

# 두께가 급격히 변하는 영역에서 고분자 유동에 의한 복굴절

이호상<sup>#</sup> · A. I. Isayev<sup>1</sup>

## Flow-Induced Birefringence of Polymers in the Region of Abrupt Thickness Transition

H. S. Lee, A. I. Isayev  
(Received September 8, 2008)

### Abstract

A finite element analysis was carried out for a 4:1 planar contraction die for polymer melts using the viscoelastic constitutive equation of Leonov. Viscoelastic fluids showed significant differences in pressure drop and birefringence in contraction and expansion flows. The pressure drop was higher and the birefringence smaller in expansion than in contraction flow. The difference increased with increasing flow rate. The nonlinear Leonov model was shown to describe the viscoelastic effects observed in experiments.

**Key Words** : Birefringence, Viscoelasticity, Contraction, Expansion, Pressure, Stress

### 1. 서 론

렌즈, CD 기판, LCD 백라이트 도광판 등 정밀 플라스틱 광학 부품의 수요가 크게 증가하면서 고분자 수지의 유동과정에서 발생하는 복굴절 거동에 대한 과학적인 이해의 중요성이 더욱 커지고 있다. 일반적으로 고분자 성형에서 두께가 급격히 변하는 유동영역이 존재하게 되며, 대표적으로 사출성형의 러너, 게이트 및 캐비티 연결부위, 압출성형의 입구영역 등에서 급격한 수축 및 확산 유동을 겪게 된다. 고분자의 점탄성 특성으로 인하여 급격한 두께 변화가 있는 영역에서의 유동을 제대로 해석하기 어려우며, 이로 인하여 플라스틱 제품의 게이트 주변 또는 두께가 급격히 변하는 부위에서 발생하는 압력손실, 응력 및 복굴절 등을 정확하게 예측하는 것이 중요한 과제

로 남아있다. 고분자의 입구유동에 대한 점탄성 해석은 Maxwell 구성방정식에 기초하여 많은 연구가 이루어졌

으며[1~3], 또한 Leonov 구성방정식을 적용한 점탄성 해석 등이 많이 이루어져왔다[4~9]. 특히, Isayev는 Leonov 구성방정식을 기초로 유선적분 알고리즘을 개발하여 고분자 유동에서 발생하는 응력성분을 계산하고 실험결과와 잘 일치하는 성공적인 결과를 보고하였다[7~8]. 그동안 급격한 수축 또는 확산 유동에 대한 점탄성 해석은 수렴성 향상을 위한 수치해석 알고리즘 개발에 대한 연구가 대부분이고, 사용한 수지는 PTT(Passenger Tire Tread) 고무, Polyisobutylene, Polyethylene 등이다.

본 논문에서는 점탄성 해석을 적용하여 두께가 급격히 변하는 유동영역에서 유량 및 압력손실이 복굴절에 미치는 영향, 그리고 유동방향을 반대로 하였을 경우 발생하는 복굴절의 변화를 중점적으로 고찰하였다. 사용한 수지는 복굴절에 의하여 품질 영향을 크게 받으며 광학부품 성형에서 많이 사용되는 폴리카보네이트이며, 해석은 Leonov 구성방정식을 기초로 2 차원 유동장에 대한 유한요소법을 사용하였다.

1. Institute of Polymer Engineering, University of Akron  
# 교신저자 : 충주대학교 항공·기계설계학과, lhs@cju.ac.kr

## 2. 해석이론

관성력을 무시한 비압축성 정상상태 유동에 대한 연속방정식과 운동방정식은 각각 다음과 같다.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \quad (2)$$

여기서  $\mathbf{v}$  는 속도벡터,  $\boldsymbol{\tau}$  는 응력텐서를 나타낸다.

Leonov 모델을 사용한 구성방정식은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\boldsymbol{\tau} = -p\boldsymbol{\delta} + \eta_0 s(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \mathbf{C}_k \quad (3)$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{C}_k - \nabla \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{C}_k - \mathbf{C}_k \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{2\theta_k} (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{C}_k - \boldsymbol{\delta}) = 0 \quad (4)$$

여기서  $\boldsymbol{\delta}$  는 단위텐서,  $p$  는 압력,  $\mathbf{C}_k$  는 Leonov 모델에서  $k^{th}$  모드의 탄성 변형율 텐서, 그리고  $\eta_k$  와  $\theta_k$  는 각각  $k^{th}$  모드의 전단점성(shear viscosity) 및 이완시간(relaxation time)을 나타낸다. 또한  $\eta_0$  는 전단속도가 0 인 경우의 점도이며,  $s$  는 0 과 1 사이의 유변학적 물성변수이다.

