

Design of ceramics powder compaction process parameters (Part I : Finite element analysis)

S. C. Jung and Y. T. Keum^{†,*}

Department of Precision Mechanical Engineering, Graduate School in Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

*Division of Mechanical Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

(Received December 29, 2004)

(Accepted January 6, 2005)

Abstract In order to simulate the powder compaction process and to assess the effects of packing randomness and particle arrangement 2-dimensional model of rod array compaction using quasi-random multiparticle array is introduced. The elastic modulus of porous ceramics is computed by the homogenization method. With 3 Al_2O_3 and 3 Al particles the compaction processes associated with the porosities are simulated by the explicit finite element method, based on the elastic modulus found by the homogenization method. The simulation results are compared with both previous analytical ones and experimental measurements. Finally, in order to find the relationship between the friction coefficient of powder particles and the relative density, the sensitivity analysis is performed.

Key words Ceramics powder compaction, Homogenized method, Quasi-random multi-particle array, 2-Dimensional rod array, Finite element analysis

세라믹스 분말 가압 성형 공정 변수 설계(1부: 유한요소 해석)

정상철, 김영탁^{†,*}

한양대학교 일반대학원 정밀기계공학과, 서울, 133-791

*한양대학교 기계공학부, 서울, 133-791

(2004년 12월 29일 접수)

(2005년 1월 6일 심사완료)

요약 세라믹 분말 가압 성형 공정을 전산모사 하고 패킹의 임의성과 입자 배열의 효과를 평가하기 위해서 유사한 입자의 다중 입자 배열을 사용하여 2차원 막대 배열 가압 성형 모델을 도입하였다. 3개의 Al_2O_3 입자와 3개의 Al 입자를 가지고 기공과 관련된 가압 성형 공정을 균질화 탄성계수를 사용하여 외연적 유한요소 해석하였다. 해석 결과는 이전 해석 결과 및 실험 결과와 비교하였다. 마지막으로, 분말 입자의 마찰계수와 상대밀도의 관계를 얻기 위한 해석이 수행되었다.

1. 서론

다결정 재료의 기계적 강도는 소결 결정립들의 평균 크기에 의존한다. 또한 강도를 포함한 재료의 물리적 또는 화학적 특성은 결정립들의 결정방위 배열 정도에 의해 영향을 받고, 이는 개별 결정립들이 결정방향에 따라 물리적, 화학적, 기계적 성질의 이방성을 갖기 때문이다. 따라서 세라믹 제품의 기계적 강도 평가를 위해서는 재료 미세 구조의 변형에 대한 현상 파악이 중요하다. 나노재료에 대한 연구는 최근 관심이 고조되고 있는 분야

이며, 고부가가치 재료로서 미래의 소재산업에서 급격히 수요가 예상되는 유망한 분야이다. 특히, 나노분말은 100 nm 이하의 입경을 갖는 초미립자로서 현재 많은 연구가 진행되고 있다.

나노 세라믹 분말 압축성형 공정은 소결 공정 이전에 이론밀도에 가까운 소결 밀도를 얻기 위하여 반드시 거쳐야 하는 과정이고 그 자체만으로도 우수한 물성의 세라믹 제품을 얻을 수 있는 과정이다. 이 공정에 대한 연구 동향으로는 이상적인 복합 재료의 분말 압축성형 공정에 대한 연구는 Wu 등[1]과 Jiang 등[2]에 의해 실험적, 수치적으로 접근되었다. 특히 정적압축과 반복압축에 관한 이상적인 모델이 제시되어 그에 따른 실험적, 수치적 해법을 제시하고 있다. 분말 압축 성형 공정의 해석적인 연구는 Xin 등[3]이 단일물질과 복합 물질의 분말

