

레오로지 소재의 압축변형시 고상입자 거동의 동역학 해석

이창수¹, 강충길[#]

Dynamics Simulation of Solid Particles in Compression Deformation of Rheology Material

C. S. Lee, C. G. Kang

(Received July 14, 2006)

Abstract

It is reported that semi-solid forming process takes many advantages over the conventional forming process, such as a long die life, good mechanical properties and energy saves. It is important to predict the deformation behavior for optimization of the forging process with semi-solid materials and to control liquid segregation for mechanical properties of materials. But rheology material has thixotropic, pseudo-plastic and shear-thinning characteristics. So, it is difficult for a numerical simulation of the rheology process to be performed because complicated processes such as the filling to include the state of the free surface and solidification in the phase transformation must be considered. General plastic or fluid dynamic analysis is not suitable for the analysis of the rheology material behavior. Recently, molecular dynamics is used for the behavior analysis of the rheology material and turned out to be suitable among several methods. In this study, molecular dynamics simulation was performed for the control of liquid segregation, forming velocity, and viscosity in compression experiment as a part of study on the analysis of rheology forming process.

Key Words : Rheo Forging, Molecular Dynamics, DLVO Potential Function, Viscosity, Liquid Segregation, Solid Fraction

1. 서 론

반용융 공정은 반용융 상태에서 부품을 성형하는 공정이다. 반용융 가공은 액상과 고상이 공존하는 상태에서 성형하므로 편석, 기공 등을 감소시킬 수 있고 변형저항이 작아 적은 하중으로도 가공한계성을 증대시킬 수가 있어 최근 새로운 가공법으로써 각광받고 있다. 레오로지 소재는 요변성과 전단을 가하면 슬러리가 얇아지는 특징을 가지고 있다[1]. 그리고 레오로지 소재의 성형과정 중에 고상과 액상의 분리현상인 액상 편석이 발생하고, 액상편석에 의한 불규칙한 고상분포는 성형품에 있어 내부결함으로 작용하여 기계적 성질

을 저하시킬 뿐만 아니라 성형공정시 복잡한 유변학적인 거동을 야기시킨다. 그러므로 일반적인 소성역학이나 유체역학적인 해석은 레오로지 재료의 거동을 모사하는데 적합하지 않게 된다. 그래서 자유표면의 상태와 상변태의 응고 같은 복잡한 공정들을 고려해야만 하기 때문에 레오로지 소재의 성형공정을 전사모사 하는 것은 어렵다.

그리고 반용융 재료는 압축성형시 고상입자에 대한 액상 영역의 분리현상 때문에 응력-변형률 곡선이 변형률이 증가하면 응력이 증가하는 것이 아니라 액상 분리에 의한 응력 감소 현상을 나타내고 있다. 위와 같은 현상은 기공결함과 불균일한 고상률 분포의 원인이 되므로 반용융 재료의

1. 부산대학교 정밀기계공학과 대학원
교신저자: 부산대학교 기계공학부, cgkang@pusan.ac.kr

변형시 발생하는 액상과 고상의 분리 방지는 성형품의 신뢰성 확보면에서 아주 중요하다. 최근에 컴퓨터를 이용한 전산 모사에 의해 유동과 응고 과정의 정량적인 해석이 가능해졌고 고상과 액상의 미시적인 분리현상을 예측할 수 있는 레오로지 이론에 응용할 수 있게 되었다. 따라서, 본 연구에서는 레오로지 소재의 성형공정해석 연구의 일환으로 압축 실험시 액상 편석을 제어하기 위해 분자동역학[2~3]을 이용하여 고상입자들의 거동을 예측할 수 있도록 전산모사를 수행하였다.

2. 본 론

2.1 포텐셜 함수

레오로지 소재의 거동을 해석하기 위해 입자간 인력과 척력의 포텐셜을 구할 필요가 있고, 여기서는 콜로이드학에서 널리 사용되는 DLVO 모델[4~5]을 사용하였다. 두 개의 입자간에 발생하는 포텐셜 에너지 P 는 다음에 주어진 것처럼 인력성분 P_A 와 척력성분 P_R 의 합이다.