2 차원 평면유동에 대하여 탄성변형율텐서와 속도벡터는 다음과 같다.

$$\mathbf{C}_k = \begin{bmatrix} C_{11,k} & C_{12,k} & 0 \\ C_{12,k} & C_{22,k} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = (u, v, 0) \quad (5)$$

평균속도  $U$  와 채널두께의 1/2 인  $b$  를 사용하여  $u$  와  $v$  를  $U$  에 대하여,  $x$  와  $y$  를  $b$  에 대하여,  $\boldsymbol{\tau}$  와  $p$  를  $\eta_0 U/b$  에 대하여,  $\eta_k$  를  $\eta_0$  에 대하여,  $\theta_k$  를  $b/U$  에 대하여 무차원화시키면, 식 (1)-(4)는 각각 다음과 같이 표현된다.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (6)$$

$$-\nabla p + s \nabla^2 \mathbf{v} + \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \nabla \cdot \mathbf{C}_k = 0 \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\tau} = -p\boldsymbol{\delta} + s(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \mathbf{C}_k \quad (8)$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{C}_k - \nabla \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{C}_k - \mathbf{C}_k \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{2\theta_k} (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{C}_k - \boldsymbol{\delta}) = 0 \quad (9)$$

식 (6)-(9)에 대한 계산은 Fig. 1 에서 보여진 바와 같이 2 단계로 이루어진다. 먼저 뉴턴유체에 기초하여 속도장에 대한 초기치를 가정하고, 식

(9)로부터 탄성변형율텐서  $\mathbf{C}_k$  를 계산한 후 식(6) 과 (7)로부터 속도장과 압력장을 계산한다. 위와 같은 과정은 속도장과 응력장이 수렴할때까지 반복적으로 이루어진다.

계산된 법선응력과 전단응력을 기초로 하여 광응력법칙을 사용하여 다음과 같이 복굴절이 계산된다.

$$\Delta n = C_\sigma \sqrt{(\tau_{11} - \tau_{22})^2 + 4\tau_{12}^2} \quad (10)$$

여기서  $C_\sigma$  는 광응력계수(stress optical coefficient)이다.

구성방정식에서 대류항을 계산하기 위하여 유선적분과정을 적용할 수 있다. 각각의 유선을 따르는 유선좌표  $\xi$  를 도입하면 식(9)는 다음과 같이 표현될 수 있다[7].

$$\left| \mathbf{v} \right| \frac{d\mathbf{C}_k}{d\xi} = \nabla \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{C}_k + \mathbf{C}_k \cdot \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{2\theta_k} (\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{C}_k - \boldsymbol{\delta}) = F(\nabla \mathbf{v}, \mathbf{C}_k) \quad (11)$$

식(11)은 1 차 비선형미분방정식으로서  $\mathbf{C}_k$  는 입구에서의 값에서 시작하여 유선을 따라 다음과 같이 계산될 수 있다[7].

$$\mathbf{C}_k^{n+1} = \mathbf{C}_k^n + \frac{\Delta \xi}{|\mathbf{v}|} F(\nabla \mathbf{v}^n, \mathbf{C}_k^n) \quad (12)$$

여기서  $\mathbf{C}_k^{n+1}$  과  $\mathbf{C}_k^n$  는 각각 유선상의 점  $n+1$  과  $n$  에서의 탄성변형율텐서, 그리고  $\Delta \xi$  는 두 점사이의 길이를 나타낸다. 이때 각각의 이완시간  $\theta_k$  에 대하여 유선을 따라  $\Delta \xi \ll \theta_k |\mathbf{v}|$  조건을 만족하도록 적정한 증분값을 선택하면서 적분계산이 이루어진다. 또한 이완시간이  $\theta_k |\nabla \mathbf{v}| \ll 1$  조건이 되도록 매우 작을경우 다음과 같이 교란해(perturbation solution)를 적용한다[7].

$$\mathbf{C}_k = \boldsymbol{\delta} + \theta_k (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (13)$$

한편 급격한 수축 및 확산유동의 코너부위에서 주로 발생하는 재순환 유동영역의 경우에는 유선이 폐곡선을 형성하고  $\mathbf{C}_k$  의 초기치를 정의할 수 없다. 이경우  $\theta_k |\mathbf{v}|$  이 0.2 보다 작을경우 식(13)를 사용하여  $\mathbf{C}_k$  를 계산하고, 0.2 보다 클 경우에는 주변절점에서의 값을 초기값으로 사용하였다[7].

