

〈논 문〉

합금의 방향성주조에 대한 미시적-거시적 해석

유 호 선*

(1997년 1월 3일 접수)

Micro-Macroscopic Analysis on the Directional Casting of a Metal Alloy

Hoseon Yoo

Key Words : Directional Casting(방향성주조), Micro-Macroscopic Model(미시적-거시적 모델), Solute Diffusion(용질확산), Eutectic Fraction(공정분율)

Abstract

A micro-macroscopic analysis on the conduction-controlled directional casting of Al-Cu alloys is performed, in which emphases are placed on the microstructural features. In order to facilitate the solution procedure, an iterative micro-macroscopic coupling algorithm is developed. The predicted results show that the effect of finite back diffusion on the transient solidification process in comparison with the lever rule depends essentially on the initial concentration of an alloy. In the final casting, the eutectic fraction is distributed in an increasing-decreasing-increasing pattern, each mode of which is named the chill, interior and end zones. This nonuniformity *per se* suffices to justify the necessity of this work because it originates from the combined effects of finite back diffusion and cooling path-dependent nature of the eutectic formation. As the cooling rate is enhanced, not only the influence depths of boundaries narrow, but also the eutectic fractions in the chill and interior zones increase. In addition, it is revealed for the first time that the microsegregation band is formed in response to a sudden change in cooling rate during the directional casting. An increasing change creates an overshooting band in the eutectic fraction distribution, and vice versa.

기호설명

a	: 상수	h	: 엔탈피
C	: 농도	h_{fm}	: 단위질량당 응고잠열
\bar{C}	: 평균농도	h_{fv}	: 단위체적당 응고잠열
c	: 비열	k	: 열전도율
D	: 물질확산율	k_p	: 평형분배계수
f	: 질량분율	Le	: Lewis수, $Le = k / (\rho c_i D_i)$
g	: 체적분율	m	: 액상선의 평균기울기
H	: 주물충전 높이	s	: 미시적 상경계면의 위치
		T	: 온도
		T_∞	: 냉각유체 온도
		t	: 시간
		U	: 열관류율

*회원, 숭실대학교 기계공학과

X	: 미시적 체적요소의 크기
x	: 미시적 좌표
z	: 거시적 좌표
γ	: 표면에너지
λ_1	: 1차 수지상가지 간격
λ_2	: 2차 수지상가지 간격
ρ	: 밀도
ω	: 이완계수

상첨자

Al	: 알루미늄
Cu	: 구리
i	: 반복수
new	: 새로운 값

하첨자

0	: 초기상태
c	: 수지상응고 시작
e	: 공정응고
eut	: 공정상태
f	: 수지상응고 종료
i	: 미시적 상경계면
k	: 고액상을 대표
l	: 액상
liq	: 액상선
s	: 고상
SL	: 용해도한계

1. 서 론

합금의 수지상응고시 생성되는 미세조직은 최종 주물의 기계적 성질과 직결되기 때문에⁽¹⁾ 응고조건에 따른 미세조직의 예측은 재료공정에 있어서 관심의 대상이 되는 과제중의 하나이다. 수지상응고는 결정입자에서 주형의 크기까지 광범위한 길이차원에 걸쳐 일어나므로 응고 미세조직의 예측을 위한 모델링도 서로 다른 특성길이를 갖는 물리적 현상 사이의 복잡한 상호작용을 최대한 고려하는 방향으로 모색되고 있다. 근래 제안된 합금응고의 미시적-거시적 모델^(2,3)은 이러한 노력의 일환으로서, 그 핵심은 보다 실제에 근접한 미세조직적 특성을 파악하기 위하여 역확산, 수지상가지의 조대화, 핵생성, 과냉 등 수지상응고에 관련된 모든 미시적

메커니즘을 거시적인 열 및 물질전달과 연계시켜 해석하는데 있다.

다양한 형태로 개발된 미시적-거시적 모델중에서 Wang 과 Beckermann 의 다상모델(multiphase model)⁽⁴⁾이 비교적 체계적이며 정교한 것으로 알려져 있다.⁽⁵⁾ 적절한 크기의 거시적 검사체적에 대하여, 물리적인 고액상은 물론 특성길이가 상이한 현상까지 별개의 상으로 구분하고, 체적평균기법을 이용하여 각 상에 대한 미시적 보존원리와 상경계면을 통한 물리량의 이동을 동시에 만족하는 거시적 방정식을 공식화하였다. 접근방법의 관점에서 수지상구조내에 존재하는 미시적 현상을 효과적으로 반영할 수 있는 능력을 갖고 있으며, 실제로도 미시적 용질재분배⁽⁶⁾ 및 거시편석 생성의 예측에⁽⁷⁾ 어느 정도 성공적으로 적용된 바 있다. 그러나, 최근 다상모델의 중요한 구성요소인 고상내 용질확산식에서 수지상가지의 조대화가 불완전하게 고려된 사실이 발견되었다.⁽⁸⁾ 미시적-거시적 연계 역할을 하는 국소 고상분율이 용질확산식에서 결정되고 고상분율은 조대화와 직접적으로 연관되므로 이 불확실성은 모델의 전반적인 예측결과에 상당한 오류를 초래할 수 있다. 다행히 조대화뿐만 아니라 역확산까지 엄밀히 고려된 새로운 용질확산모델이 개발되었으며, 그 결과 지적된 문제점은 잘 알려진 실험치⁽⁹⁾에 비하여 수지상응고 종료시 공정분율을 과대 예측하는 원인임이 규명되었다.⁽⁸⁾

방향성주조는 가스터빈 날개와 같이 균일하면서도 일방향적인 미세조직이 요구되는 재질의 생산시 이용되는 제어응고의 한 방법으로서 Bridgman공정에 비하여 엄가인 것이 장점이다.⁽¹⁾ 기존의 방향성주조에 대한 대부분의 연구는 열농도대류 또는 체적수축유동에 의한 거시편석의 생성에 초점을 맞추었을 뿐⁽¹⁰⁾ 주물의 미시적 균질성과 기계적 성질이 평가될 수 있는 미세조직의 예측을 지향하지는 않았다. 방향성주조에 있어서 실험⁽¹¹⁾ 및 수치적으로⁽¹²⁾ 규명된 다른 하나의 관심사는 냉금(chill)에서 냉각속도를 급격히 변화시킬 때 양 또는 음의 거시편석대(macrosegregation band)가 초래되는 점이다. 같은 원인이 미시편석의 생성에도 어떤 형태로든 영향을 미칠 것으로 예상되지만 이에 관한 연구결과가 발표된 바는 없다. 미시적 용질재분배가 완전히 배제된 연속체모델⁽¹³⁾과 같은 거시적 접근방법으로는 미세조직의 예측이 본질적으로 불가능할뿐 아니라 이미 상당한 문제점이 확인된 다상

모델에 의존하여 해석을 시도하는 것도 무의미하게 보인다.