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

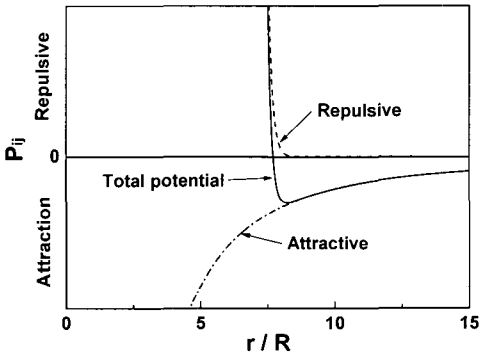


Fig. 1 Typical DLVO inter-particle potential

여기서 $a_{1,3}$ 은 각각 Hamaker constant, 표면에너지, Debye length 이다. 입자간 거리에 따른 포텐셜 함수의 형태는 Fig. 1 과 같고 파라미터 $a_{1,3}$ 및 입자의 크기 R 의 조절을 통해 변화시킬 수 있다.

2.2 지배방정식

고상과 액상이 공존하는 레오로지 소재내 고상 입자의 유동은 점성의 영향을 받게 된다. 입자의

유동을 방해하는 점성력은 다음의 식으로 나타낼 수 있다[6].

$$F_v = 6\pi R \eta \Delta v_i \quad (2)$$

$$\eta = m \dot{\gamma}^n \quad (3)$$

여기서 식 (3)의 점도 η 는 Ostwald-de Waele 가 제안한 점도식을 이용하였다. 점성력 F_v 에 영향을 주는 변수는 압축이 진행되는 동안 발생하는 전단변형률 $\dot{\gamma}$ 의 변화에 따른 점도 η 와 주위 입자간의 상대속도 Δv_i 이다. 레오로지 소재는 고상률에 대해 각각 다른 점도식을 가지게 되고 변수 m, n 의 조절을 통해 점도식의 조절이 가능하다 [7~11].

액체 내에서의 고상 입자는 부력을 받게 되고 이 부력은 입자의 Y 방향으로 작용하는 중력에 대항하는 힘이 된다. 부력은 다음과 같이 표현된다.

$$F_f = mg - \rho Vg \quad (4)$$

입자의 질량 m 과 액체의 밀도 ρ 가 주어질 때 고체와 액체의 무게의 차이에 따른 부력의 발생이 입자의 침전을 방해한다. 부력이 없다면 레오로지 소재의 고상입자는 순식간에 바닥으로 가라앉을 것이다. 알루미늄의 고체와 액체의 밀도는 최대 약 6%의 차이가 있고, 그에 따른 부력은 고상 입자 무게의 94%가 된다.

하나의 입자가 주위 입자와의 거리에 의해 받게 되는 포텐셜의 합과 점성의 효과를 포함한 입자 i 의 순수 힘은 다음과 같다.

$$F_i = \sum_{i \neq j} F_{i,j} - 6\pi R \eta \Delta v_i - mg + \rho Vg \quad (5)$$

위의 식에서 $F_{i,j}$ 는 입자간의 포텐셜이고, 부력에 의한 힘은 Y 방향에 한해서만 적용된다.

충분히 짧은 시간 증분 Δt 에 대해 시간 $t + \Delta t$ 에서 입자 i 의 속도 v 와 위치 r_i 는 다음과 같다.

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{F_i(t)}{m_i} \Delta t \quad (6)$$

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t) \Delta t + \frac{F_i(t)}{2m_i} \Delta t^2 \quad (7)$$

3. 결과 및 고찰

Table 1 에 나타나 있는 해석조건을 이용해서 레오로지 소재의 압축실험 전산모사를 수행하였다.