$\mathbf{C}_k$  값을 기초로 하여 식(6)과 (7)로부터 속도와

압력을 계산하며, 이때 수치적 안정성을 높이기 위하여 다음과 같은 수정된 식을 사용하였다[7].

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^m = 0 \quad (14)$$

$$-\nabla p^m + (s + \omega)\nabla^2 \mathbf{v}^m - \omega\nabla^2 \mathbf{v}^{m-1} +$$

$$\sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \nabla \cdot \mathbf{C}_k^{m-1} = 0 \quad (15)$$

여기서  $\omega$  는 이완계수, 그리고  $\mathbf{v}^m$  과  $\mathbf{v}^{m-1}$  은 각각  $m$  번째와  $m-1$  번째 반복 계산에서의 속도로서 수렴된 이후에는 동일한 값이 되어 식(6)과 일치한다.

속도와 압력을 계산하기 위하여 유한요소법을 사용하였다. 삼각요소를 기초로 하여 속도는 2 차원 형상함수, 그리고 압력은 1 차원 형상함수를 적용하였으며, 자세한 유한요소식과 경계조건식은 참고문헌[7]에 나타나 있다.

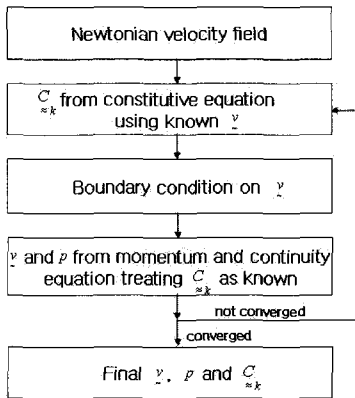


Fig. 1 Flow chart of the numerical scheme

### 3. 결과

적용모델은 Fig. 2 에서 나타난바와 같이 4:1 로 급격한 변화를 갖는 수축유동이며, 유한요소해석을 위하여 156 개의 요소와 361 개의 절점을 사용하였다. 반면에 확산유동에 대한 해석은 수축유동의 경우와는 유동방향을 반대로 설정하여 두께가 얇은 쪽이 입구영역이 되도록 경계조건을 설정하였다.

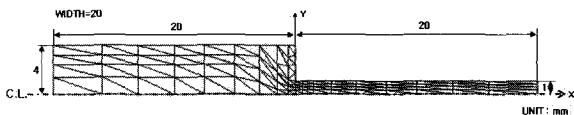


Fig. 2 Finite element meshes with geometrical dimensions

일차적으로 해석결과를 참고문헌[8]의 실험과 비교하기 위하여 PTT(Passenger Tire Tread) 고무를 사용하였으며, 그리고 유량 및 압력손실이 복굴절에 미치는 영향을 고찰하기 위하여 광학부품 성형에서 많이 적용되는 폴리카보네이트(Panlite AD5503) 수지를 사용하였다. 폴리카보네이트 수지에 대한 점탄성 해석을 위하여 Greener[10]가 측정한 점도데이터를 기초로 최소자승(Least Square Fitting) 방법을 적용하여 Leonov 구성방정식에서 사용되는 물성치를 계산하였으며, Fig. 3 은 Leonov 모델에 의한 점도값과 측정치를 비교한 것으로 2 개의 모드를 갖는 Leonov 모델이 측정데이터를 비교적 잘 나타내고 있음을 알 수 있다. 해석에 적용된 수지의 물성치는 Table 1 과 같다.

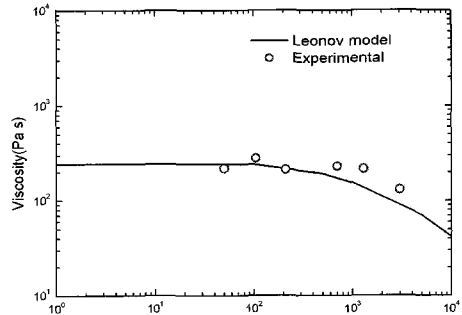


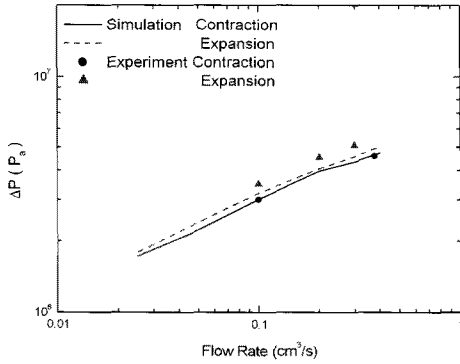
Fig. 3 Viscosity versus shear rate for Panlite AD5503