[†]Corresponding author

Tel: +82-2-2290-0436

Fax: +82-2-2298-6194

E-mail: ytkeum@hanyang.ac.kr

압축 현상을 explicit finite element method(explicit FEM)으로 시뮬레이션하는 방법을 제시하였다. 그리고 Zahlan 등[4]은 반복하중 하에 분말압축성형으로 만들어진 실제 제품에 대한 모델링 기법을 제시하였고, Zipse[5]도 마찬가지로 실제 세라믹 제품의 압축성형과 소결 공정에 대한 유한요소 시뮬레이션에 대한 연구를 수행하였다. 세라믹의 분말 압축 성형시 발생하는 밀도구배와 기공의 분포는 Terry 등[6]과 Peizhen 등[7-9]이 X-ray CT와 수은 기공도 분석기를 이용하여 측정하였으며, 초기의 밀도구배가 분말 압축 성형에 미치는 영향을 X-ray CT를 이용하여 실험적으로 알아보았다. 그리고 Consuelo 등[10]은 packing시 입자의 크기의 효과에 대한 연구를 하였고 Briscoe 등[11]은 분말입자와 다이의 마찰에 의한 효과에 대한 실험적인 연구를 수행하였다.

기존 연구에서는 이미 이 공정에 대한 실험적인 연구가 여러 가지 방법으로 진행되어 분말 압축성형 현상에 대한 정성적 특성은 거의 밝혀진 상태이며, 일부 이상적인 모델에 대하여 수치해법을 이용한 정량적 분석도 이루어지고 있다. 그러나 실제 분말은 모델에서와 같이 일정한 형태가 아니고, 분말의 입도 분포와 충전상태가 균일하지 못하여 이상적인 압축성형 모델은 실제 성형 현상과 차이가 있다. 따라서, 세라믹 분말을 이용하여 우수한 물성의 세라믹 부품을 성형하는 분말 압축성형 공정의 효율성 향상을 위해서는 실제 압축성형 현상을 정량적으로 해석할 수 있는 압축성형 공정의 모델링과 이의 전산모사가 필요하다.

본 연구에서는 분말 압축성형 공정의 해석을 위해 입자의 초기 밀도를 갖는 분말 성형체를 모델링 하였다. 그리고 다공성 세라믹 재료의 상대밀도에 따른 등기물성치를 구하기 위하여 균질화법을 도입하였다. 상대밀도에 따른 물성치를 도입해서 유한 요소 해석한 결과 값을 이전의 해석값, 실험값과 비교하였다. 또한, 분말 입자 사이의 마찰계수가 상대밀도에 미치는 영향을 알아보기 위하여 마찰계수를 변화시켜 가면서 해석하였다.

2. 유한요소 해석

2.1. 모델링

그 동안의 연구는 주로 단위 셀 배열이 각각 육면체의 또는 정방형의 주기적인 배열을 따른다는 가정 하에 균질의 또는 이질의 분말 입자의 밀도증가에 대한 실험 및 전산모사를 실시하였다. 그러나 실제 분말들은 주기적이지 않고 입자 배열의 임의성은 분말 압축 작업에 중요한 영향을 끼칠지도 모른다. 따라서 본 연구에서는 (1) 분말 배열 (2) 입자 크기 분포 (3) 분말 입자의 고정과 재

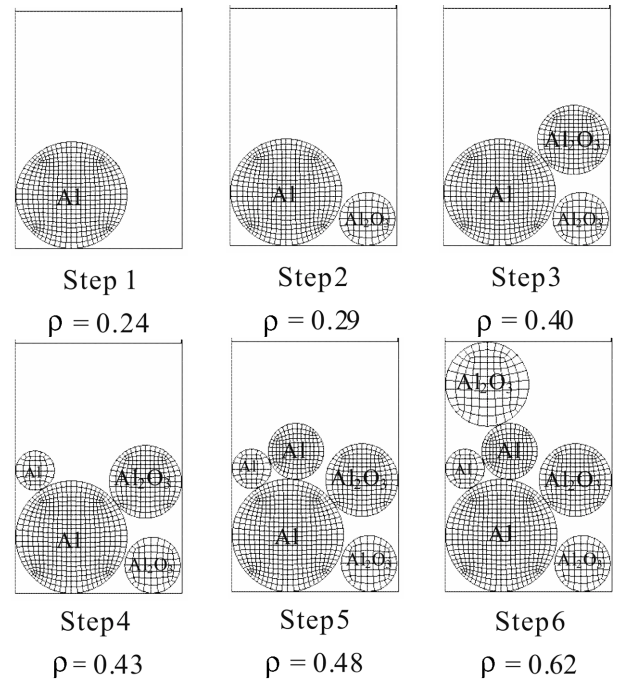


Fig. 1. Steps for obtaining arbitrary green relative densities (ρ) using quasi-random multi-particle array.