본 연구는 새로운 용질확산모델⁽⁸⁾을 미시적 요소로 채용한 미시적-거시적 접근방법을 확립하고, 열농도대류가 억제된 Al-Cu 합금의 방향성주조 시스템에 적용하여 주물의 미세조직적 특성을 규명하는데 그 목적이 있다. 이를 위하여 해석방법의 확립과 함께 효율적인 미시적-거시적 연계를 위한 수치적 알고리즘의 개발을 병행한다. 기본적인 응고과정에 대한 초기농도 및 역확산의 영향을 고찰함으로써 접근방법의 유용성을 보이고, 주물내 공정분율의 분포로부터 미시적 응고거동을 파악한다. 또한 냉각속도의 급격한 변화에 따른 미시편석대의 생성을 확인하고 그 원인을 규명하고자 한다. 여기서 해석대상으로 Al-Cu 합금을 선정한 것은 물성치, 상평형선도, 조대화모델 등이 잘 확립되어 있어 취급이 용이할뿐 아니라 후술될 농도구배의 발달이 억제되는 성질을 이용하기 위함이다.

2. 해 석

2.1 해석대상 시스템

본 연구의 해석대상인 방향성주조 시스템이 Fig. 1에 개략적으로 도시되어 있다. 높이 H 인 단열주형내에 최초 액상인 Al-Cu합금이 온도 T_0 와 농도 C_0 로 충전된 상태에서, 공정온도 T_{cut} 보다 낮은 온도 T_{in} 인 냉각유체가 주형밀면에 위치한 냉금을 통하여 순환하면 응고가 시작된다. 냉각열량은 냉각유체와 냉금면사이의 열관류율 U 의 향으로 표시되므로 냉각속도는 U 에 의해 제어된다.^(7,14) 응고가 진행되면 거시적으로는 Fig. 1의 우반부와 같이 액상선 및 고상선을 경계로 고상, 머시 및 액상이 나타나며, 미시적으로는 Fig. 1 좌반부와 같이 주상

수지상정이 온도구배 방향으로 액상선까지 성장하고 공정온도에서 수지상간 액체는 공정응고한다.

밀면이 냉각되고 수지상응고시 배출되는 용질(Cu)의 밀도가 용매(Al)보다 크므로 각각 안정된 온도 및 농도구배가 형성되며, 이에 따라 열농도대류는 일어나지 않는다. 결과적으로, 체적수축이 없다고 전제하면, 시스템내의 거시적인 열전달은 전도에 의해 지배된다.

해석대상을 보다 단순화하기 위하여 시스템의 기본특성이 유지되는 범위내에서 다음과 같은 기본가정을 도입하였다.

(1) 거시적인 용질의 이동은 없다. 따라서 평균농도는 균일하며 거시편석은 없다. 대류가 없을 때 거시적 용질확산이 무시될 수 있다는 사실은 이미 검증되었으며,^(4,6) 일반적인 합금의 $Le=10^4 \sim 10^5$ 인 사실이 이를 뒷받침한다. 그러나 수지상구조내 용질재분배의 관건이 되는 미시적 용질확산 즉 역확산은 그 특성길이가 극히 작기 때문에 그대로 존재한다.⁽⁴⁾

(2) 수지상간 액체의 국소농도는 온도만의 함수로서 선단과냉은 없다. 온도에 따라 차이가 있지만, Al-Cu 합금의 액상 물질확산율은 고상의 $10^3 \sim 10^4$ 배 정도이므로, 급속응고가 아닌 조건에서 액상내의 농도구배는 안전하게 무시될 수 있음이 확인된 바 있다.⁽¹⁵⁾

(3) 밀도 ρ 와 고상 물질확산율 D_s 를 제외한 다른 물성치는 상에 따른 차이는 허용하되 온도에 대해서는 불변이다. 고상 물질확산율은 추후 Table 1에 제시되듯이 온도의 강한 함수이다. 그리고 용질과 용매 사이의 큰 밀도차와 고액상의 농도차로 인한 밀도차를 함께 고려하기 위하여 밀도의 농도의 의존성을

$$\rho_k = \rho^{Al} \rho^{Cu} / [(1 - C_k) \rho^{Cu} + C_k \rho^{Al}] \quad (k = s, l) \quad (1)$$

와 같이 도입하였다. 식 (1)은 고액밀도차는 허용하되 체적은 불변인 즉 체적수축으로 인한 유동을 배제하는 유용한 밀도모델이다.^(14,15)

(4) 2차 수지상까지의 조대화는 다양한 조대화모델 중 실제 거동을 잘 반영하는 것으로 알려진^(15,17) Roosz 등의 경험식⁽¹⁶⁾

$$[X(t)]^3 = 13.125 \int_0^t \frac{\gamma D_i T}{m(1 - k_D) h_{jv} C_i} dt \quad (2)$$

에 의존한다. 여기서 $X(t)$ 는 Fig. 2에서 기술될

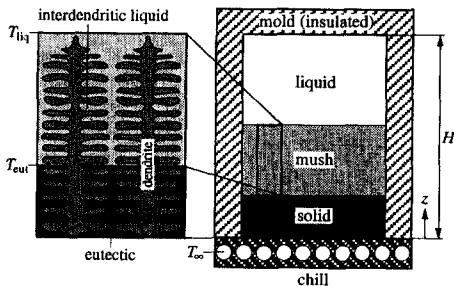


Fig. 1 Schematic of the present directional casting system.

미시적 체적요소의 크기이다.

2.2 용질확산모델

미시적-거시적 해석의 미시적 요소가 되는 새로운 용질확산모델에 관한 구체적인 내용은 이미 발표된 바 있기 때문에⁽⁸⁾ 여기서는 그 요점만을 간략히 기술하기로 한다. 미시적 특성길이보다는 크고 시스템의 크기보다는 충분히 작아서 부여된 시간간격 동안 안전하게 열적평형에 도달할 수 있는 Fig. 2(a)와 같은 거시적 검사체적을 고려할 때, 그 내부의 미시적 거동은 평균적인 의미에서 균일한 것으로 간주될 수 있다. 따라서 거시적 검사체적의 고상분율은 Fig. 2(b)에 도시된 대표적인 미시적 체적요소내의 용질재분배로부터 결정될 수 있다. 미시적 특성길이를 2차 수지상가지 간격 $\lambda_2(t)$ 로 취할 때,^(4,6,8,17) 그 절반크기 $X(t)$ 를 갖는 미시적 체적요소는 고액2상으로 구성되며 조대화로 인하여 시간에 따라 확장된다.

