

나노스케일 워터젯 가공에 대한 분자시뮬레이션 연구

이상훈¹ · 김현준² · 김태욱^{3*}

¹경북대학교 미래과학기술융합학과 석사과정

²경북대학교 미래과학기술융합학과 부교수

³경북대학교 미래과학기술융합학과 교수

Molecular Simulation of Nano-Scale Waterjet Machining

Sang-Hoon Lee¹, Hyun-Joon Kim² and Tae-Wook Kim^{3*}

¹Graduate Student, Dept. of Advanced Science and Technology Convergence, Kyungpook National University

²Associate Professor, Dept. of Advanced Science and Technology Convergence, Kyungpook National University

³Professor, Dept. of Advanced Science and Technology Convergence, Kyungpook National University

(Received October 24, 2023 ; Revised October 31, 2023 ; Accepted October 31, 2023)

Abstract – This study employs molecular dynamics simulations to investigate the material behavior of workpieces in waterjet machining processes. To gain fundamental insights into waterjet machining, simulations were conducted using pure water, excluding abrasive particles. The simulation model comprised thousands of water molecules interacting with a single crystal metal workpiece. Water molecule clusters were imparted with various velocities to initiate collisions with the metal workpiece. The material behavior of the metal surface was analyzed with respect to the applied velocity conditions, considering the intricate interplay between water molecules and the workpiece at the atomic scale. The results demonstrated that the machining of the metal workpiece occurred only when water molecules were endowed with velocities above a certain threshold. In cases where energy was insufficient, the metal workpiece exhibited a slight increase in surface roughness due to mild plastic deformation, without undergoing substantial material removal. When machining occurred, the ejection of material revealed a 3-fold symmetric pattern, confirming that material removal in waterjet machining of the metal workpiece is primarily driven by plastic deformation-induced material ejection. This research provides crucial insights into the mechanisms underlying waterjet machining and enhances our understanding of material behavior during the process. The findings can be valuable in optimizing waterjet machining techniques.



© Korean Tribology Society 2023. This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License(CC BY, <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction of the work in any medium, provided the original authors and source are properly cited.

Keywords – Machining(가공), Molecular simulation(분자시뮬레이션), Plastic deformation(소성 변형), Waterjet(워터젯), Water molecule(물분자)

1. 서 론

워터젯을 이용한 가공은 순수한 물, 혹은 연마제를 포함한 물을 고압으로 노즐을 통해 분사하여 높은 에너지를

를 피삭재에 인가함으로써 절삭, 천공, 연마 등을 수행하는 방법으로서, 금속, 암석, 복합재, 및 각종 세라믹 계통의 소재 등 다양한 종류의 소재를 가공할 수 있다는 장점이 있다[1]. 특히 연마재 워터젯 (abrasive waterjet: AWJ) 기술은 고경도, 고강도의 난삭재 가공을 용이하게 하는 기술로서 각광받고 있으며, 전통적인 절삭 공정에서 나타나는 발열 문제나 공구 마모로 인한 생산성 저하 등의 문제를 회피할 수 있다는 장점으로 인하여, 다양한 산

*Corresponding author: Tae-Wook Kim

Tel: +82-54-530-1277, Fax.: +82-54-530-1278

E-mail: kimtw@knu.ac.kr

<https://orcid.org/0009-0003-1572-0473>

업 분야에서 광범위하게 연구 및 응용되고 있다. 그러나 AWJ의 가공 품질은 다양한 가공 인자에 의해 영향을 받는다는 사실이 잘 알려져 있다. 연마재의 충돌각도, 유량, 이송 속도, 노즐 직경, 펌프 압력 등에 의해 가공면의 표면거칠기, 가공 깊이가 달라질 수 있어 각각의 가공인자에 대한 최적화가 요구된다[2,3]. 이러한 워터젯의 복잡한 가공 특성을 이해하기 위해 다양한 가공 인자와 가공 품질 사이의 상관관계에 대한 연구가 진행된 바 있으며, 특히 최근에는 재료 관점에서의 가공특성을 이해하기 위해 분자동역학 시뮬레이션을 활용한 연구가 진행되고 있다[2,4,5]. 다만, 워터젯에 대한 실험적 연구가 다양하게 이루어져 온 것에 비하여 원자수준의 연구는 상대적으로 충분히 이루어지지 않았으며, 공정에 대한 보다 깊은 이해를 위해서는 다양한 관점에서의 해석 연구가 진행될 필요가 있다.