Test	1	2	3	4
Tool velocity (m/s)	0.5	0.5	0.5	1
Particle array	Rectangle	Hexagon	Rectangle	Rectangle
Tool shape	Planer	Planer	Free shape	Planer

전산모사실험에 사용된 레오로지 입자는 A7075 로 입자의 크기는 반경 $40\mu\text{m}$ 로 일정하고, 고상률은 55%이다. Test 1,2,4에서의 소재는 가로 30, 세로 20개의 입자가 배열되어 총 600개 입자로 구성되었고 Test 3에서는 총 705개의 입자가 사용되었다. 입자의 배열에 따라서 입자간의 간격이 결정된다.

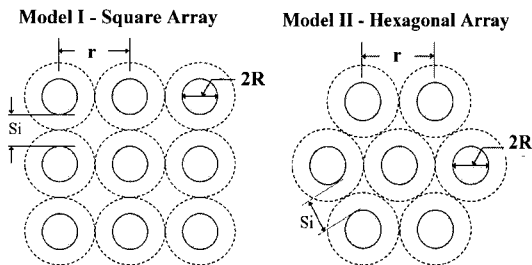


Fig. 2 Microstructure of material (particle array), (a) Square structure, (b) Hexagonal structure

Fig. 2 에 초기 입자의 배열을 나타내었다. 입자의 배열과 고상률에 따라 입자간의 초기 간격이 결정된다. 초기 입자의 간격은 사각형상 배열 보다 육각형상 배열이 약 7% 크다.

레오로지 소재 내의 고상입자의 크기와 간격은 알루미늄 원자의 크기와 간격보다 10^5 배 이상으로 레오로지 입자간의 포텐셜은 미미한 것으로 나타났고 그에 반해 점성력이 입자의 거동에 많은 영향을 미치는 것으로 드러났다. 35% 압축을 실시한 후 입자간 포텐셜은 10^{-6} 의 크기인데 비해, 점성력은 10^{-4} 으로 약 100 배의 차이를 보였다.

Fig. 3-5 에 Test 1-3 의 35%의 압축시 입자의 거동을 나타내었다. 압축이 진행됨에 따라 소재의 상부에서부터 입자의 밀집이 시작되고, X 축 방향

으로의 구속이 없기 때문에 레오로지 고상 입자가 좌우로 빠져나가고 그 결과 소재의 좌우측 형상이 타원에 가까워지는 것을 볼 수 있었다.

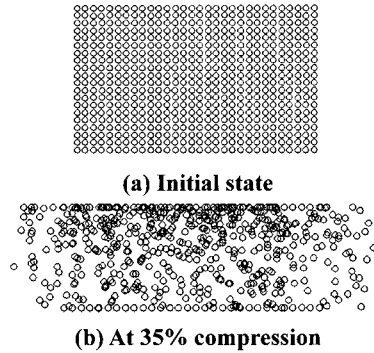


Fig. 3 Simulation result of rectangle array particles behavior during compression by test 1

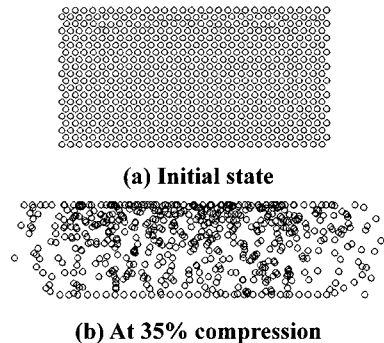


Fig. 4 Simulation result of hexagonal array particles behavior during compression by test 2

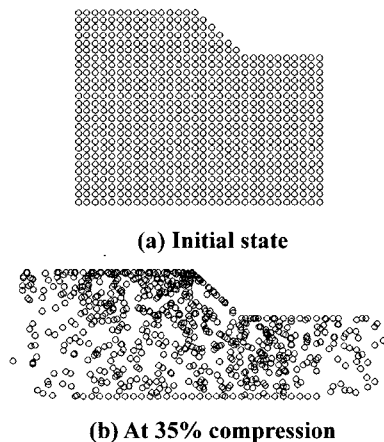


Fig. 5 Simulation result of particles behavior during compression by test 3

Fig. 5에서 볼 수 있는 것처럼 Test 3의 실험에서 레오로지 고체 입자들이 공구의 경사면에서 고착되거나 반사되는 것이 아니라 경사를 따라 위쪽으로 이동하는 것을 확인할 수 있었다.