고상내 포물선형 농도분포를 갖는 1차원 평면구조의 2차 수지상가지 형상에 대하여 적분형의 고상내 용질보존식을 이용하면^(4,6,8) 미시적 체적요소내의 용질재분배는 다음 식으로 기술된다.

$$\frac{d}{dt} (s\bar{C}_s) = C_{si} \frac{ds}{dt} + \frac{3D_s}{s} (C_{si} - \bar{C}_s) \quad (3)$$

여기서 $s(t)$ 는 미시적 상경계면의 위치이며, 국소

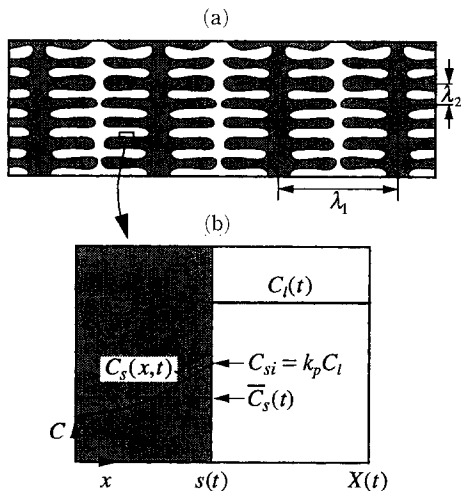


Fig. 2 Volume elements used for describing (a) the macroscopic and (b) the microscopic solidification characteristics.

상평형관계로부터 $C_{si} = k_p C_i$ 이다. 고상체적분율의 정의 $g_s = s/X$ 를 적용하면 식 (3)은

$$\frac{d}{dt} (g_s \bar{C}_s) = C_{si} \frac{dg_s}{dt} + \left[\frac{3D_s}{g_s X^2} + g_s \left(\frac{1}{X} \frac{dX}{dt} \right) \right] (C_{si} - \bar{C}_s) \quad (4)$$

로 변환된다. 식 (4)는 다상모델⁽⁴⁾과 비교하여 접근방법만 상이할뿐 거의 같은 가정하에서 공식화되었음에도 우변 대괄호내 제2항을 통하여 조대화가 현시적으로 잘 반영된 형태이다.

식 (4)의 변수인 고상체적분율 g_s 와 고상평균농도 \bar{C}_s 를 구하기 위해서는 추가적인 방정식이 필요하다. 기본가정 (1)과 (2)로부터 미시적 체적요소내의 용질보존은

$$\frac{d}{dt} (\rho_s g_s \bar{C}_s) + \frac{d}{dt} (\rho_l g_l C_l) = 0 \quad (5)$$

로 표현되며, 그 초기조건은 $g_s = 0$ 및 $\bar{C}_s = C_{si}$ 이다. 따라서, 거시적 검사체적의 온도 $T(t)$ 가 주어지면, 액상농도 $C_l(T)$ 와 평형분배계수 k_p 는 합금의 상평형선도에서, 각 상의 밀도는 식 (1)에서, 조대화는 식 (2)에서 결정되므로 식 (4)와 (5)의 해를 구할 수 있다. 또한 각 상의 체적분율에 대응하는 질량분율은 다음식에서 계산된다.

$$f_k = \rho_k g_k / \rho \quad (k = s, l) \quad (6)$$

여기서 기본가정 (1)에 의해 $\rho = g_s \rho_s + g_l \rho_l = \rho_0$ 과 같이 체적요소내의 평균밀도는 불변임에 유의하기 바란다.

2.3 미시적-거시적 해석

용질확산모델로부터 각 거시적 검사체적내의 모든 미시적 정보는 연립 상미분방정식 식 (4)와 (5)의 해로써 구해진다. 거시적 용질이동이 없는 본 연구의 경우 이를 위한 유일한 입력은 검사체적의 온도 $T(t)$ 이지만, 그 온도는 미시적 정보와 연계되어 있으므로 양자는 동시에 결정되어야 한다.

거시적 검사체적의 온도는 현열엔탈피를 종속변수로 취할 때

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{\rho c_s} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (f_l \Delta h) \quad (7)$$

와 같은 1차원 열전도 방정식에 의해 지배된다. 여기서

$$h = c_s (T - T_{eut}) \quad (8)$$

$$\Delta h = (c_l - c_s)(T - T_{eut}) + h_{fm} \quad (9)$$

$$k = g_s k_s + g_l k_l \quad (10)$$

로 정의되었다.⁽¹⁸⁾ 이에 대한 초기 및 경계조건은 각각

$$h = c_s(T_0 - T_{eut}) \text{ at } t=0 \quad (11)$$

$$\frac{\partial h}{\partial z} = \frac{U}{k}(h - h_{\infty}) \text{ at } z=0 \quad (12)$$

$$\frac{\partial h}{\partial z} = 0 \text{ at } z=H \quad (13)$$

이다. 식 (7)에서 용질확산모델의 g_s 로부터 식 (6)을 거쳐 결정되어야 할 액상질량분율 $f_l (=1-f_s)$ 이 미시적-거시적 연계의 핵심요소이다.

식 (4)와 (5) 및 식 (7)을 연립적으로 해석하기 위하여 성질이 서로 다른 수지상응고와 공정응고를 구분하여 취급하였다. 수지상응고에 대해서는 다음과 같은 독자적인 미시적-거시적 연계알고리즘을 개발하였다.

- (1) 전 시간스텝에서의 f_s 를 적용하여 식 (7)의 해 h 를 구한다.
- (2) 각 거시적 검사체적의 h 에 대하여 식 (8)로부터 T 를 구한 상태에서
 - (a) $f_s=1$ 이면, 그대로 단계 (3)으로 진행한다.
 - (b) $T \geq T_{liq}$ 이면, $f_s=0$ 으로 부여하고 단계 (3)으로 진행한다.
 - (c) $T \leq T_{eut}$ 이고 $f_s < 1$ 이면, 공정응고로 이동한다.
 - (d) $T_{eut} < T < T_{liq}$ 이고 $f_s < 1$ 이면, 상평형선도에서 T 에 대응하는 C_l 과 C_{sl} 를, 식 (2)에서 $X(t)$ 를 결정한 후 식 (1)을 이용하여 식 (4)와 (5)의 해를 구하고 식 (6)에서 f_s 를 계산한다.
- (3) 새로운 f_s 를 적용하여 식 (7)의 새로운 해 h 를 구한다.
- (4) 단계 (2)~(3)을 반복하여 해의 변화가 없으면 다음 시간스텝으로 진행한다.