배열을 고려하여 실제 분말의 비주기성이나 임의성을 표현 할 수 있는 모델링을 위하여 quasi-random multi-particle array를 이용한다.

Fig. 1은 6개의 입자를 가지는 분말 알루미늄과 알루미늄이나 복합 성형체를 실제로 quasi-random multi-particle array를 적용하여 초기 상대밀도가 0.62인 분말 성형체로 모델링하는 과정을 나타낸다. 이 때 각 과정에서 입자를 추가할 때 상대밀도가 증가함을 확인할 수 있고, 입자의 크기를 조절하여 상대밀도를 조절할 수 있다.

Step 6과 같이 초기밀도가 0.62인 6개의 입자를 가지

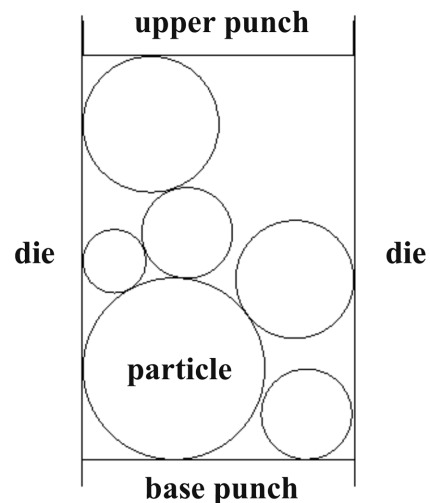


Fig. 2. Schematic view of 2-dimensional rod array model for powder compaction simulation.

는 분말 성형체를 시뮬레이션에 이용한다. 이때 분말 성형체는 2차원 막대 배열로 모델링 하였다. Wu 등[1]에 의하면 막대 배열 압축은 실제의 분말 압축보다 치밀화가 조금 작게 일어나지만 큰 차이를 보이지 않고, 재료적인 거동이나 접촉상태를 보다 쉽게 알아볼 수 있기 때문에 시뮬레이션에 주로 사용되는 방법이다. Fig. 2는 움직이는 상편치(upper punch), 고정되어 있는 양쪽 다이(die), 그리고 하편치(base Punch)를 함께 모델링한 개략도이다.

2.2. 균질화 탄성계수

분말 성형체와 같은 다공성 물질의 마이크로 스케일의 정확한 해석을 위한 매크로 스케일 모델의 등가물성치를 구하기 위해서 균질화 이론을 도입하였다. 2차원의 탄성체가 주기적으로 반복되는 공극의 특성을 갖는 미시적 단위구조의 집합이라고 가정한 균질화 이론의 구성식들 [12-14]로부터 균질화 해석한 탄성텐서 E_{ijkl}^H 를 구할 수 있다.

$$E_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \left(1 - \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \right) dY \quad (1)$$

여기서, $|Y|$ 는 단위구조 체적이고, E_{ijkl} 는 탄성텐서이며, χ_m^{kl} 는 특성변위로 주기함수이다.

기공률에 따른 균질화 탄성계수 E_h 를 계산하기 위하여 분말 압축 모델의 기공 형상과 유사한 Fig. 3과 같은 다양한 십자형 기공 모델의 단위구조를 유한요소 모델링하고, 기공률에 따른 단위구조를 균질화 해석하여 상대 탄

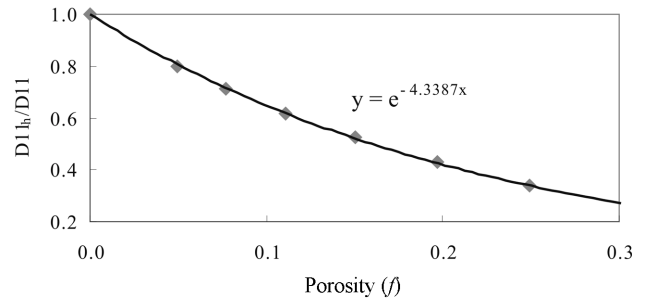


Fig. 4. Relative elastic tensor component associated with porosities.

성계수를 구하였다(Fig. 4 참조).