Table 2에 35%의 압축을 실시한 Test 1-4에서의 고상 입자의 좌우분포와 상하분포를 나타내었다. 공구의 하강 속도가 0.5m/s인데 비해 입자의 속도는 그에 미치지 못하여 상부에 밀집되는 경향을 보였다. 뭉침이 심한 곳에서의 입자의 움직임은 입자간의 간격이 큰 곳의 입자 움직임에 비해 느린 것으로 관찰되었다.

Table 2 Verging rate and mean height

Test	1	2	3	4
Rate of spreading out (%)	30.1	37.6	54.3	20.6
Particle mean height (%)	64.9	62.3	54.7	64.7

Test 1의 사각 배열과 달리 초기형상이 낮은 높이와 긴 좌우 길이를 가진 육각형 배열인 Test 2의 실험 결과 좌우로 입자가 빠져 나가는 양이 더 많고 입자가 상하로 분포하는 정도도 초기 사각 배열에 비해 골고루 분포된 것을 보여준다.

0.5m/s의 같은 속도와 35%의 같은 압축률로 압축하면 육각형 배열의 압축시간이 더 짧다는 것을 고려해 볼 때, 초기 사각 배열에 비해 육각 배열에서의 입자의 움직임이 활발한 것을 알 수 있다.

Fig. 3-4와 Table 2를 통해 Test 1-2를 비교한 결과 사각형 배열의 경우 액상편석이 소재 하부에서 발생하고, 육각형 배열의 경우 소재 좌우에서 발생하는 것을 알 수 있다.

Test 3에서 경사면을 가진 공구로 압축한 결과에서 Test 1-2에서의 평면 공구로 압축한 경우보다 입자가 105개 더 많아 더 두꺼운 초기형상때문에 다른 실험에 비해 압축시간이 길어 좌우로 빠져나갈 시간이 많아서 좌우로의 분포가 크게 나왔다. 경사아래쪽의 공구의 높이가 낮아서 그 아래에 몰려있는 입자의 영향으로 평균높이도 낮게 나왔다. Fig. 5를 통해 공구 경사면의 좌우측 끝에서 입자의 몰리는 현상이 두드러진 것을 확인할 수 있었다.

Fig. 6에 압축이 35% 진행되었을 때 공구가 받는 힘을 나타내었다. 공구가 받는 힘의 크기는

경사면을 가진 공구, 사각형 배열, 육각형 배열 순이었다. 이것은 35% 압축시 경사면을 가진 공구에서의 경우가 사각형 배열과 육각형 배열에 비해 1.5배의 압축량을 가지기 때문으로 보인다. 실제 힘의 크기도 약 1.5배로 나타났다. 입자의 밀집이 적은 공구 양 끝단에서의 힘이 적은 것으로 나타났다. 경사면을 가진 공구에서는 공구의 경사부에서 최소의 힘을 보였고 경사부와 평탄부가 만나는 양 끝단에서 가장 큰 힘이 걸리는 것을 알 수 있었다. 이것은 경사를 따라 이동하던 입자가 경사와 평탄부가 만나는 지점에 누적되는 것과 관계되는 것으로 Test 1-2에서도 입자가 많이 밀집되는 부위에서 공구에 힘이 많이 걸리는 것을 보아 입자가 밀집되는 부위에서 공구가 받는 힘이 크음을 알 수 있다.

경사면을 가진 공구를 이용해서 압축률을 35%와 50%로 다르게 압축했을 때 압축률이 많을수록 공구가 받는 힘이 커지는 것을 Fig. 7을 통해 확인할 수 있다. 압축이 진행될수록 공구상의 최대힘과 최소힘의 차이가 커지는 것을 알 수 있고 힘의 불균형에 따른 공구의 파괴가 발생할 것을 예상할 수 있다. 공구가 견딜 수 있는 한계이상의 압축이 진행될 때 경사의 좌측 끝에서 파단이 시작될 것으로 예상할 수 있다. 경사끝점에서의 공구의 강도를 높이거나 공구가 파괴되지 않는 한계 압축량을 설정하는 작업이 요구된다.