이 알고리즘 수렴성은 단계 (2)에 기술된 질량분율의 갱신방법에 크게 의존한다. 식 (9)로 정의된 식 (7) 우변의 Δh 항이 대단히 크기 때문에 f_s 의 작은 변화에도 h 가 민감하게 반응한다. 따라서, 특히 f_s 의 변화가 급격한 수지상응고 초기에는, 기존의 거시적 모델에서도 보고된 바와 같이⁽¹⁸⁾ h 가 진동 또는 발산할 가능성이 대단히 크다. 이를 방지하고 수렴성을 향상시키기 위하여 다양한 수치실

험을 거쳐 다음과 같은 안정화기법을 도입하였다.

$$f_s^{i+1} = f_s^i + \omega(f_s^{new} - f_s^i) \quad (14)$$

여기서 상첨자 i 는 반복수로서 f_s^{new} 와 f_s^{i+1} 는 각각 단계 (2)에서 결정된 질량분율과 단계 (3)에 적용되는 질량분율이다. 물론 수렴시 $f_s^{i+1} = f_s^i = f_s^{new}$ 이다. 식 (14)의 이완계수 ω 는 f_s 의 변화에 효과적으로 대응할 수 있도록 $\omega = a f_s^i$ (a 는 상수)로 취하였다. 또한 시간스텝도 주조초기의 급격한 변화 및 냉각속도의 영향을 감안하여 적절히 조정되어야 한다.

2.4 공정응고

전술한 단계 (2c)와 관련하여, 공정응고시 질량분율의 갱신은 비교적 용이하다. 시스템이 공정응고에 도달하면 수지상응고가 종료되고, 이때 $f_s < 1$ 이면 수지상간 액체는 T_{eut} 및 C_{eut} 를 유지하면서 공정응고한다. 공정응고동안 고상분율은 순수물질처럼 변화하기 때문에, 본 연구에서는 순수물질의 상변화를 위하여 개발된 new source scheme⁽¹⁹⁾에 의존하였다. 다만 공정응고시는 순수물질의 경우와는 달리 Fig. 3과 같이 수지상 및 공정이 혼재하기 때문에 질량분율과 체적분율 사이의 관계 유도에 상당한 주의를 요한다. Fig. 3을 참조할 때 공정응고 중 고상체적은 수지상 및 공정으로

$$g_s = (1 - g_{eut}) + g_{s,e} \quad (15)$$

와 같이 구성되며, 질량분율과는 다음의 관계가 있다.

$$f_s = \frac{(1 - g_{eut})\rho_s + g_{s,e}\rho_{eut}}{(1 - g_{eut})\rho_s + g_{eut}\rho_{eut}} \quad (16)$$

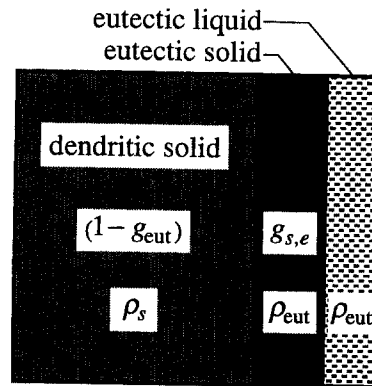


Fig. 3 Details of the eutectic reaction process in the microscopic volume element.

여기서 ρ_s 는 수지상응고 종료시 고상평균농도에 대응하는 밀도로서 공정응고 시작후에는 불변이다.

수지상응고 종료시 미응고된 액상은 결국 공정조직이 된다. 이에 대응하는 공정분율은 방향성주조에 대한 미시적-거시적 해석에서 얻을 수 있는 가장 의미있는 결과 중의 하나이다. 즉 국소 고(액)상분율은 수지상응고 중 역확산 및 조대화와 같은 미시적 메커니즘뿐 아니라 냉각경로, 국소 수지상응고 시간 등 거시적 거동의 영향을 동시에 받기 때문에, 공정분율은 제인자의 전체 응고과정에 대한 누적된 효과를 나타낸다. 또는 공정고체의 농도가 수지상고체에 비하여 대단히 높다는 점만으로도 공정분율에 충분한 공학적 의미가 부여될 수 있다. 따라서 공정질량분율 f_{eut} 는 미세조직적 특성의 지표로서 보편적으로 사용되어 왔으며,^(6,7,9,15,17) 본 연구도 이에 따르기로 한다.

3. 결과 및 고찰

3.1 계산조건

지금까지 제시된 미시적-거시적 해석방법 및 연계알고리즘을 방향성주조 시스템에 적용하여 구체적인 계산을 수행하였다. 계산시 응고조건 또는 특성인자의 수를 제한하기 위하여 주물의 충전높이, 초기온도 및 냉각유체온도는 각각 $H=0.5$ m, $T_0=950$ K 및 $T_\infty=300$ K로 고정하였다. 다만 미시편석에 대한 영향이 현저한⁽¹⁾ 초기농도는 Al-Cu 합금의 용해도한계 ($C_{sl}=5.65$ mass %)를 중심으로 $C_0=4.5$ 및 9.0 mass % 2경우를 취급하였다. 또한 식 (3)으로 표시된 조대화모델의 상평형선도 의존

성과 일관성을 유지하기 위하여 비선형 액상선을 적용하였다. 그외 계산에 사용된 물성치는^(15,17) Table 1에 요약되어 있다.

미시적-거시적 해석과 기존의 거시적 해석 사이의 핵심적인 차이는 미시적 용질재분배의 고려여부에 있다. 기존의 해석에서는 $D_s=\infty$ 를 가정한 lever rule에만 의존할 수 밖에 없었으나, 조건에 따른 정도의 차이는 있지만, 실제로는 오히려 $D_s=0$ 에 근접하다는 사실이 실험적으로 규명된 바 있다.⁽⁹⁾ 본 연구에서는 역확산의 영향을 구체적으로 보이기 위하여 $D_s=0$, 유한 (Table 1의 값) 및 무한대인 3경우를 취급하였다. 일반적으로 수지상고체내 농도분포가 균일한 $D_s=\infty$ 인 경우는 평형응고, 불균일한 $D_s=0$ 및 유한한 경우는 비평형응고로 지칭된다.^(1,9)

계산에 필요한 검사체적의 수를 결정하기 위하여 예비계산을 수행한 결과 본 연구의 조건에 대하여 50개 이상이면 계산결과는 거의 불변이었다. 결과의 정밀도를 고려하여 100개의 검사체적에 대하여 실제계산을 수행하였으며, 수지상가지의 조대화 정도를 고려하여 냉금부분에 조밀하게 배치하였다. 검사체적의 평균크기는 약 5×10^{-3} m로서 2.2절에서 기술된 조건을 충분히 만족시킨다.