Fig. 4를 이용하여 균질화 탄성계수 E_h 를 구하고 유한요소 해석에서 사용하였다.

$$E_h = E \times e^{-4.3387f} \quad (2)$$

여기서, E 는 탄성계수이고, $f = 1 - \rho$ 는 기공률이다.

2.3. 해석조건

세라믹스 분말 가압 성형 공정의 유한요소 해석에 사용된 경계조건은 Fig. 5와 같다. 상편치($\partial\Omega_1$)에서 $P = 200$ MPa의 압력이 세라믹 분말들에 가해지고 다이와 하편치($\partial\Omega_2$)에서 변형이 없다는 경계조건을 부여하였다. 그리고 30초 동안에 최대 하중 압력 $P = 200$ MPa에 도달하는 것으로 가정하였다. 또한 펀치, 다이, 그리고 세라믹 분말간의 마찰계수는 0.2, 세라믹 분말들간의 마찰계수는 0.4로 가정하였다[15].

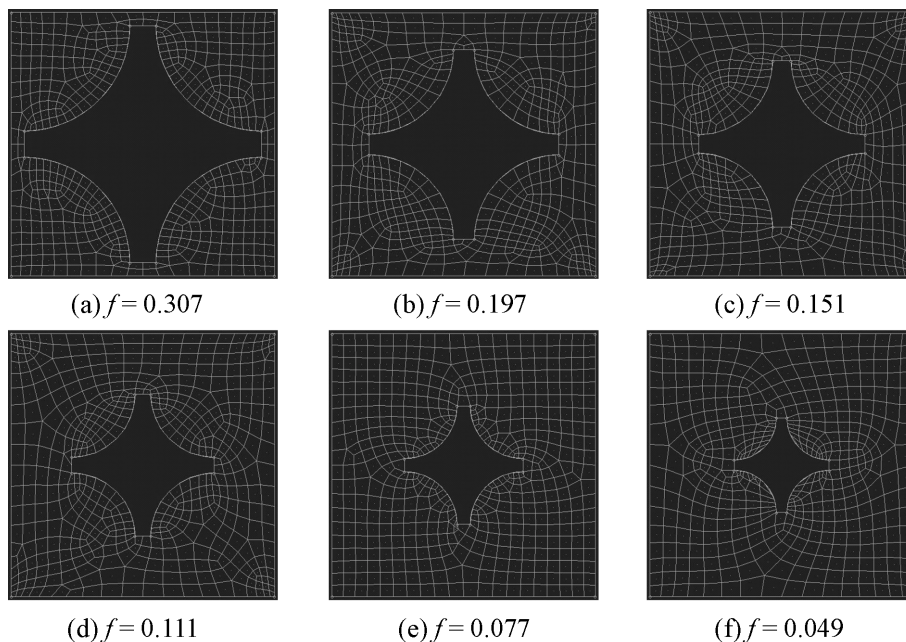


Fig. 3. Cross pore-solid models for calculating homogenized elastic modulus associated with porosity, f.

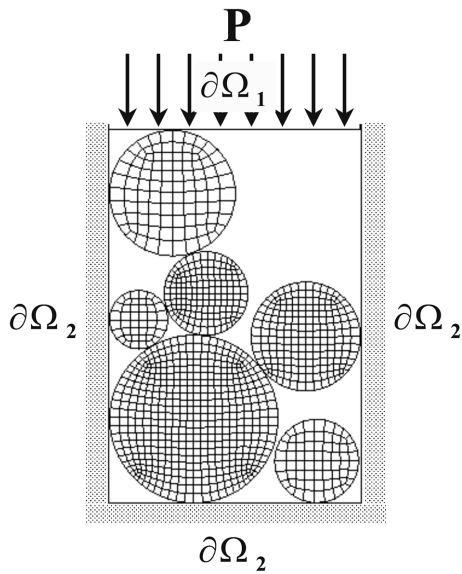


Fig. 5. Boundary condition for finite element simulation of powder compaction processes.

