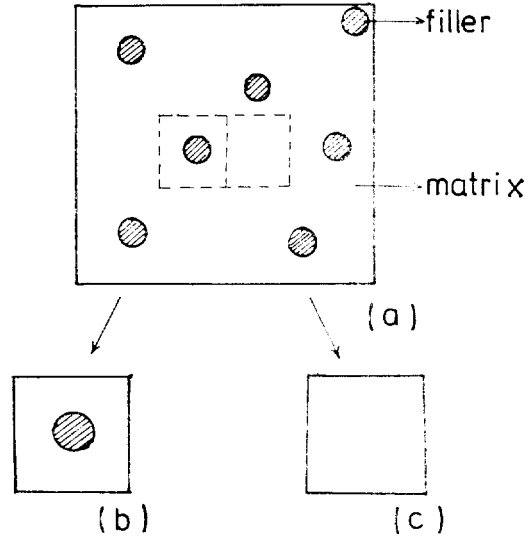


Fig. 1. Idealization of element model.

son 비를 얻는다.

Fig.1(b) 부분의 모델을 132개의 삼각형 요소로 분할하여 단일 요소 모델 (unit model) 이라고 부른다. 전체모델 (total model)은 144개의 삼각형으로 분할 하였다. 이러한 모델을 설정분할하여 단일요소모델, 전체모델 공히 z 방향으로 가상의 인장력을 주어 결과를 얻었다. 각 모델의 상단의 결점에 응력을 가했으며 등분포 하중이 걸리도록 힘을 분할하여 작용시켰다. 경계조건으로 y 축에 놓인 결점들은 y 방향으로만 변위가 일어나고, z 축에 놓인 결점들은 z 방향으로만 변위가 일어나도록 하였다. 인장력은 탄성한계 내에서 작용한 것으로 가정하였으며 열팽창계수에 의한 변위 및 물질자체의 하중등은 본 계산에 영향을 끼치지 않는 작은값으로 생각되어

Table 1. Input data.

Materials	Property	Value
Polyethylene	Young's modulus	11.20kg/mm ²
	Poisson's ratio	0.38
Nickel	Young's modulus	2.18×10 ⁴ kg/mm ²
	Poisson's ratio	0.30
Transcrystalline	Young's modulus	22.40kg/mm ²
	Poisson's ratio	0.38

고려치 않았다.

2.2 해석대상재료

본 해석에 쓰인 재료는 PE에 Ni을 분산시킨 복합재료로 실험과의 비교를 위해 filler의 입자의 크기를 일정하게 하였다.

2차원적인 해석을 위해 1mm 두께의 판을 해석재료로 선정하였다. 유한요소법의 계산을 위한 matrix와 filler 및 Transcrystalline 지역의 탄성계수 및 Poisson 비는 Table 1과 같다.

2.3 모델의 선정 및 분할

2.3.1 단일요소 모델

(a) **Two Phase Model (2상 모델)**. Fig. 1에서 분산된 조직도를 살펴보면 filler를 포함하는 부분과 matrix로만 되어있는 부분으로 구성되어 있음을 알 수 있다. Fig. 2와 같이 중심부에 filler를 포함하는 부분을 모델로 잡아 filler와 matrix 부분을 132개의 삼각형으로 분할하여 유한요소법을 이용해 가해진 힘에 따른 응력 및 변위 등을 계산한다.

(b) **Three Phase Model (3상 모델)**. 예비 실험결과 Fig. 3과 같이 filler와 matrix 사이에 transcrystalline 지역(TCR)이 관찰되었으므로 이 지역을 고려하여 위 2상 모델에 TCR까지 고려하여 3상이 존재하도록 모델을 설정했다.

2.3.2 전체모델

이 전체 모델은 단일 요소 모델이 조합된 것으로 실험에서 얻은 결과를 현미경으로 관찰하여 이중 빈도수가 많은 Fig. 4과 같은 위치를 전체 모델로 하였다.