다음으로 Test 4에 따라 Fig. 8에 압축속도를 0.5m/s와 1m/s로 다르게 한 경우에 입자의 거동을 나타내었다. Fig. 8(a)는 압축속도가 0.5m/s일 때의 소재의 최종 형상이고 Fig. 8(b)는 압축속도가 1m/s인 경우이다. 초기 소재의 형상과 크기가 같고 압축률이 35%로 같기 때문에 압축시간을 압축속도 1m/s인 경우에 압축속도 0.5m/s로 압축할 때의 반으로 설정했다. 압축시간이 짧은 경우 입자의 이동거리가 줄어들 것으로 예상했다.

Fig. 8을 통해 확인할 수 있는 바와 같이 35%로 압축한 실험 결과 압축속도가 1m/s인 경우 압축공구와 입자가 접하는 최상단부에서 고상입자들이 매우 밀집되어 있고, 좌우로 빠져나간 입자의 수가 0.5m/s로 압축한 것에 비해 적다.

Fig. 8(b)에서 소재에 전체적으로 형성된 액상편석을 확인할 수 있었다. Fig. 8(a)에 비해 좌우로 빠져나간 입자의 수가 적음에도 액상편석이

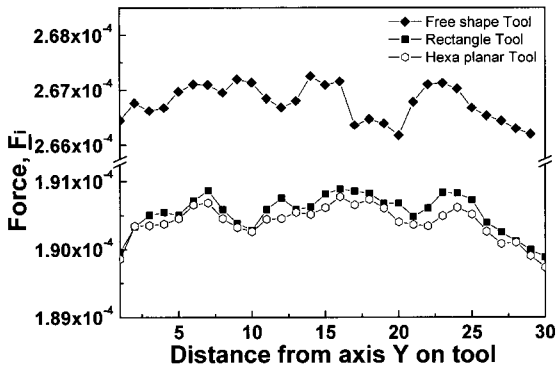


Fig. 6 Tool force comparison between tool shapes and particle structures at compression rate 35%

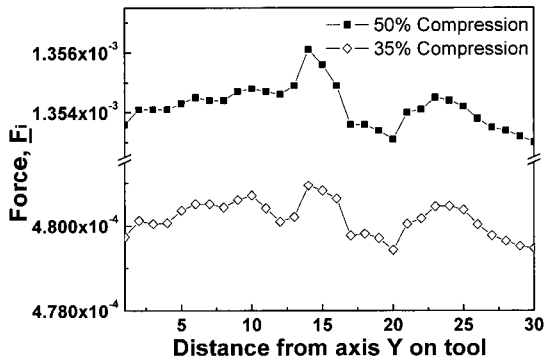


Fig. 7 Force comparison on free shape tool at different compression rate 35% and 50%

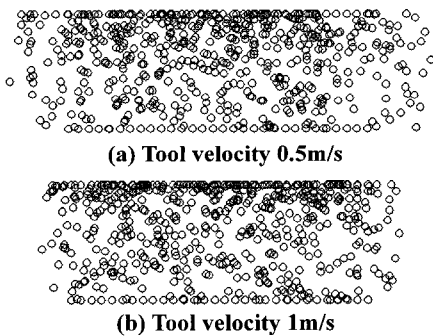


Fig. 8 Particles behavior at different tool velocities (a) 0.5m/s, (b) 1.0m/s

많이 발생되는 것과 연관해서 X 방향으로의 구속이 가능한 형 단조의 경우에 압축속도의 증가에 따른 액상편석의 발생은 더욱 두드러질 것으로 예상된다.