3.2 기본 응고특성 및 공정생성에 대한 역확산의 영향

각 초기농도에 대하여 수지상응고중인 머시영역이 공간적으로 넓게 나타나는 서냉조건 ($U=3 \times 10^2$ W/m²K) 하에서 응고시작후 2000 s가 경과하였을 때 온도 및 고상분율 분포를 Fig. 4와 5에 도시하였다. 먼저, 역확산의 영향은 초기농도 C_0 에 따라

Table 1 Thermophysical properties of Al-Cu alloy system.

Property	Value
Density of aluminum, ρ^{Al} [kg/m ³]	2550
Density of copper, ρ^{Cu} [kg/m ³]	7670
Specific heat, c_l ; c_s [J/kgK]	1179; 766
Thermal conductivity, k_l ; k_s [W/mK]	77; 153
Liquid mass diffusivity, D_l [m ² /s]	5×10^{-9}
Solid mass diffusivity, D_s [m ² /s]	$0.29 \times 10^{-4} e^{-15610/T}$
Latent heat, h_{fm} [J/kg]; h_{fv} [J/m ³]	4.28×10^5 ; 1.07×10^9
Eutectic composition, C_{eut} [mass %]	33.2
Eutectic temperature, T_{eut} [K]	821.2
Surface energy per unit area, γ [J/m ²]	0.093

상이한 형태로 나타난다. 즉 $0 < C_0 < C_{SL}$ 인 Fig. 4에서 공정은 평형응고시는 생성되지 않고 비평형응고시에만 생성됨에 비하여, $C_{SL} < C_0 < C_{eut}$ 인 Fig. 5에서는 모든 경우 공정이 생성된다. 따라서 전자의 경우 역확산은 거시적인 미시영역의 폭을 현저히 변화시킨다. 또한, 초기농도에 무관하게 유한한 D_s 에 대응하는 f_s 의 분포는 일관성 있게 두 극한에 대한 결과 사이에 있으나, $D_s=0$ 인 경우에 보다 근접하다. 이 두 가지 사실은 미세조직적 특성을 떠나 거시적 관점에서도 실제 수지상응고는 lever rule에 의해서 충분히 해석될 수 없음을 의미한다. 일견 D_s 에 따른 f_s 의 차이는 크지 않아 보이지만, 만일 응고과정에 자연대류가 수반된다면, Carman-Kozeny식으로 대표되는 수지상간 액체의 투과율은 액상선부근에서 액상분율에 대단히 민감하기 때문에, ⁽²⁰⁾ 그 차이는 유동장에 본질적인 변화를 초래할 수 있는 정도이다. 한편 각 D_s 에 대응하는 f_s 의 상대적 크기는 미시영역내의 위치에 따라 한번 반

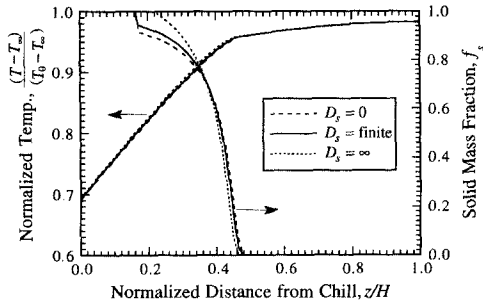


Fig. 4 Effect of back diffusion on the temperature and solid fraction distributions for $C_0=4.5$ mass % at $t=2000$ s after the beginning of solidification under $U=3 \times 10^2$ W/m²K.

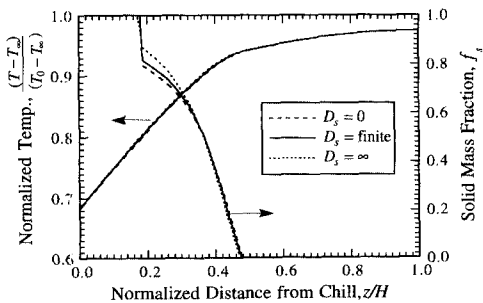


Fig. 5 Effect of back diffusion on the temperature and solid fraction distributions for $C_0=9.0$ mass % at $t=2000$ s after the beginning of solidification under $U=3 \times 10^2$ W/m²K.

전됨에도 불구하고, $D_s=0$ 에 대한 온도가 가장 낮다. 이는 $D_s=0$ 인 경우 미시영역내 f_s 의 평균값이 가장 작아서 응고잠열 방출이 최소이기 때문이다.

역확산이 미세조직의 생성에 미치는 영향을 고찰하기 위하여 $U=10^3$ W/m²K일 때 수지상응고 종료시 공정분율 f_{eut} 의 분포를, 주형이 반무한인 경우에 대한 결과와 함께, Fig. 6에 도시하였다. 여기서 $D_s=\infty$ 즉 lever rule에 의한 f_{eut} 는 당연히 균일하므로 무의미하다. 초기농도에 무관하게 유한한 D_s 에 대한 f_{eut} 는 냉금으로부터 주형 끝 방향으로 증가-감소-증가하는 특징적인 추이를 보인다. 또한 $D_s=0$ 에 대한 결과도 증가-일정-증가이지만 정성적으로는 D_s 가 유한한 경우와 유사하다. 이러한 특징으로부터 주물을 냉금, 내부 및 말단의 3개 영역으로 구분하고 불균일한 분포의 원인을 규명하기로 한다. 적어도 말단영역에서 f_{eut} 의 증가는 함께 도시된 반무한 주형에 대한 결과가 D_s 의 값에 무관하게 단조변화하는 점으로부터 단열벽의 존재와 연관이 있음을 알 수 있다.

단열벽의 구체적인 영향과 다른 영역에서의 원인을 분석하기 위하여 $D_s=0$ 일 때 주물내 관심 있는 위치에서 수지상응고 기간동안 국소 냉각경로 및 고상분율 변화를 표준화하여 Fig. 7에서 비교하였다. 역확산이 있는 경우 위치에 따라 역확산이 허용되는 시간 즉 국소 수지상응고 시간 ($t_f - t_c$)이 상이하기 때문에 Fig. 7과 같은 비교의 의미가 퇴색된다. 냉금에 인접한 $z/H=0.01$ 에서는 급격한 초기 냉각에 따라 f_s 도 급증한 이후 완만히 증가한다. 내부영역인 $z/H=0.3$ 및 0.6 의 경우 냉금영역

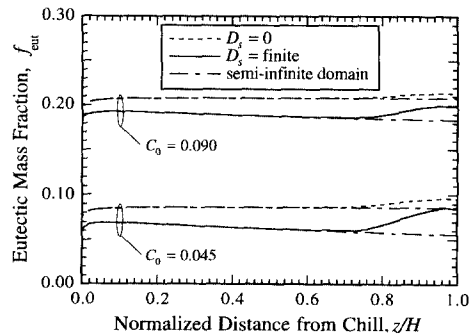


Fig. 6 Comparisons of the eutectic fraction distribution in the final casting between the actual system with an adiabatic end wall and the semi-infinite domain for both of $C_0=4.5$ and 9.0 mass % under $U=10^3$ W/m²K.