이 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 활용하여 워터젯 가공 과정에서의 재료 거동을 이해하고자 하였다. 특히 물 분자와 가공물 사이의 상관관계를 보다 근본적으로 이해하기 위해 연마재를 제외한 순수한 물에 의한 에너지 전달이 가공에 미치는 영향을 알아보하고자 하였다.

2. 시뮬레이션 방법 및 조건

워터젯 가공 상황을 모사하기 위하여 (111) 면을 상면으로 하는 단결정 구리판과 약 1700개의 물 분자로 이루어진 액적을 모델링 하였다. 단결정 구리판은 $13 \times 13 \times 2 \text{ nm}^3$ 의 크기를 가지도록 모델을 구성하였고, 각 모서리 영역을 고정하였다. X 및 Y 축 방향으로는 주기 경계조건 (periodic boundary condition)을 적용하였고, 초기 온도를 300 K으로 설정하는 한편, NVE(원자 수, 체적, 에너지 동일) 앙상블을 적용하여 구리판을 향해 이동하는 액적이 충돌할 때까지 속도를 유지할 수 있도록 하였다. 일반적으로 AWJ 공정의 노즐 끝에서의 워터젯 속도가 1,000 m/s 가량으로 알려져 있으나, 이 연구에서 모델링 한 액적의 물 분자 개수가 적어, 소재를 가공하기에 충분한 에너지를 표면에 전달하기 어렵기 때문에, 액적의 초기 속도는 실제 활용되는 속도 조건보다 다소 높은 1,000~10,000 m/s로 설정하였다[6].

구리와 물 분자의 거동은 각각 Morse, Stillinger-Weber 포텐셜 함수를 활용하여 모사하였고, 구리와 물분자 사이의 비결합 상호작용은 Lennard-Jones 포텐셜 함수를 이용하여 나타내었다. 각 포텐셜 함수의 인자값은 기존 문헌의 값을 참고하였다[7-9].

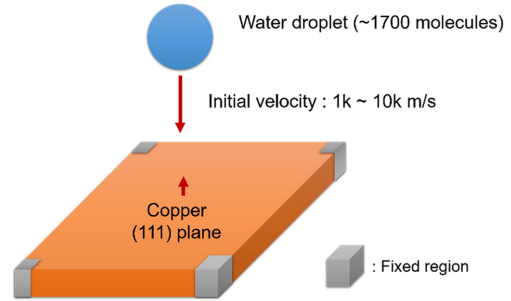


Fig. 1. Schematic of simulation model for waterjet machining.

3. 시뮬레이션 결과 및 고찰

워터젯 속도를 달리하여 수행한 시뮬레이션 과정에서 획득한 바닥재에 인가된 수직하중의 변화가 Fig. 2에 나타나 있다. 액적이 구리판에 충돌할 경우, 액적의 운동 에너지에 의하여 구리판은 z 축의 음의 방향으로 수직하중을 받게 되는데, 최대 수직하중의 크기는 액적의 초기 속도에 따라 결정되는 것을 알 수 있다. 수직하중이 발생하고 종료되는 시점까지를 충돌이 발생하는 시간으로 간주하여 수직하중을 시간에 대해 수치적분한 결과, 워터젯의 초기 속도가 1,000 m/s에서 10,000 m/s까지 증가함에 따라 충격량이 1.9×10^{-21} , 3.2×10^{-21} , 8×10^{-21} , 13×10^{-21} , $22 \times 10^{-21} \text{ N}\cdot\text{s}$ 로 나타났다.