분말 가압 성형 공정에서 중요한 인자들 중의 하나가 마찰계수이다. 윤활을 하지 않은 건조 Al_2O_3 분말 사이의 마찰 계수는 일반적으로 0.35~0.50이고 아연 스테아르산염(zinc stearate)으로 윤활되면 0.7~1.0이다[15]. 이처럼 가변적인 마찰계수가 분말 압축의 상대밀도에 미치는 영향을 알아보기 위하여 분말과 분말간의 마찰계수를

Table 1
Material properties of Al and Al_2O_3

Material property	Al	Al_2O_3
Mass density (ρ)	2.12E+03 kg/m ³	3.89E+3 kg/m ³
Elastic modulus (E)	62 GPa	375 GPa
Homogenized elastic modulus (E_h)	$E \times e^{-4.3387f}$ GPa	$E \times e^{-4.3387f}$ GPa
Poisson's ratio (ν)	0.345	0.22
Yield Stress (YS)	28 MPa	300 MPa
Plasticity modulus	105.74 MPa	

각각 0.4, 0.6, 0.8로 변화시키며 해석을 하였다.

해석에 사용된 Al와 Al_2O_3 의 물성은 Table 1과 같다.

3. 해석 결과

초기 상대밀도 $\rho = 0.62$ 인 혼합 분말 압축을 분말 가압의 두 가지 모델인 미시역학(micro-mechanics) 접근법과 연속체 접근법으로 유한요소 해석하였다.

Fig. 6은 미시역학 접근법으로 탄성계수 E값을 사용하여 해석한 결과이다. 최대 압력 $P = 200$ MPa까지 도달하는 시간인 30초를 4 단계로 나누어 가시화 하였다. 시간이 지날수록 0.699, 0.730, 0.769로 상대밀도가 증가함을 알 수 있었고, 최종적인 상대밀도는 0.804이었다.

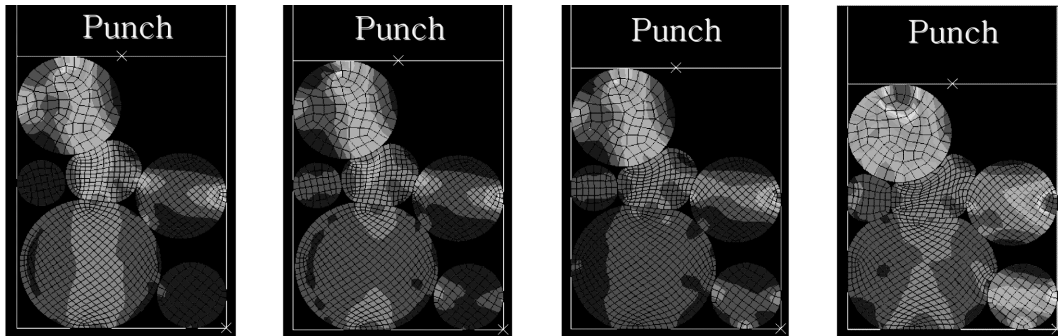


Fig. 6. Finite element simulation of 6 particle compaction process using E.

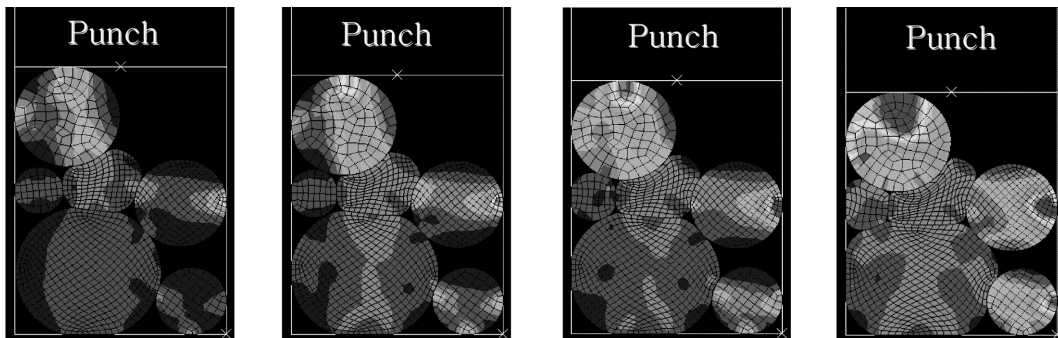


Fig. 7. Finite element simulation of 6 particle compaction process using E_h .