이 전체 모델은 80×90mm의 판으로 하여 144개의 삼각형 요소로 분할하였으며 두개의 삼각형이 모인 정사각형을 하나의 단일 모델로 생각하여 Fig. 5와 같이 위치하도록 하였다.

Fig. 2에서 알 수 있듯이 Ni 반지름이 cell 길이의 1/3 이므로 전체적으로 Ni을 5vol % 분산 시키기 위해

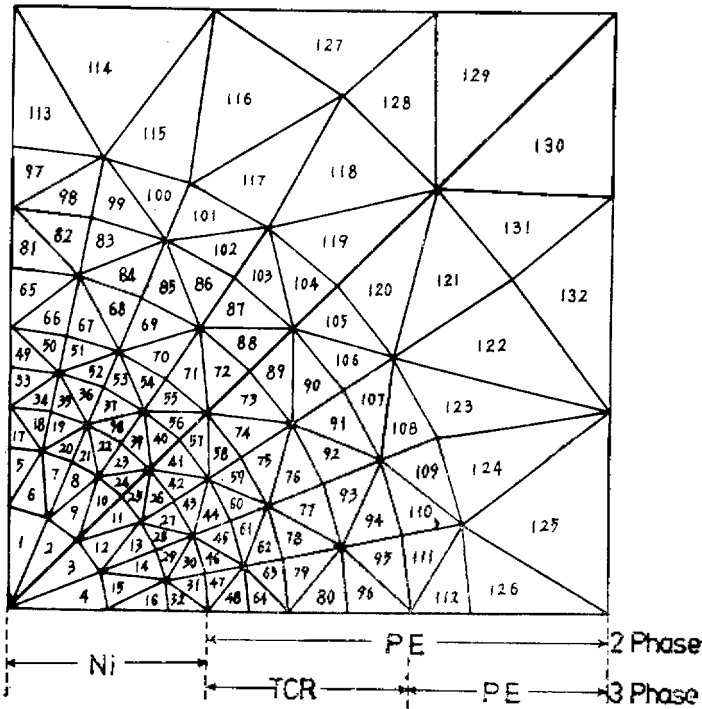
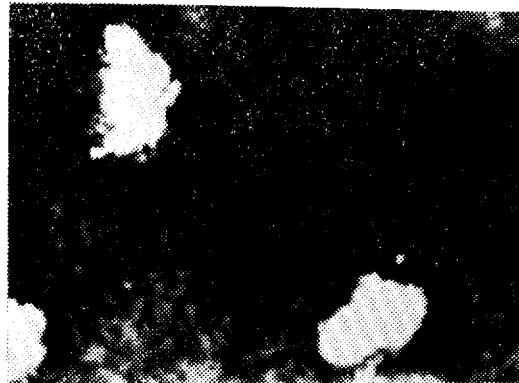
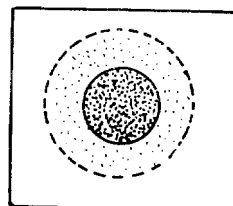


Fig. 2 Typical cell of unit element model.



(a)



(b)

Fig. 3 Photograph of specimen (a), model (three phase) (b).

$$V_f = \frac{\pi}{4} (n/m) \left(\frac{1}{3}\right)^2$$

$$n/m = 0.57$$

즉 전체삼각형 144개중 82개가 위치하도록 하

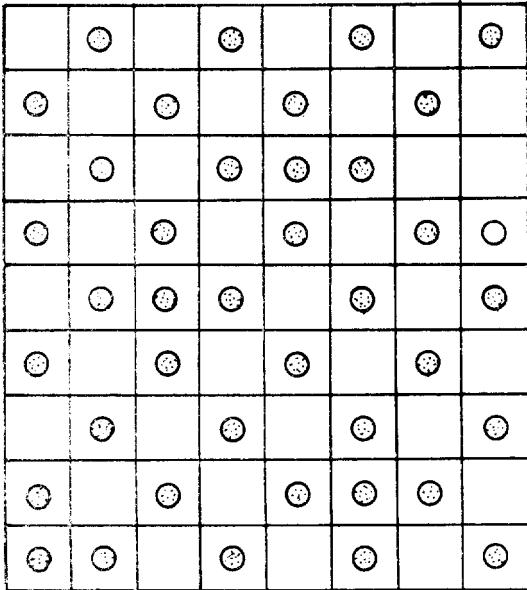


Fig. 4. Total model.