Table 1 Material parameters

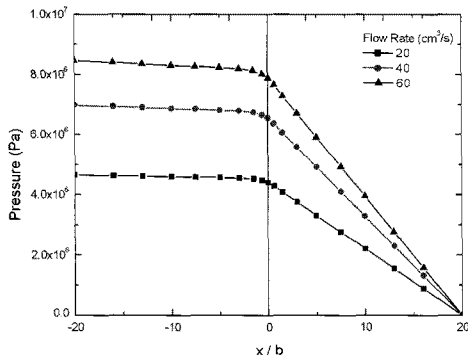
PTT	Polycarbonate
N=3	N=2
$s = 4.39 \times 10^{-5}$	$s = 2.1 \times 10^{-3}$
$\eta_1 = 1.3 \times 10^5 Pa \cdot s$	$\eta_1 = 149.1 Pa \cdot s$
$\theta_1 = 6.30 s$	$\theta_1 = 1.768 \times 10^{-3} s$
$\eta_2 = 1.54 \times 10^4 Pa \cdot s$	$\eta_2 = 94.5 Pa \cdot s$
$\theta_2 = 0.109 s$	$\theta_2 = 2.315 \times 10^{-4} s$
$\eta_3 = 3.11 \times 10^2 Pa \cdot s$	$C_\sigma = 3.5 \times 10^{-9} Pa^{-1}$
$\theta_3 = 0.0013 s$	
$C_\sigma = 1.41 \times 10^{-9} Pa^{-1}$	

Fig. 4 는 PTT 수지를 사용한 경우 유량 변화에 따른 압력손실을 나타낸 것으로 해석결과는 실험 결과[8]와 잘 일치하고 있다. 0.4cc/sec 이하의 낮은 유량에서 압력손실은 수축유동의 경우보다 확산유동에서 더욱 크게 발생하였으며, 이는 기존의 실험결과와도 잘 일치하는 것이다[6,8].

Fig. 5 는 폴리카보네이트 수지를 적용하여 수축



**Fig. 4** Predicted and measured pressure drop versus flow rates for abrupt contraction and expansion die

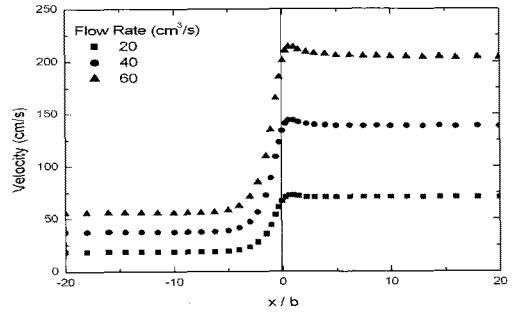


**Fig. 5** Centerline pressure distribution in the axial direction in abrupt contraction die

유동의 경우 유량에 따른 중심선에서의 압력값을 나타낸 것이다. PC 의 이완시간은 PTT 수지에 비하여 매우 느리기 때문에 탄성효과를 관찰하기 위하여 유량을 크게 설정하였다. 압력값은 입구에서 출구 방향으로 선형적으로 감소하고 있으며, 기울기는 두께가 얇은 영역에서 급격히 증가하고 있음을 볼 수 있다.

Fig. 6 은 수축유동의 경우 유량에 따른 중심선에서의 속도를 나타낸 것이다. 유량과 함께 증가하고 있는 속도가 두께가 두꺼운 영역에서 얇은 영역으로 들어가자마자 피크현상을 나타내고 있으며, 유량이 클수록 피크현상이 더욱 커지고 있음을 볼 수 있다. 이는 유량이 클수록 고분자의 탄성 효과가 더욱 크기 때문이다.