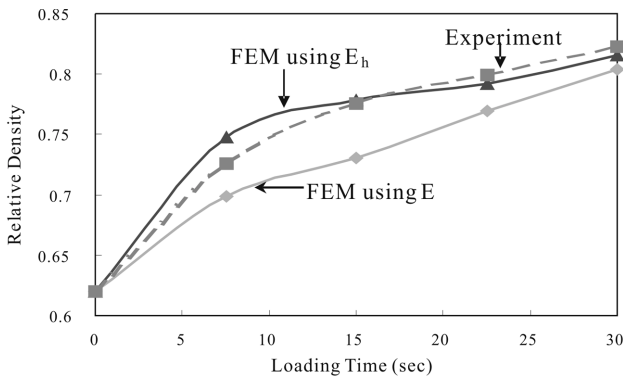


Fig. 8. Comparison of relative density among FEM using E_h , FEM using E, and experiment.

Fig. 7은 연속체 접근법으로 기공률에 따른 탄성계수 E_h 를 사용하여 얻은 해석 결과이다. 미시역학 접근법의 경우와 마찬가지로 시간 30초를 4단계로 나누어 가시화 하였다. 시간이 지날수록 0.748, 0.778, 0.792로 상대밀도가 증가함을 알 수 있었고, 최종적인 상대밀도는 0.816이었다.

Fig. 8은 E와 E_h 를 사용하여 해석한 상대밀도를 Jiang 등[3]의 실험값과 비교한 것이다. 상대밀도에 따른 변화된 물성치를 해석에 도입한 연속체적 접근이 마이크로 공학적 접근 보다 실험값에 더 근접한 결과를 얻을 수 있었다. E_h 를 사용하여 해석한 연속체 접근의 상대밀도가 초기에 급상승하는 이유는 초기의 분말 성형체의 상대밀도가 낮은 상태, 즉 기공률이 높은 상태에서 계산된 E_h 가 작은 값을 나타내지만 상대밀도가 증가함에 따라 E_h 가 급격히 증가하게 되고 이에 따라 상대밀도도 증가하기 때문이다.

Fig. 9는 다양한 마찰계수에서 성형된 모양을 나타내고 있다. 분말과 다이 사이의 마찰계수를 고정시키고 분말과 분말 사이의 마찰계수를 각각 0.4, 0.6, 0.8로 변화시키며 해석을 수행하였다. 마찰계수가 0.4일 때는 상대밀도가 0.816, 마찰계수 0.6일 때는 상대밀도 0.827, 마찰계수 0.8일 때는 상대밀도 0.831을 얻었다. 그리고

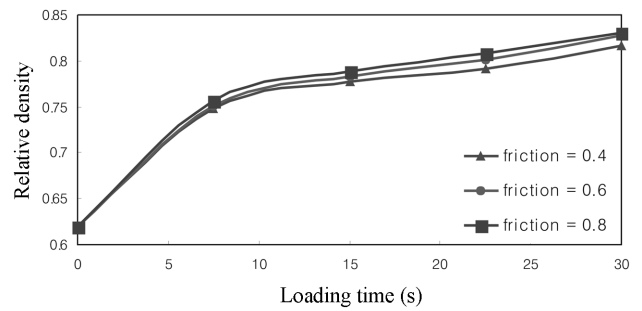


Fig. 10. Comparison of relative density among friction coefficients 0.4, 0.6, and 0.8.

Fig. 10은 각각의 마찰계수에서 성형 시간에 따른 상대밀도의 변화를 나타낸다.

4. 결 론

Quasi-random multi-particle array를 도입하여 세라믹 분말의 비주기성과 임의성을 고려하였고 임의의 초기밀도를 갖는 압축 분말체를 모델링하였다.

또한, 균질화법을 도입하여 마이크로 레벨의 정확한 해석을 위한 매크로 레벨의 등가물성치를 계산할 수 있었다. 즉, 균질화법을 사용하여 기공률을 고려한 물성치를 계산할 수 있었으며 이를 이용한 해석 결과가 일반적인 물성치를 이용한 결과보다 실험값에 더욱 접근함을 알 수 있었다.

그리고, 세라믹 분말들간의 마찰계수를 변화시켜 해석함으로써 분말 가압 성형 공정에서 마찰계수에 따른 상대밀도의 변화를 알 수 있었다.

후 기

본 연구는 한양대학교 세라믹공정연구센터를 통한 한국과학재단 우수연구센터 지원금에 의한 것입니다.