시뮬레이션 과정에서 획득된 포텐셜 에너지의 변화는 Fig. 3에 도시되어 있다. 워터젯과 구리판 사이의 충돌은 포텐셜 에너지의 상승으로 이어지는데, 이때 초기 속도 조건에 따라 포텐셜 에너지의 변화 폭이 다르게 나타남을 알 수 있다. 다만, 초기 속도 조건이 4,000 m/s 이하인 경

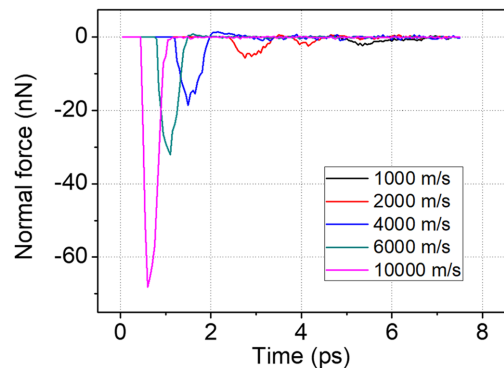


Fig. 2. Normal force of substrate during simulation with respect to waterjet speed.

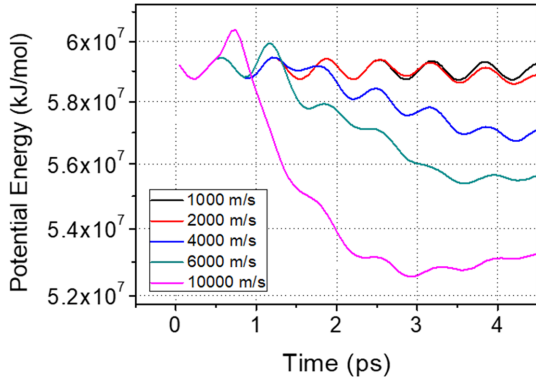


Fig. 3. Potential energy obtained during simulation with respect to waterjet speed.

우에는 포텐셜 에너지의 증가 여부가 명확하게 확인되지 않는데, 이는 워터젯 충돌에 의한 포텐셜 에너지 증가량이 자연적인 포텐셜 에너지의 요동 크기에 비해 충분히 크기 않기 때문으로 판단된다. 포텐셜 에너지의 요동은 L-J 포텐셜 함수의 cut-off 거리 근방에서의 에너지 불연속 조건에 기인한 것으로 추정된다. 초기 속도가 10,000 m/s 인 경우 충돌 이후 포텐셜 에너지가 크게 감소하는 현상이 나타나는데, 이는 구리판의 중앙부가 천공이 일어나며 다수의 원자가 모체로부터 완전히 이탈하여 포텐셜 에너지 계산에서 배제되었기 때문으로 판단된다.

워터젯에 의해 가공이 이루어진 경우와 그렇지 않은 경우의 거동은 Fig. 4에 잘 나타나 있다. Fig. 4(a) 및 (b)는 각각 6,000 m/s, 그리고 10,000 m/s의 초기 속도 조건이 부여된 모델의 충돌 후 약 3 ps의 시간이 경과된 후의 모습을 나타낸다. 그림에서 확인할 수 있듯, 워터젯의 초기 속도가 특정 수준에 도달하지 못할 경우, 바닥재는 가공이 거의 일어나지 않음을 알 수 있다. 워터젯의 충돌에 의해 구리판에 소성변형이 일어났으나, 이어 발생한 탄성 회복에 의하여 형태를 어느 정도 회복하였다. 워터젯 액적은 바닥재와 충돌 후 파괴되어 표면 전 방향으로 흩어지는 모습을 확인할 수 있다. 반면, 고속의 조건에서는 워터젯에 의한 충돌 에너지로 인하여 바닥재에 천공이 발생하였으며, 동시에 액적은 완전히 파괴되어 비산 되는 모습을 확인할 수 있다. 특히 가공된 구리는 모체로부터 완전히 분리되었음을 알 수 있다.