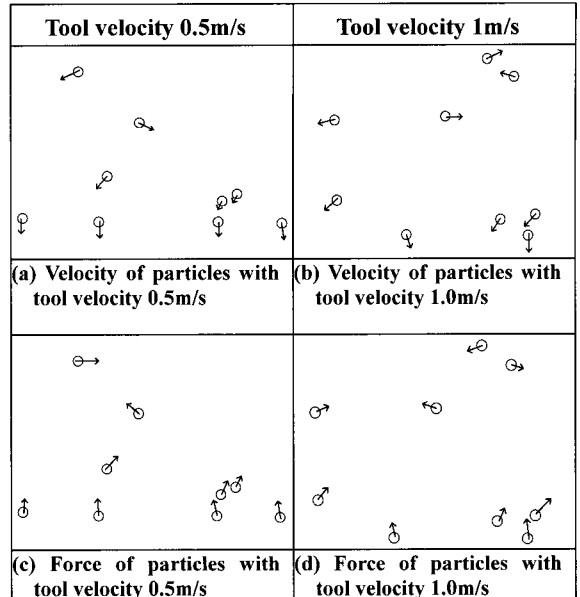


Fig. 9 Velocity and force vector of selected particles (311-320) at different tool velocities 0.5m/s, 1m/s

생산성을 위한 공정시간 단축과 기계적 성질의 향상을 위한 액상편석제거에 적절한 압축속도를 정하는 것이 매우 중요하다.

압축속도에 따른 입자의 거동을 자세히 예측하기 위해 선택한 입자(300-330)중 10 개의 입자의 속도와 받는 힘의 벡터를 Fig. 9 에 나타내었다.

압축속도 1m/s 로 압축한 경우의 입자간격이 압축속도 0.5m/s 의 경우보다 큰 것을 볼 수 있다. 속도벡터와 힘 벡터의 방향이 다른 것을 볼 수 있는데, 이것은 입자의 움직임을 방해하는 점성력이 입자 속도의 반대방향으로 작용하기 때문이다.

Fig.10 은 압축속도에 따른 선택된 입자(300-330)의 속도와 받는 힘을 나타낸 것이다. Fig. 10 (a)에서 보는 바와 같이 압축속도의 차이에 의한 입자간의 규칙성 있는 속도차이를 발견할 수 없었다.

Fig. 10 (a)와 (b)의 비교를 통해 입자의 속도가 빠를수록 점성력의 증가로 인해 입자가 받는 힘이 커지는 것을 확인 할 수 있었다. 속도가 비슷한 입자 사이에서도 힘의 차이가 나는 것은 0.5m/s 로 압축한 경우 소재의 하부 입자간의 밀집이 1m/s 로 압축한 경우의 밀집보다 커서 입자간의 움직임을 방해하는 점성의 영향을 더욱 많이 받기 때문이다.

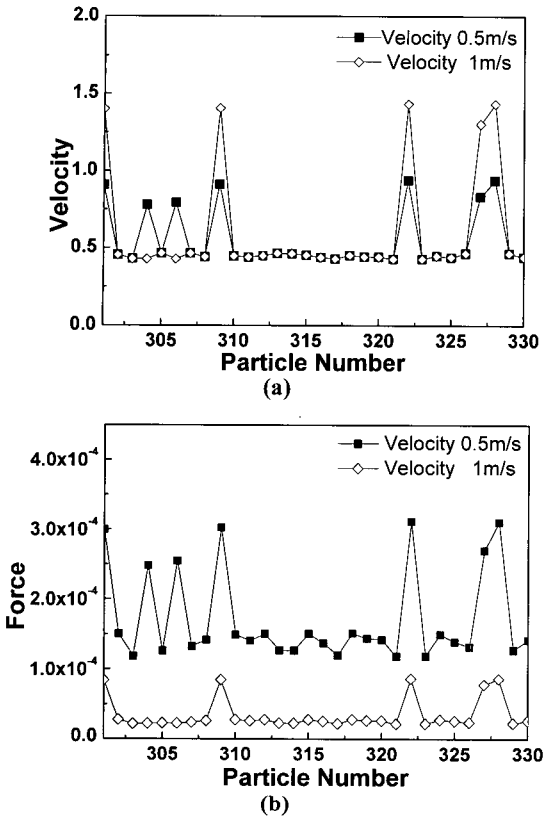


Fig.10 (a) Velocity of selected particles, (b) Force of selected particles at different tool velocities 0.5m/s and 1m/s

4. 결론

입자간의 포텐셜과 점성을 고려한 레오로지 소재의 입자 동역학 시뮬레이션을 통해 레오로지 입자의 배열, 공구의 형상, 그리고 압축속도에 따른 레오로지 고상입자의 전반적인 거동과 공구가 받는 힘, 소재 중심부에 위치한 입자가 받는 힘과 속도를 예측하였다.