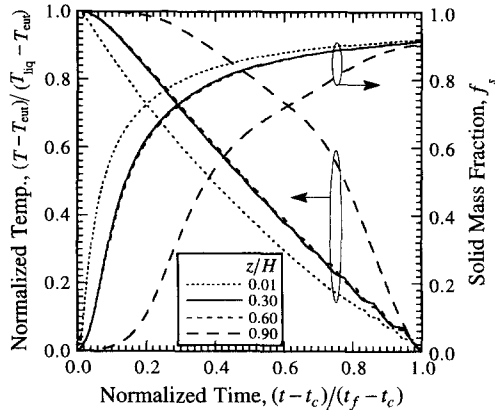


Fig. 7 Transient cooling paths and evolutions of the solid fraction during dendritic solidification in the absence of back diffusion at four different positions, corresponding to Fig. 6.

에 비하여 전반적인 형태는 유사하지만, 초기의 서냉으로 인하여 f_s 의 증가가 지연되고 그 크기도 작다. 그러나 내부영역내에서는 상당한 위치의 차이에도 불구하고 냉각경로 및 f_s 의 변화형태는 거의 일치한다. 이점은 $D_s=0$ 에 대한 Fig. 6의 내부영역내 f_{eut} 의 균일한 분포와 부합된다. 여기서 내부영역의 응고후기에 나타나는 계단형태의 온도변화는 수치해의 불안정성이 아니라 냉금방향 인접 검사체적이 등온의 공정응고를 하기 때문에 나타나는 현상이다. 말단영역인 $z/H=0.9$ 에서는 서냉이 상당한 시간동안 지속된 후 급냉되는 특징을 보인다. 이러한 후기 급냉은 내부영역과는 달리 말단의 단열로 인하여 추가적인 열공급이 중단되기 때문이다. 따라서 말단영역에서의 급냉은 단열벽에 가까울수록 조기에 시작될 것이다. 결론적으로, 역확산이 없음에도 불구하고 f_{eut} 분포가 불균일한 원인은, 거시적으로는 Fig. 7에서 자명하듯이 위치에 따른 냉각경로의 차이에, 미시적으로는 고정된 수치상까지 간격에 대한 Scheil식이 냉각경로에 무관하게 일정한 점으로부터 조대화에 있음을 알 수 있다. 한편 Fig. 6에서 역확산이 있는 경우 내부영역에서의 f_{eut} 감소는 냉금으로부터 이격될수록 역확산이 일어나는 수치상응고 시간이 증가하는데 기인한다. 즉 같은 위치에서 $D_s=0$ 과 유한한 경우 사이의 f_{eut} 차이가 바로 직접적인 역확산의 영향이다. 역확산이 클수록 공정분율이 감소함을 상기하기 바란다.

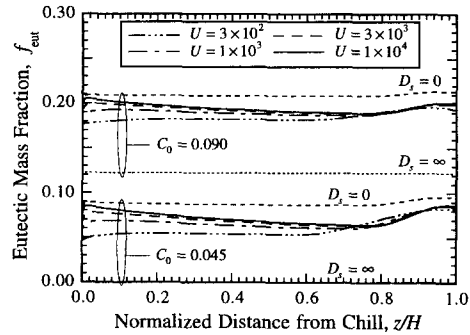


Fig. 8 Effect of cooling rate on the eutectic fraction distribution in the final casting in the presence of finite back diffusion for both of $C_0=4.5$ and 9.0 mass %.

3.3 공정생성에 대한 냉각속도의 영향

공정분율은 냉각속도 및 초기농도의 함수인 사실은 이미 잘 알려져 있다.⁽¹⁾ 이를 확인하기 위하여 냉각속도가 각각 $U=3 \times 10^2, 10^3, 3 \times 10^3, 10^4$ W/m²K인 경우에 대하여 수치상응고 종료시 f_{eut} 를 Fig. 8에 나타내었다. 초기농도는 f_{eut} 의 크기에는 현저한 영향을 미치지 않지만 위치에 따른 변화형태와는 무관하다. 환언하면 본 연구와 같은 시스템에서 초기농도와 냉각속도는 서로 독립적인 인자이며, 따라서 여기서 고찰될 냉각속도의 영향은 초기농도에 관계없이 성립한다.

단열벽부근을 제외하면 공정분율은 냉각속도에 따라 평균적으로 증가한다. 이 결과는 이미 언급하였듯이 역확산이 일어날 수 있는 냉각시간의 차이에 기인하며 추가적인 설명이 불필요하다. 다만 냉각속도가 증가할수록 인접한 냉금 및 말단영역이 축소되는 즉 주형 경계의 영향이 감소하는 점에 주목할 필요가 있다. 실제 비교된 U 의 범위내에서 최소 냉각속도에 대한 결과는 양단효과가 주형내부까지 침투하여 상당한 길이에 걸쳐 f_{eut} 가 균일하다. 반면 최대냉각속도의 경우 양단효과는 작으나 내부영역의 불균일성은 심화된다. 이와같은 고찰로부터 냉금에서 일정한 냉각속도가 부여된 방향성구조를 통하여 균일한 미세조직을 얻기는 거의 불가능하다는 점을 알 수 있다. 주조중 냉각속도의 변화를 통하여 f_{eut} 의 분포를 제어할 수 있는 가능성은 다음 절에서 발견된다.

3.4 미시편석대

서론에서 기술하였듯이 체적수축으로 인한 유동

이 존재하는 합금의 방향성주조에서 냉각속도의 급격한 변화가 거시편석대를 초래한다는 사실은 Diao와 Tsai⁽¹²⁾에 의해 구체적으로 규명된 바 있다. 여기서는 냉각속도는 같은 조건이지만 대류가 억제되어 주물내 열전달이 전도에 의해 지배될 때 나타나는 미시적 현상을 고찰하고자 한다.