이러한 과정에 대한 시각화가 Fig. 5에 순차적으로 나타나 있다. Fig. 5(a)-(d)는 워터젯이 바닥재에 충돌한 순간부터 시간 순서대로 모델의 중심부를 기준으로 단면의 형상을 보여주고 있다. 충돌이 일어난 순간에는 접촉면의 액적의 형태가 변형하여 평탄화된 것(Fig. 5(a))을

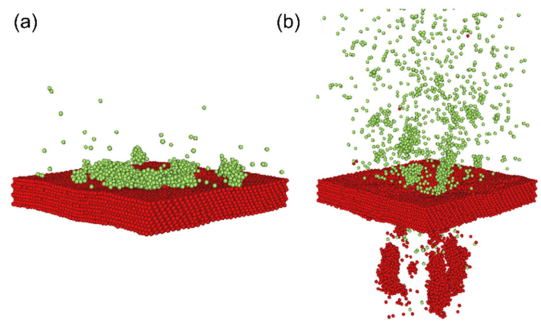


Fig. 4. Image of models after being collided with waterjet when initial velocity was (a) 6,000 m/s and (b) 10,000m/s, respectively. The images were captured after 3 ps following the collision. Green spheres represent water molecules and red spheres represent copper atoms.

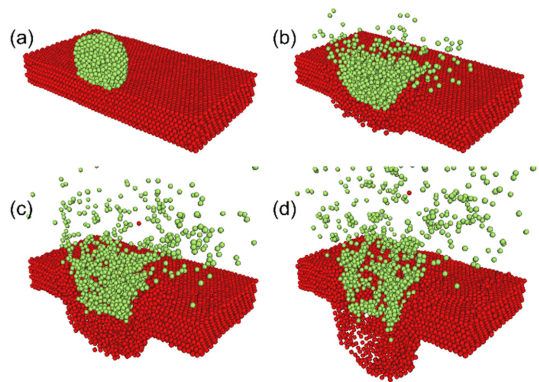


Fig. 5. Cross-section images obtained during machining process when (a) water droplet just impacts the substrate, (b-d) water droplet breaks and gets evaporated.

알 수 있으며, 충돌이 일어난 후 물 분자가 가진 운동에너지에 의해 바닥재에 소성변형이 일어남과 동시에 액적의 형태가 파괴되기 시작함(Fig. 5(b))을 알 수 있다. 이때, 바닥면의 소성변형 양상은 중심부의 침입 깊이가 더 깊고, 외곽으로 갈수록 변형량이 줄어드는 형태로, 액적의 형태를 따라 일어나는 것으로 보인다. 시뮬레이션이 더 진행됨에 따라 바닥재의 소성변형이 심해지는 한편, 물 분자가 상호 간의 수소결합을 잃고 증발(Fig. 5(c))되며, 최종적으로는 바닥재의 일부가 모체로부터 완전히 분리되는 (Fig. 5(d)) 과정을 확인할 수 있었다.

가공이 종료된 후 바닥재의 형상을 보다 자세히 관찰하기 위하여 개별 원자들에 대해 높이 프로파일 이미지를 추출하였다. Fig. 6(a)와 (b)에 각각 구리판의 높이 프로파일을 상부에서 바라본 모습 및 구리판의 단면에 대

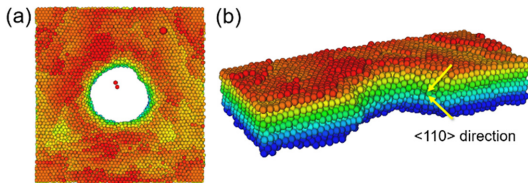


Fig. 6. Height profile of the copper plate after machining process with (a) top view, and (b) cross-sectional view.

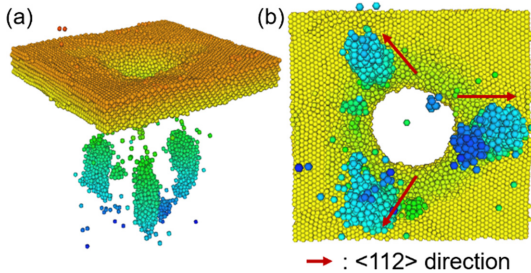


Fig. 7. Height profile of copper plate and detached part of the copper plate after completing of machining.