였다. 단일요소 모델과 같이 균등 하중이 작용하도록하여 절점에 걸리는 힘으로 치환하여 주었다.

3. 실험

3.1 시편제작

PE에 Ni을 분산시킨 복합재료의 시편 제작에 사용된 원료는 다음과 같다.

○ Low Density PE : 한양화학(주)제품 용융지수 45, 밀도 0.915

○ Ni : 일본 순정화학(주)제품 순도 99.8% 금속분

PE는 Ball Mill을 사용하여 분쇄하였으며 입도(粒度)를 균일하게 하기 위해 45mesh로 체가름(sieving) 하였다.

Ni 분말도 앞에서 설정한 모델과 같은 조건으로 하기 위해 50 μ 으로 입자의 크기를 일정하게 하였다.

Ni을 5vol%가 되도록 평량하여 PE과 섞은 후 분산이 잘 되도록 하여 die에 집어 넣었다. 원료가 들어있는 die를 175 $^{\circ}$ C까지 가열, 10kg/cm 2 로 가압하여 90분 동안 유지시킨 후 상온까지 서냉시켜 시편을 제작하였다. 이것은 충분한 가압과 가열로 계면에서의 핵생성을 유도하고 이것이 성장하여 TCR이 나타나도록 하기 위한 것이다.

3.2 인장실험

인장시편은 ASTM D-647에 따라 dumbbell shape로 만들었다. 실험은 Instron Universal Tester를 사용하였다. 2mm/min의 속도로 인장하였으며 응력스트레인 곡선은 자동기록장치로 기록하였다. Elastic limit의 용이한 관찰을 위해 full scale load를 20kg, 연신길이를 모눈종이 한 눈금당 1mm가 되도록 조정하였다. 실험은 상온(20 $^{\circ}$ C)에서 실행했다.

4. 결과 및 고찰

컴퓨터에 의한 기계적 성질의 추정은 단일요소모델과 전체모델로 분리하여 계산하였고 Ni과 PE의 2상을 고려한 경우와 TCR까지 고려한 3상의 경우에 대해 각각 계산하였다.

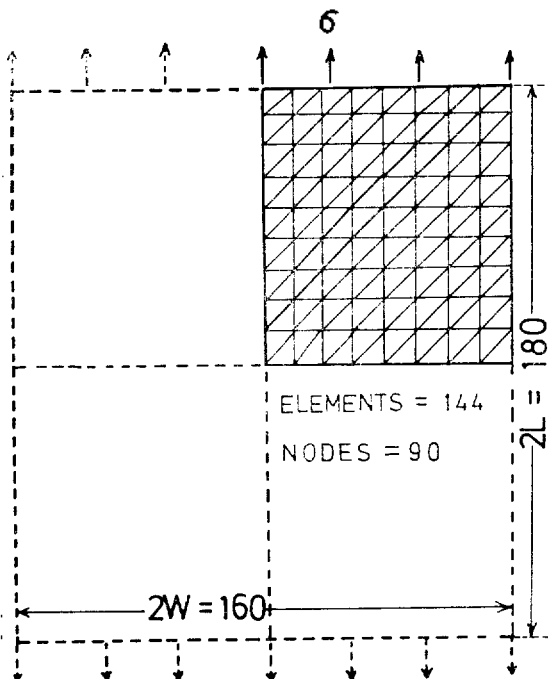


Fig. 5. The geometry of total model.