(1) 입자간격에 의한 포텐셜은 입자의 상대속도에 의한 점성력에 비해 매우 적지만 입자간 포텐셜에 의한 입자간격의 변화는 점성력의 변화를 가져오므로 입자간의 포텐셜이 순수 힘에 미치는 영향을 무시할 수 없다.

(2) 초기 소재에서의 입자간 배열이 압축에 의한 고상입자의 좌우 및 상하분포에 영향을 미치는 것을 알 수 있었다. 사각형 배열에 비해 육각형 배열의 경우 입자의 움직임이 더욱 자유로운 것을 확인할 수 있다.

(3) 공구의 형상에 따라 입자의 밀집하는 정도가 달라지게 되는데 이것은 곧바로 공구가 받는 힘에 영향을 주게 된다. 특히 경사의 끝단에서 입자가 많이 밀집하게 되고 가장 큰 힘이 형성되는 것을 알 수 있다.

(4) 압축량이 동일한 경우 압축속도가 입자의 거동에 미치는 영향이 매우 큰 것을 확인 할 수 있다. 압축속도가 큰 경우에 입자는 압축시간의 감소와 빠른 공구의 속도로 인해서 상부의 입자간 밀집 정도가 심해지고 반대로 하부의 입자간 격은 더욱 커지는 액상편석이 발견되었다.

후 기

본 연구는 과학기술부 지원하의 국가지정연구실-Thixo-Rheo 성형연구실(NRL)-사업 과제에 의해 수행되었습니다.

참 고 문 헌

- [1] A. M. Mullis, 1998, Toward a microstructural model of semi-solid rheology, Proc. 5th Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloys and Composites, pp. 265-272.
- [2] G. Yosiyuki, 1996, Molecular dynamics and Monte Carlo computing simulation, Chap. 2.
- [3] D. C. Rapaport, 1995, The art of molecular dynamics simulation, Cambridge university press, Chap. 2.
- [4] B. V. Derjagin, 1941, L. Landau, Acta Physiochem. URSS(14), p. 633.
- [5] E. H. W. Verweyr, J. T. G. Overbeek, 1948, The theory of the stability of lyophobic colloid, Elsevier.
- [6] A. M. Mullis, 2002, Particle Dynamic Simulation of Semi-Solid Metal Rheology, Proceeding of 7th S2P, pp. 411-416.
- [7] P. A. Joly, 1976, The rheology of a partially solid alloy, Journal of material science Vol. 11, pp. 1393-1418.
- [8] M. Hirai, K. Takebayashi, Y. Yoshikawa, R. Yamaguchi, 1993, Apparent of Al-10mass%Su Semi-solid Alloys, ISIJ International, Vol. 33, No. 3, pp. 405-412.
- [9] J. C. Geblin, M. Suery, D. Favier, 1990, Characterisation of the rheological behaviour in the semi-solid state of grain-refined AZ91 magnesium alloy, Material Science and Engineering A 272, pp. 134-144.

- [10] V. Laxmanan, M. C. Flemings, 1980, Deformation of Semi-solid Sn-15 Pct Pb Alloy, Metallurgical Transactions A, Vol. 11A, pp. 1927 ~1937.
- [11] J. A. Yurko and M. C. Flemings, 2002, Rheology

and Microstructure of Semi-solid Aluminium Alloy Compressed in the Drop-Forge Viscometer, Metallurgical Transactions A, Vol. 33A, pp. 2737~2746.