Fig. 7 은 수축유동 및 확산유동 각각에 대하여 유량에 따른 중심선에서의 복굴절을 나타낸 것이다. 급격한 수축유동의 경우 두께가 큰 영역에서 복굴절이 생성되기 시작하여 두께가 얇은 영역을



**Fig. 6** Predicted centerline velocity distribution in the axial direction in abrupt contraction die

통과할 때 최대값을 갖고 있음을 볼 수 있다. 이후 복굴절은 응력이완과 함께 얇은 영역에서 급격히 줄어들게 되고, 유량이 클수록 복굴절이 유지되는 길이가 증가하고 있음을 알 수 있다. 한편 확산유동의 경우 두께가 얇은 영역에서는 복굴절이 거의 생성되지 않으며, 두꺼운 영역으로 들어가 가기 직전에 비로서 생성되기 시작하고 있음을 알 수 있다. 이후 두꺼운 영역을 통과한 이후에 최대값을 나타내며, 두꺼운 영역에서 이완되고 있음을 볼 수 있다. 또한 유량이 증가함에 따라 복굴절의 최대값이 나타나는 위치가 아래방향으로 이동하며, 이완되는 기울기가 작아지고 있음을 볼 수 있다. 이로부터 대부분 사출금형의 게이트 부위는 Fig. 7 (b)의 경우로서 유량이 증가할수록 게이트 주변의 캐비티 부위에서 복굴절이 크게 발생하게 됨을 알 수 있다.

Fig. 8 은 유량 60cc/sec 의 수축유동에 대하여 다양한 축방향 단면에서 두께방향으로의 복굴절 변화를 나타내고 있다. 입구영역에서 복굴절은 중심에서 벽쪽으로 갈수록 선형적으로 증가하나, 두께가 얇은 영역에 가까운 단면에서는 중간에 복굴절의 최대값이 존재하고 벽쪽으로 갈수록 다시 감소하고 있음을 볼 수 있다. 이는 두께가 급격히 변하는 영역에서 Fig. 9 와 같이 유동방향 변화가 발생하면서 중심에서는 변형량이 크게 발생하고 벽면에서는 변형량이 작아지기 때문으로 판단된다.

Fig. 10 과 Fig. 11 은 각각 압력손실 및 유량에 따른 두께 중심부위에서 발생하는 최대 복굴절의 변화를 나타내고 있다. 압력손실 및 유량이 증가함에 따라 복굴절이 증가하고 있으며, 확산유동의 경우보다 수축유동에서 더욱 크게 발생하고 있음을 볼 수 있다. 일반적으로 등온상태의 뉴튼유체에서는 동일한 형상에 대한 정방향 유동과 역방

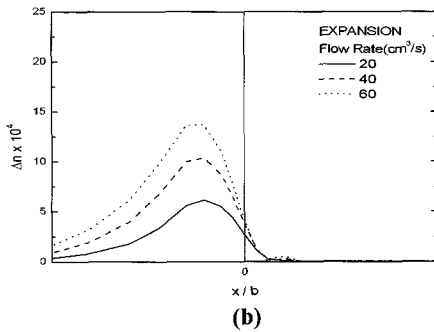
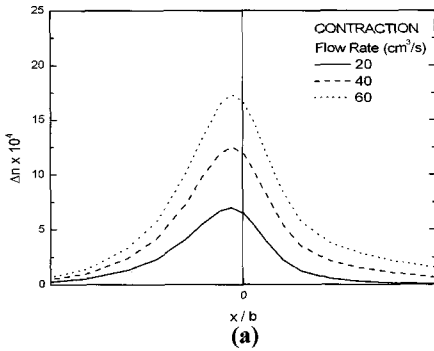


Fig. 7 Birefringence along centerline for (a) contraction and (b) expansion flow at different flow rates

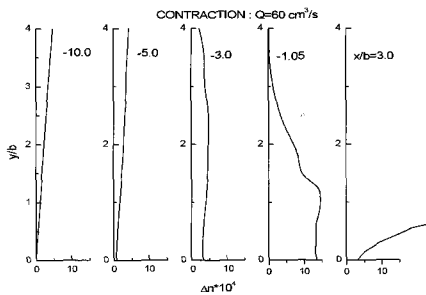


Fig. 8 Gapwise birefringence distribution at different cross section in contraction flow



Fig. 9 Gapwise velocity vector distributions for abrupt contraction flows

항 유동이 속도 및 응력값에 어떠한 영향을 미치지 않는다. 그러나 위에서 살펴본 바와 같이 수축 및 확산유동에서 복굴절 값이 서로 다르게 나타나는 것은 점탄성 유체에서 볼 수 있는 특징이다. 특히, 압력손실 또는 유량이 증가할수록 확산유동과 수축유동 사이의 복굴절 차이는 더욱 커짐을