먼저 단일요소의 경우를 보면, 30mm의 정사각형 판에 임의의 90kg 하중을 주었을 때 Fig. 6과 같은 모양을 갖는다. 이때 2상 모델인 경우 y 방향으로 5.1mm 늘어났고 3상 모델의 경우 4.3mm가 늘어났음을 계산 결과에서 알 수 있다. 이 번위로 부터 탄성계수 및 poisson 비를 구하여 전체 모델의 요소의 데이터로 사용한다. 전체 모델에서는 80mm×90mm의 판에 160kg의 인장하중이 작용하는 것으로 가정하였으며 이때 변형된 형태를 Fig. 7에 나타냈다. 전체 모델의 경우 상단 절점에서의 평균변위는 2상인 경우 10.8mm, 3상을 고려한 경우 9.8mm가 늘어났다. 여기서 TCR을 고려한 경우가 변형이 적게 일어남을 알 수 있고, Fig. 6의 변형 형태에서 filler 주위의 각 요소의 절점은 거의 원래의 위치에서 벗어나지 않음을 보여준다.

탄성계수 및 poisson 비 등의 계산에서 TCR은 $2E_P = E_T$, $\nu_P = \nu_T$ 의 관계식을 사용한 Schonhorn의 값을 사용했다.

탄성계수 및 poisson 비를 구하는 방법은 각각의 모델의 변위가 유한요소법에 의한 계산에서 얻을 수 있으므로 이 평균변위를 구해 $E = \sigma/\epsilon = P/A/\Delta l/l_0$ 에서 Δl 을 구해 E 를 구할 수 있다. poisson 비는 x 방향과 y 방향의 평균변형을 구해 계산하였다.

Table 2에 유한요소법에 의한 탄성계수 및 poisson 비 등의 계산결과를 나타냈고, 인장실험 결과와 kerner 관계식¹⁷에 의한 계산 결과도 비교하였다.

Kerner equation은 다음과 같다.

$$E_c = E_m \frac{1 + ACV_f}{1 - CV_f}$$

$$\text{여기서 } A = \frac{7 - 5\nu_m}{8 - 10\nu_m}; \quad C = \frac{E_f/E_m - 1}{E_f/E_m + 1}.$$

Table 2에서 알 수 있듯이 유한요소법에 의한 계산결과에서 TCR의 영향으로 10% 정도의 큰 값을 나타낸다. 위 비교에서 실험치와는 근사한 값을 나타내며 kerner 관계식에 의한 결과는 조금 작은 값을 나타낸다.

복합재료의 poisson 비는 filler나 matrix의 고유치보다 작은 값을 나타낸다. 응력분포 관계를 알아보기 위해 y 축 상의 요소들에 대해 x 방향

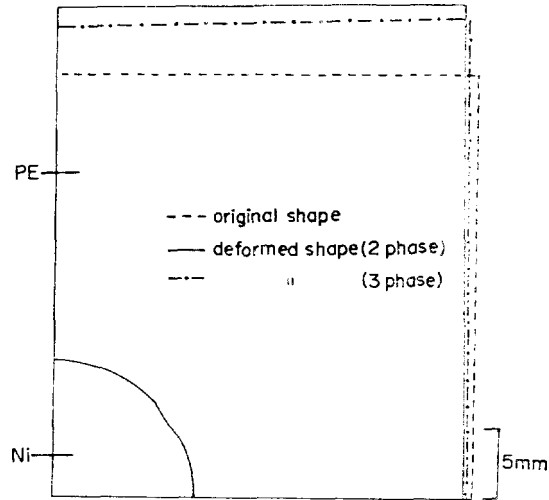


Fig. 6. Deformed shape of unit model.

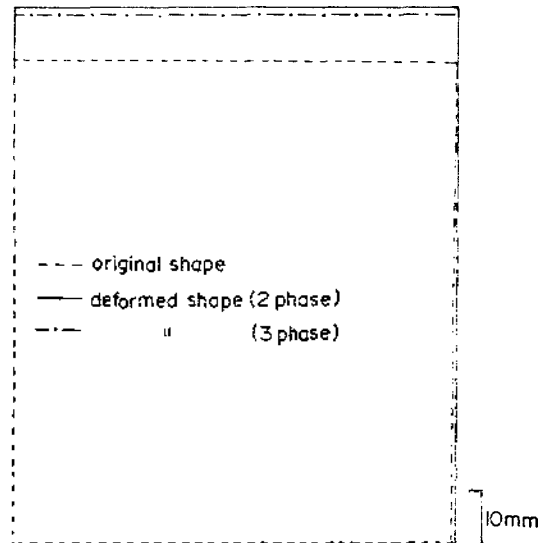


Fig. 7. Deformed shape of total model.