해 표현한 모습을 나타내었다. Fig. 6(a)를 살펴보면 천공이 되지 않은 표면에도 높이의 편차, 즉 표면거칠기가 나타났으며, 소성변형이 일부 일어났음을 알 수 있다. 또한 천공 영역의 경우 완벽하게 수직으로 천공이 일어나지 않아 녹색으로 표시된 원자가 보이는 것을 알 수 있다. 이러한 경향은 Fig. 6(b)에서 보다 명확하게 확인되는데, 천공이 일어난 형상이 원기둥 형상이 아닌, 사선으로 나타남을 알 수 있다. 구리판 두께의 중심을 기준으로 상, 하부를 향해 천공 면적이 넓어지는 것이 확인되는데, 이 방향은 $\langle 110 \rangle$ 인 family direction을 포함하고 있다. 즉, 워터젯 물 분자의 충돌로 인해 구리판이 전달 받은 에너지는 구리판의 소성변형을 야기하여 천공 부위가 모재로부터 탈락하도록 하였음을 알 수 있다.

구리판의 소성변형 특성은 Fig. 7을 통해서도 확인할 수 있는데, 천공에 의해 모재로부터 탈락한 구리 파편의 형상을 구리판의 하부에서 바라보면 천공 지점을 중심으로 $\langle 112 \rangle$ family 방향을 따라 3-fold 대칭구조를 형성하고 있음을 알 수 있다. 이러한 형상은 (111) 면이 소성 변형할 때, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$ 방향으로 슬립이 일어나 나타난 것으로 판단된다 [10].

4. 결 론

이 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 워터젯 가공 상황에서 재료의 거동을 살펴보았다. 그 결

과, 워터젯이 일정 수준 이상의 에너지를 전달해야만 가공이 이루어질 수 있음을 확인하였다. 워터젯 가공은 재료의 소성변형을 수반하며 이루어지며, 재료의 탈락 현상은 특정한 슬립 방향을 따라 일어남을 알 수 있었다. (111) 결정면에 대한 가공을 수행할 경우, $\langle 112 \rangle$ 방향을 따라 3-fold 대칭 형태로 탈락물이 발생함을 확인하였다. 이러한 연구 결과는 워터젯 가공 현상을 이해하기 위한 기초지식으로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

References

- [1] Hashish, M., "Waterjet machining of advanced composites", *Material and Manufacturing Process*, Vol.10, pp.1129-1152, 1995.
- [2] Parvandar Asadollahi, B., Pour Panah, M., Javdani, A., "Experimental Investigation and Molecular Dynamics Simulation of Contributing Variables on Abrasive Water Jet on Aluminum Alloy 7075 Reinforced with Al_2O_3 , Graphite and Silicon Carbide", *Arabian Journal for Science and Engineering*, Vol.47, pp.15303-15321, 2022.
- [3] Uhlmann, E., Männel, C., Braun, T., "Efficient abrasive water jet milling for near-net-shape fabrication of difficult-to-cut materials", *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol.111, pp.685-693, 2020.
- [4] Chen, R., Zhang, D., Wu, Y., "Study on the influence of standoff distance on substrate damage under an abrasive water jet process by molecular dynamics simulation", *Friction*, Vol.6, pp.195-207, 2018.
- [5] Hanasaki, I., Yonebayashi, T., Kawano, S., "Molecular dynamics of a water jet from a carbon nanotube", *Physical Review E*, Vol.79, pp.046307, 2009.
- [6] Junkar, M., Jurisevic, B., Fajdiga, M., Grah, M., "Finite element analysis of single-particle impact in abrasive water jet machining", *International Journal of Impact Engineering*, Vol.32, pp.1095-1112, 2006.
- [7] Molinero, V., Moore, E. B., "Water modeled as an intermediate element between carbon and silicon", *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol.113, pp.4008-4016, 2009.
- [8] Metya, A. K., Singh, J. K., "Ice adhesion mechanism on lubricant-impregnated surfaces using molecular dynamics simulations", *Mol. Simul.*, Vol.45, pp.394-402, 2019.
- [9] Xu, Z., Buehler, M. J., "Nanoengineering heat transfer performance at carbon nanotube interfaces", *ACS nano*, Vol.3, pp.2767-2775, 2009, <https://doi.org/10.1021/nn9006237>.
- [10] Yao, W., Krill, C. E., Albinski, B., Schneider, H.-C., You, J.-H., "Plastic material parameters and plastic anisotropy of tungsten single crystal: a spherical micro-indentation study", *Journal of Materials Science*, Vol.49, pp.3705-3715, 2014.