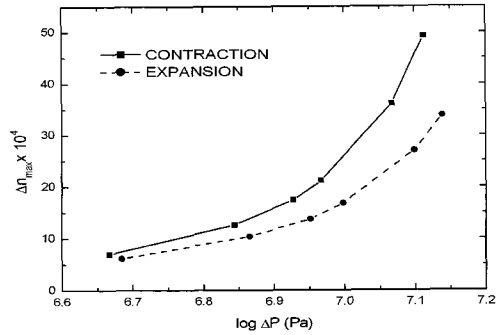


Fig.10 Maximum birefringence along centerline versus pressure drop

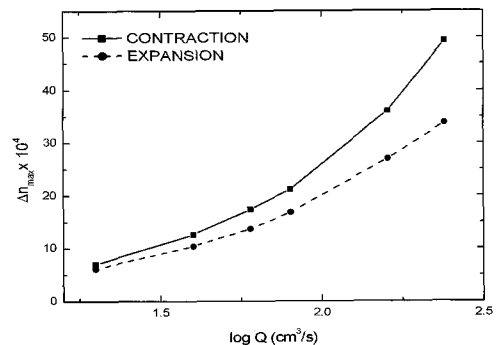


Fig.11 Maximum birefringence along centerline versus flow rate

볼 수 있는데, 이는 유량이 증가할수록 탄성 효과가 더욱 커지게 되고 이로인하여 복굴절 차이가 증가하는 것으로 판단된다.

#### 4. 결론

4:1 로 두께가 급격히 변하는 유동영역에 대하여 Leonov 구성방정식을 기초로 유한요소해석을 수행하였다. 유량 및 압력손실이 복굴절에 미치는 영향에 대하여 고찰하고, 이로부터 얻은 결론은 다음과 같다.

(1) 계산된 압력손실은 수축유동의 경우보다 확산유동에서 더욱 크게 발생하였으며 실험결과와도 잘 일치하였다.

(2) 압력손실 및 유량이 증가함에 따라 복굴절이 증가하였으며, 확산유동의 경우보다 수축유동에서 더욱 크게 발생하였다. 특히, 압력손실 또는 유량이 증가할수록 확산유동과 수축유동 사이의 복굴절 차이는 더욱 크게 발생하였다.

(3) Leonov 구성방정식에 기초한 해석은 그동안 실험에서 관찰된 점탄성 거동을 잘 나타냈으며 해석의 유용성을 확인할 수 있었다.

## 후 기

이 논문은 2007년도 충주대학교 교내 학술연구비의 지원을 받아 수행한 연구임.

## 참 고 문 헌

- [1] C. J. Coleman, 1980, A finite element routine for analyzing non-newtonian flows. Part I : Basic method and preliminary results, Vol. 7, pp. 289~301.
- [2] M. J. Crochet, R. Keunings, 1980, Die swell of a Maxwell fluid: numerical prediction, J Non-Newtonian Fluid Mech, Vol.7, pp. 199~212.
- [3] M. J. Crochet, R. Keunings, 1982, On numerical die swell calculation, J Non-Newtonian Fluid Mech, Vol. 10, pp. 85~94.
- [4] R. K. Upadhyay, A. I. Isayev, S. F. Shen, 1983, Modeling of stresses in multi-step shear deformation of polymeric fluids, J of Rheology, Vol. 27, pp. 155~169.
- [5] R. K. Upadhyay, A. I. Isayev, 1984, Nonisothermal elongational flow of polymeric fluids according to the Leonov model, J of Rheology, Vol. 28, pp. 581~599.
- [6] A. I. Isayev, R. K. Upadhyay, 1985, Two-dimensional viscoelastic flows: experimentation and modeling, J of Non-Newtonian Fluid Mech, Vol. 19, pp. 135~160.
- [7] R. K. Upadhyay, A. I. Isayev, 1986, Simulation of two-dimensional planar flow of a viscoelastic fluid, Rheological Acta, Vol. 25, pp. 80~94.
- [8] A. I. Isayev, Y. H. Huang, 1993, Two-dimensional planar flow of a viscoelastic plastic medium, Rheological Acta, Vol. 32, pp. 181~191.
- [9] H. S. Lee, 2004, Finite Element Analysis of Injection/Compression Molding Process, Traction of Materials Processing, Vol.13, No.2, pp. 180~187.
- [10] J. Greener, R. Kesel, B. A. Contestable, 1989, The birefringence problem in optical disk substrate: a modeling approach, AIChE J, Vol. 35, pp. 449~458.