의 응력으로 부터 응력집중계수(α)를 구해 알아 보았다.

응력집중계수는 응력집중이 없을 때의 각 요소에서의 응력(σ_0)과 y 축 상에 놓인 각 요소에서의 x 방향의 응력(σ_x)과의 비, 즉 σ_0/σ_x 로 정의된다. 본 해석에서는 σ_0 가 $3\text{kg}/\text{mm}^2$ 이며, 이 값을 사용하여 구한 응력집중계수와 filler로부터의 거리와의 관계를 Fig. 8에 나타냈다.

2상모델인 경우 filler의 탄성계수가 matrix에 비해 크므로 filler에서 응력을 많이 부담하

Table 2. Comparison between experimental and theoretical value.

Method	Properties		
	$E(\text{kg/mm}^2)$	ν	
Experiment	17.5	—	
Kerner eq.	12.5	—	
FEM	Two phase model	16.7	0.14
	Three phase model	18.4	0.15

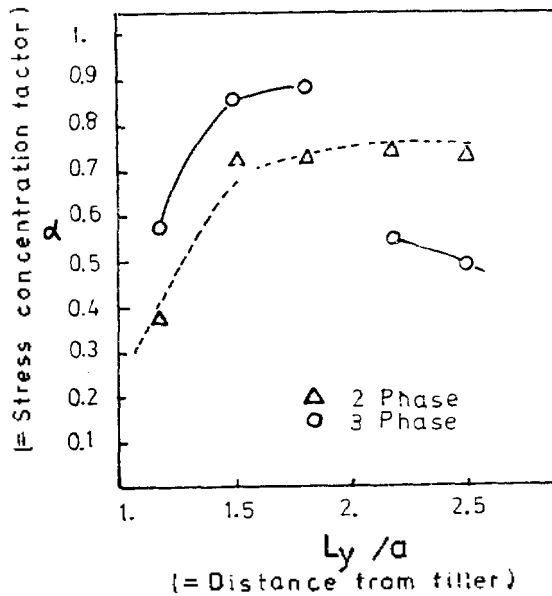


Fig. 8 Relation between α and L_y/a .

여 계면주위, 즉 $L_y/a=1.15$ 가 되는 곳에서는 응력집중계수가 0.37정도의 작은 값을 나타내나 L_y/a 가 1.5 즉 Ni 입자 반지름의 1/2되는 지점에서 부터 큰 값을 나타낸다. 이와같이 응력집중계수는 filler에서 멀어질수록 증가함을 보인다. 이것은 rigid filler로 부터의 응력의 부담이 줄어들음을 의미한다. 3상모델에서 L_y/a 가 1~2인 지역 즉 TCR 내에서는 filler의 응력부담이 커 응력집중계수가 큰 값을 나타내나 2가 지나면 급격히 감소하는 현상을 보인다. 이것은 TCR이 응력을 더 적게 받는 역할을 하는 것으로 생각되며, 이것은 TCR 지역에서는 filler와의 거리가 멀어질수록 응력집중계수가 증가하지만

Matrix에서는 반대로 감소한다는 Wang¹⁰의 발표와 잘 일치함을 알 수 있다.

TCR에서 응력이 많이 걸리므로 matrix에서는 응력집중계수가 작은 값을 나타내며 변형이 적게 일어나고 있다. 앞에서 TCR을 고려한 모델에서 탄성계수가 증가되는 현상을 보이는 것도 이것으로 설명될 수 있다.

5. 결 론

(1) 본 연구의 방법과 이론치 및 실험치와 비교한 결과, 유한요소법은 가상의 데이터를 넣어 기계적 성질을 예측할 수 있는 유용한 방법이며 filler의 모양에 따라 모델을 자유롭게 설정할 수 있음을 알았다.