Fig. 9는 $C_0=9.0$ mass %일 때 전술한 3경우의 D_s 에 대하여 응고시작후 250 s 경과한 시점에서 10s 동안 열관류율 U 가 10^3 에서 10^4 으로 선형증가후 일정하게 유지되는 조건에 대한 f_{eut} 및 수치상응고 시간의 분포이다. 설명의 편의를 위하여 D_s 가 유한한 경우에 대하여 냉각속도 변화전후의 U 값에 대응하는 f_{eut} 도 함께 도시하였다. 당연한 사실이지만 평형응고시 U 의 증가는 f_{eut} 에 아무런 변화도 초래하지 않는다. 반면 비평형응고의 경우 f_{eut} 의 overshoot 현상이 현시적으로 나타난다. 즉 냉금에서 냉각속도의 변화가 수치상응고중인 위치에 전파되면 f_{eut} 가 급격히 증가후 감소하면서 증가된 냉각속도에 대응하는 f_{eut} 의 값으로 점근적으로 접근한다. 거시편석대와 형태가 유사하고 같은 냉각속도 변화에 따른 결과라는 의미에서 이 공정분율의 특징적 분포를 미시편석대(microsegregation band)로 명명하였다. 흥미롭게도 Fig. 9에서 미시편석대의 분포범위와 냉각속도의 급증에 따른 수치상응고 시간의 감소범위가 대략적으로 일치한다. 따라서 마치 미시편석대의 생성이 국소 응고시간의 감소와 관련한 것처럼 보인다. 그러나 응고시간과는 무관한 역화산이 없는 경우($D_s=0$)에도 overshoot 현상이 그대로 나타나는 점으로부터 미시편

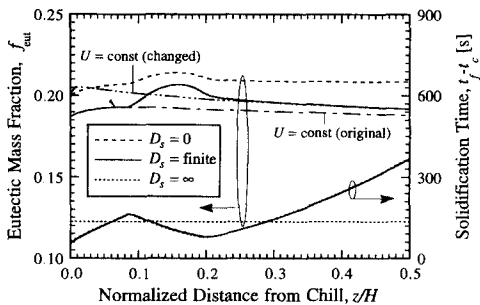


Fig. 9 Predicted eutectic fraction distributions and solidification times corresponding to three cases of back diffusion for $C_0=9.0$ mass % under a sudden increase in cooling rate: U increases linearly from 10^3 to 10^4 W/m²K in 10s at $t=250$ s and remains thereafter.

석대의 생성과 응고시간의 감소는 서로 독립적임을 알 수 있다. 이 사실은 Fig. 9와는 반대로 냉각속도가 급감할 때의 결과인 Fig. 10에서 국소 응고시간이 오히려 증가함에도 f_{eut} 의 undershoot 현상이 나타나는 점에서 확인될 수 있다.

미시편석대는 거시편석대와 같은 원인에 의해 유사한 형태로 나타나지만 그 생성메커니즘은 판이하다. 거시편석대는 냉각속도의 급증감에 따른 유동형태의 변화로 인하여 거시적 용질이동이 발생한 결과임에 비하여, ⁽¹²⁾ 미시편석대는 국소적인 냉각경로의 변형에 기인한다. 이를 검증하기 위하여 Fig. 7과 같이 $D_s=0$ 일 때 Fig. 10의 미시편석대 전후의 몇몇 위치에서 표준화된 국소 냉각경로 및 고상분율 변화를 Fig. 11에 나타내었다. 위치차이가 크지 않음에도 냉각경로 및 고상분율 변화의 형

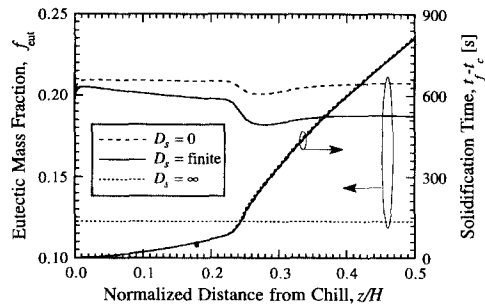


Fig. 10 Predicted eutectic fraction distributions and solidification times corresponding to three cases of back diffusion for $C_0=9.0$ mass % under a sudden decrease in cooling rate: U decreases linearly from 10^4 to 10^3 W/m²K in 10s at $t=200$ s and remains thereafter.

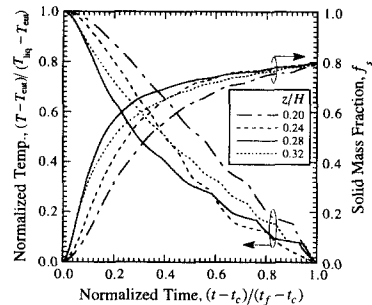


Fig. 11 Transient cooling paths and evolutions of the solid fraction during dendritic solidification in the absence of back diffusion at four different positions, corresponding to Fig. 10.

대는 현저한 차이가 있으며, 이 차이는 냉금에서 냉각속도의 변화가 특정한 위치까지 전파되었을 때 그 위치에서 수지상응고기 진행된 정도에 의존한다. 여기서 응고 중후기에 나타난 계단형태 온도변화는 전술하였듯이 냉금방향 인접 검사체적의 등온 공정응고에 기인하지만, Fig. 7에 비하여 더욱 뚜렷한 이유는 변화전 대단히 큰 냉각속도의 영향이 남아있기 때문이다. 따라서 수지상응고 말기에 냉각속도 변화의 영향을 받는 $z/H=0.32$ 의 온도변화 계단폭은 현저히 감소한다. 한편, Fig. 9와 10에서 $D_s=0$ 과 유한한 경우를 비교할 때 공통적으로 역확산은 미시편석을 심화시키는 역할을 한다.

방향성주조에서 냉각속도의 급변이 미시편석대를 초래한다는 사실을 최초로 확인하고, 그 생성은 국소 냉각경로의 변형에서 비롯됨을 규명하였다. 역확산이 없는 경우에도 미시편석대가 생성되는 점 및 고정된 수지상가지에 대한 Scheil식은 냉각경로에 무관하다는 점으로부터 결국 미시편석대는 조대화 및 직결된 현상임을 알 수 있다. 이러한 의미에서, 본 연구와 같이 조대화가 타당하게 고려된 용질확산식을 미시적 요소로 채용한 미시적-거시적 해석에 의존하지 않으면, 주물의 미세조직적 특성을 예측하기 곤란하다는 결론에 도달한다. 연관된 분야로서 거시편석대 생성의 특성인자로 알려진⁽¹²⁾ 냉각속도 변화의 시작시간 및 시간간격이 미시편석대에 미치는 영향에 관해서도 연구가 진행중이다.

4. 결 론

수지상가지의 조대화가 타당하게 고려된 새로운 용질확산모델을 적용하여 전도에 의해 지배되는 Al-Cu 합금의 방향성주조 시스템에 대하여 미시적-거시적 해석을 수행하였다. 해석과정에서 수지상응고에 대한 효율적인 미시적-거시적 연계를 위하여 반복법에 기초한 수치적 알고리즘을 개발하였다. 본 연구를 통하여 얻은 결론은 다음과 같다.