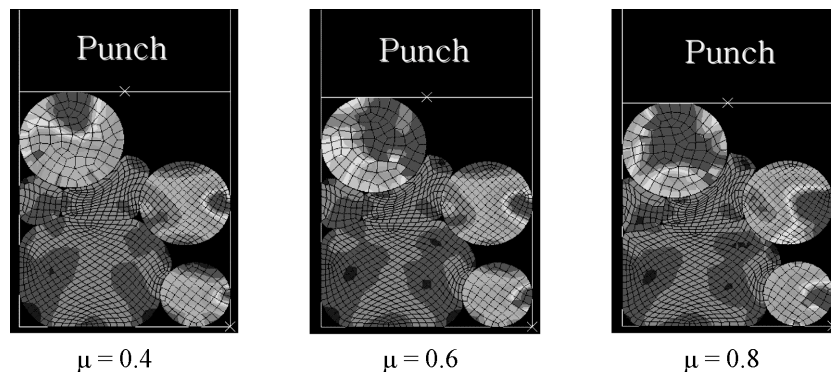


Fig. 9. Formed shapes associated with various friction coefficients (μ) between powder particles.

참 고 문 헌

- [1] W. Wu, G. Jiang, R.H. Wagoner and G.S. Daehn, "Experimental and numerical investigation of idealized consolidation part 1: Static compaction", *Acta Mater* 48 (2000) 4323.
- [2] G. Jiang, W. Wu, G.S. Daehn and R.H. Wagoner, "Experimental and numerical investigation of idealized consolidation part 2: Cyclic compaction", *Acta Mater* 48 (2000) 4331.
- [3] X.J. Xin, P. Jayaraman, G. Jiang, R.H. Wagoner and G.S. Daehn, "Explicit finite element method simulation of consolidation of monolithic and composite powders", *Metallurgical and Materials Transactions A* 33A (2002) 2649.
- [4] N. Zahlan, D.T. Knight, A. Backhouse and G.A. Leiper, "Modeling powder compaction and pressure cycling", *Powder Technology* 114 (2001) 112.
- [5] H. Zipse, "Finite-element simulation of the die pressing and sintering of a ceramic component", *Journal of European Ceramic Society* 17 (1997) 1707.
- [6] T.A. Deis and J.J. Lannutti, "X-ray computed tomography for evaluation of density gradient formulation during the compaction of spray-dried granules", *Journal of the American Ceramic Society* 81(5) (1998) 1237.
- [7] P. Lu and J.J. Lannutti, "X-ray computed tomography and mercury porosimetry for evaluation of density evolution and porosity distribution", *Journal of the American Ceramic Society* 83(3) (2000) 518.
- [8] P.K. Lu and J.J. Lannutti, "Effect of density gradients on dimensional tolerance during binder removal", *Journal of the American Ceramic Society* 83(10) (2000) 2536.
- [9] P.K. Lu and J.J. Lannutti, "Density gradients and sintered dimensional tolerance in compacts formed from spray-dried alumina", *Journal of the American Ceramic Society* 83(6) (2000) 1393.
- [10] C.M. Kong and J.J. Lannutti, "Effect of agglomerate size distribution on loose packing fraction", *Journal of the American Ceramic Society* 83(9) (2000) 2183.
- [11] B.J. Briscoe and S.L. Rough, "The effect of wall friction on the ejection of pressed ceramic parts", *Powder Technology* 99 (1998) 228.
- [12] B. Hassani and E. Hinton, "A review of homogenization and topology optimization II analytical and numerical solution of homogenization equations", *Comput. Str.* 69 (1998) 719.
- [13] N. Takano, Y. Uetsuji, Y. Kashiwagi and M. Zako, "Hierarchical modeling of textile composite materials and structures by the homogenization method", *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 7 (1999) 207.
- [14] N. Takano, M. Zako and M. Ishizono, "Multi-scale computational method for elastic bodies with global and local heterogeneity", *J. Comput.-Aided Mater. Design.* 7 (2000) 111.
- [15] S. Turenne and P.E. Mongeon, "Comparison of the properties of aluminum matrix composites produced by compaction and powder injection molding", *Advances in powder metallurgy & particulate materials-1995* (1995) 155.