(2) 유한요소법에 의한 계산이 Kerner equation에 의해 얻어진 값보다 실험치에 더 근사한 값을 나타냈다.

(3) TCR의 영향으로 응력집중이 많이 일어나 변형이 적게 된다. 즉 3상을 고려한 경우가 더 큰 탄성계수 값을 갖는다. 2상모델의 경우 filler에서 멀어 질수록 응력집중계수는 감소하고 TCR을 포함하는 경우 TCR 지역에서는 증가하다가 Matrix에서 급히 감소한다.

Nomenclature

- A: crosssectional area of the model plate (mm^2)
- a: Ni 입자의 반지름 (mm)
- E: Young's modulus (kg/mm^2)
- E_c : Young's modulus of composites
- E_f : Young's modulus of Composites of filler
- E_m : Young's modulus of Composites of matrix
- E_P : Young's modulus of composites of polyethylene
- E_T : Young's modulus of Composites of transcrystalline region
- l_0 : Original length of model (mm)
- Δl : Elongation
- L_y : Distance from filler
- m: Total number of elements
- n: Number of fillers

p : Total load (kg)

V_f : Volume percent of filler

α : 응력 집중 계수

σ : Stress ($=\frac{P}{A}$)

σ_0 : 응력집중이 없을 때 각 요소에서의 응력

σ_z : z 방향의 응력

ε : Strain ($=\Delta l/l_0$)

ν_m : Poisson's ratio of matrix

ν_P : Poisson's ratio of polyethylene

ν_T : Poisson's ratio of transcrystalline region

REFERENCES

1. Paul, B., *Trans. Metallurgical Society of AIME*, **218**, 36~41 (1960)
2. Hashin, Zvi, *J. Appl. Mech.*, **29**, 143~150 (1962)
3. Hashin, Zvi and S. Shtrikman, *J. Mech. Phys. Solids.*, **11**, 127~140 (1963)
4. Hiroshi Miyamoto and Juachi Oda, "A Simulation of Elastic and Poisson's ratio of Composite Materials," **23**, 47~53 (1974).
5. S. Sahu and L. J. Broutman, *Polymer Engineering and Science*, **12**, 91~100 (1972).
6. Harold Schonhorn, *J. of Polymer Sci.*, **2**, 465~467 (1964).
7. R. K. Eby, *J. Appli. Phys.*, **35**, 2720~2724 (1964).
8. T. K. Kwei, H. Schonhorn, and H. L. Frisch, *J. of Appli. Phys.*, **38**, 2512~2516 (1967).
9. Harold Schonhorn, *Macromolecules*, **1**, 145~151 (1968).
10. T. T. Wang and Harold Schonhorn, *J. of Appli. Phys.*, **40**, 5131~5138 (1969).
11. Levy, S, *J. Aeron. Sci.*, **14**, 547~560 (1947).
12. Zienkiewicz O. C., "The Finite Element Method in Engineering Sci.," P. 48~72, McGraw Hill Inc. Co., N. Y., (1971).
13. Harold C. Martin and Graham F. Carey, "Introduction to Finite Element Analysis," P. 75~117, McGraw Hill Book Co., N. Y., 1973.
14. Hiroshi Niyamoto, Maskaki Shiratori and Toshiro Miyoshi, *J. of the Faculty of Engineering, The Univ. of Tokyo (B)*, **31**, 217~269 (1971).
15. Hiroshi Miyamoto and Toshiro Miyoshi: *J. of the Faculty of Engineering, The Univ. of Tokyo (B)*, **32**, 477~501 (1974).
16. Hiroshi Miyamoto, Yoji Ishjima and Juhachi Oda, *J. of the Faculty of Engineering, the Univ. of Tokyo (B)*, **32**, 509~517 (1974).
17. Lawrence E. Nielsen, "Mechanical Properties of Polymers and Composites," P. 387, Marcel Dekker, Inc. Co., N. Y., 1974.