기존의 lever rule과 비교하여 수지상응고시 유한한 역확산은 고상분율의 분포에 무시할 수 없는 차이를 초래한다. 합금의 초기농도가 용해도한계보다 작을 때 더욱 현저한 이 차이는, 만일 응고과정에 대류가 존재한다면, 유동장에 상당한 변화를 야기시킬 수 있는 정도이다. 수지상응고 종료시 주물의 미세조직적 특성지표인 공정분율은 냉금으로부터 증가-감소-증가하는 형태로 분포된다. 역확산이 없

는 경우에도 나타나는 공정분율의 불균일한 분포는 상이한 국소 냉각경로와 이에 따른 고상분율의 시간변화에 기인하며, 역확산은 그 정도를 변화시키는 역할을 한다. 보다 본질적인 공정분율의 국소 냉각경로에 대한 의존성은 수지상가지의 조대화에 시 비롯되었음이 규명되었다.

초기농도에 무관하게 냉금에서의 냉각속도를 증대시키면 주물내 평균적인 공정분율은 증가하지만, 위치에 따른 분포형태는 상이하다. 냉각속도가 클수록 주형양단 경계의 영향범위는 감소하며, 위치에 따른 역확산의 차이로 인하여 주물내부 공정분율의 불균일은 심화된다. 결과적으로, 냉각속도를 일정하게 유지하면서 균일한 미세조직을 얻는 것은 불가능하다.

방향성응고중 냉각속도를 계단형태로 변화시킬 때 공정분율 분포에 overshoot 또는 undershoot와 같은 미시편석대가 생성됨을 최초로 확인하였다. 역확산이 없는 경우에도 생성되며 국소 냉각경로의 변형에 기인한 점으로부터 미시편석대는 조대화와 연관된 현상임이 분명하다. 이때 유한한 역확산은 미시편석의 정도를 심화시키는 방향으로 영향을 미친다.

이상에서 밝혀진 미세조직적 특성은 미시적-거시적 해석의 필요성을 대변하며, 타당한 용질확산모델의 확립이 선행되어야 예측결과에 신뢰성이 부여될 수 있음을 의미한다. 향후 주물의 균질성을 확보하기 위한 냉각속도의 제어, 열농도대류 또는 체적수축유동이 존재하는 경우에 대한 해석, 수지상응고 초기의 선단과냉의 영향 등에 대한 심도 있는 연구가 요망된다.

후 기

이 논문은 1995년도 교육부 학술연구조성비(기계공학 ME95-A-04)의 지원에 의한 연구결과의 일부로서 연구비 지원에 대하여 사의를 표하는 바입니다.

참고문헌

- (1) Kurz, W. and Fisher, D. J., 1989, *Fundamentals of Solidification*, Trans Tech. Publs. Aedermannsdorf, Switzerland.
- (2) Rappaz, M. and Voller, V. R., 1990, "Model-

- ing of Micro-Macroseggregation in Solidification Processes," *Metall. Trans.* Vol. 21A, pp. 749~753.
- (3) Voller, V. R., 1993, "Solidification," *In Computational Methods for Free and Moving Boundary Problems in Heat and Fluid Flow* (Edited by Wrobel, L. C. and Brebbia, C. A.), Compl. Mech. Publs. and Elsevier Appl. Sci., pp. 189~206.
- (4) Wang, C. Y. and Beckermann, C., 1993, "A Multiphase Solute Diffusion Model for Dendritic Alloy Solidification," *Metall. Trans.*, Vol. 24A, pp. 2787~2802.
- (5) Beckermann, C. and Viskanta, R., 1993, "Mathematical Modeling of Transport Phenomena During Alloy Solidification," *Appl Mech Rev*, Vol. 46, pp. 1~27.
- (6) Wang, C. Y. and Beckermann, C., 1993, "A Unified Solute Diffusion Model for Columnar and Equiaxed Dendritic Alloy Solidification," *Mat. Sci. Eng.*, Vol. A171, pp. 199~211.
- (7) Schneider, M. C. and Beckermann, C., 1995, "A Numerical Study of the Combined Effects of Microseggregation, Mushy Zone Permeability and Flow, Caused by Volume Contraction and Thermosolutal Convection, on Macroseggregation and Eutectic Formation in Binary Alloy Solidification," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 3455~3473.
- (8) Yoo, H. and Kim, C. -J., 1997, "A Solute Diffusion Model for Micro-Macroscopic Analysis of Columnar Dendritic Alloy Solidification," *KSME Int. J.*, Vol. 11, pp. 319~330.
- (9) Sarreal, J. A. and Abbaschian, G. J., 1985, "The Effect of Solidification Rate on Microseggregation," *Metall Trans.*, Vol. 17A, pp. 2063~2073.
- (10) Diao, Q. Z. and Tsai, H. L., 1993, "Modeling of Solute Redistribution in the Mushy Zone During Solidification of Aluminum-Copper Alloys," *Metall. Trans.*, Vol. 24A, pp. 963~973.
- (11) Flemings, M. C. and Nereo, G. E., 1968, "Macroseggregation: part III," *Trans. Met. Soc. AIME*, Vol. 242, pp. 50~55.
- (12) Diao, Q. Z. and Tsai, H. L., 1993, "The Formation of Negative- and Positive-Segregated Bands During Solidification of Aluminum-Copper Alloys," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, pp. 4299~4305.
- (13) Bennon, W. D. and Incropera, F. P., 1987, "A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems — I. Model formulation," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 30, pp. 2161~2170.
- (14) Prescott, P. J. and Incropera, F. P., 1991, "Numerical Simulation of a Solidifying Pb-Sn Alloy: The Effects of Cooling Rate on Thermosolutal Convection and Macroseggregation," *Metall. Trans.* Vol. 22B, pp. 529~540.
- (15) Sundarraj, S. and Voller, V. R., 1993, "The Binary Alloy Problem in an Expanding Domain : the Microseggregation Problem," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, pp. 713~723.
- (16) Roosz, A., Halder, E. and Exner, H. E., 1986, "Numerical Calculation of Micro-Segregation in Coarsened Dendritic Microstructures," *Mat. Sci. Technol.*, Vol. 2, pp. 1149~1155.
- (17) 유희선, 1996, "수지상가지의 조대화를 고려한 이원합금의 응고과정동안 용질재분배 해석," 대한기계학회 논문집, 제20권 제4호, pp. 1437~1448.
- (18) Prakash, C. and Voller, V. R., 1989, "On the Numerical Solution of Continuum Mixture Model Equations Describing Binary Solid-Liquid Phase Change," *Numer. Heat Transfer, Part B*, Vol. 15, pp. 171~189.
- (19) Voller, V. R., 1990, "Fast Implicit Finite-Difference Method for the Analysis of Phase Change Problems," *Numer. Heat Transfer, Part B*, Vol. 17, pp. 155~169.
- (20) Hopkins, J. A., McCay, T. D. and McCay, M. H., 1993, "Two-Phase Considerations for the Linear Analysis of Convective Stability During Vertical Directional Dendritic Solidification," *Heat Transfer in Porous Media*, ASME Publication HTD-Vol. 240, pp. 67~76.