

개방형 RTP(Rapid Thermal Pressing) 공정의 점소성 유한요소해석

손지원^{*}·임성한^{**}·오수익^{***}

Finite Element Analysis with Viscoplastic Formulation in Open-Die RTP Process

J. W. Son^{*} · S. H. Rhim^{**} · S. I. Oh^{***}

Abstract

Since polymer materials at elevated temperatures are usually rate-sensitive, the analysis of RTP process requires considering the effect of the rate-dependent. The material behavior that exhibits rate-sensitivity is called visco-plastic. A two-dimensional visco-plastic finite element formulation which constitutive equation is based on the formulation proposed by Perzyna is presented. This Paper is purposed to calculate pressure distribution on PMMA in compression process and to predict the relationship with defects after demolding process. This paper analyzes, both analytically and numerically, the pressure distributions on the surface of PMMA during open-die RTP process. In this research, PMMA is used to be simulated at 110°C near the transition temperature.

Key Words : Visco-Plasticity(점소성), Finite Element Method(유한요소해석), RTP(Rapid Thermal Pressing), PMMA

1. 서 론

최근 바이오산업 및 광기능성 산업의 발달로 이와 관련된 부품의 개발이 매우 중요한 산업으로 각광받고 있다. 이와 더불어 고분자소재 부품들의 성형 및 가공기술에 대한 관심이 증대되고 있다. 이에 고분자 재료의 성형에 대한 기술 역시 발전하였으며, 그 하나로써 미세 압축 성형 방법인 RTP(Rapid Thermal Pressing) 공정이 널리 쓰이고 있다.

RTP 공정에서 주로 사용되는 재료인 PMMA는

탄성력이 커서, 상온에서 성형할 경우 탄성회복에 의해 원래의 형상으로 돌아가므로 상온에서의 가공성은 매우 좋지 않다. 따라서, 열간에서 공정을 수행하여야 한다.

RTP 공정은 고분자 소재를 전이온도 (Transition Temperature, Tg) 이상으로 가열한 후에 압력을 가하여 패터닝(patterning)을 한 후 냉각을 거쳐 몰드와 시편을 분리하는 공정이다. 따라서, 냉각 시 고분자 시편은 응력완화과정을 거치게 되는데, 이 때, 시편이 받는 압력의 균일성이 제품의 성능에 큰 영향을 미치게 된다.

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

** 서울대학교 정밀기계공동연구소

*** 서울대학교 기계항공공학부

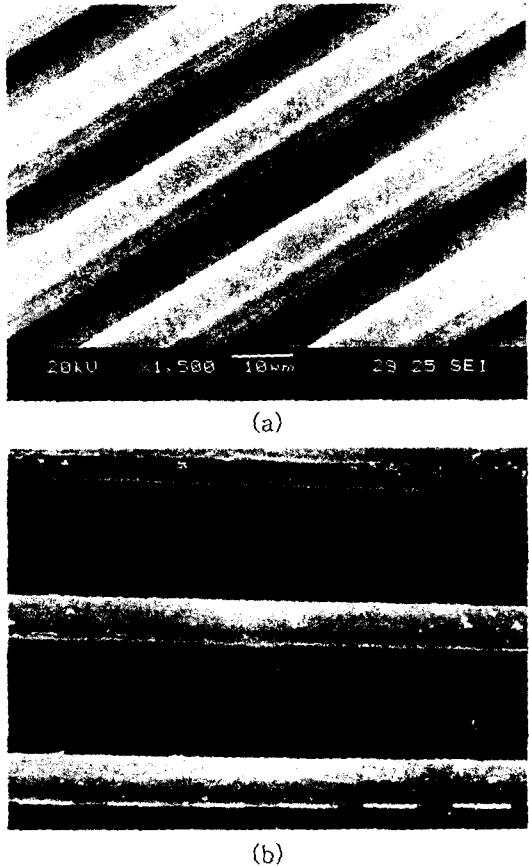


Fig. 1 Micro channel mold for RTP process and specimen; (a) mold fabricated by MEMS process, (b) defects in specimen after demolding step of RTP process

또한, 이와 더불어 압력구배와 잔류응력 등에 의해 디몰딩(demolding) 과정에서 결함이 발생하기도 한다.

Fig. 1은 최근에 본 연구의 일환으로서 제작된 몰드와 RTP 공정을 실제로 수행하여 얻은 미세 채널의 형상이다. 가공된 채널의 표면에서는 결함이 보이는데, 이는 몰드의 압축공정 후 디몰딩과정에서 발생한 것으로 판단된다. 이러한 결함의 발생 원인 등을 분석하기 위해서는 공정압력 및 응력완화현상 등이 가공 시편에 미치는 영향을 분석하여야 한다.

본 연구에서는 점소성 유한요소해석을 위한 정식

화를 수행하였으며, 이를 이용하여 PMMA의 전이온도 균쳐인 110°C에서 압축공정시 시편의 압력분포를 이론적으로 구한 해와 점소성 유한요소해석으로 구한 해를 비교하였다. 해석대상이 되는 온도가 전이온도 균쳐이므로, 유체 유동 해석에 의한 접근이 아닌 점소성 변형에 의한 해석이 타당할 것으로 판단된다.

2. 점소성 유한요소 정식화

2.1 점소성 기본 이론

재료에 부가되는 응력의 경로(stress path)가 항복면을 통과하면 재료는 점소성 변형을 하는데, 이때 변형률의 시간 변화량은 탄성과 점소성 변형률 속도의 합으로 나타낼 수 있다.

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^{vp} \quad (1)$$

여기서 $\dot{\varepsilon}_{ij}^e$ 는 탄성 변형률 속도 텐서(elastic strain rate tensor), $\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp}$ 는 점소성 변형률 속도 텐서(viscoplastic strain rate tensor), ()는 시간에 대한 편미분, 즉 속도 혹은 시간 변화량이다.

점소성 변형은 진행되는 동안 아래 식들을 만족하게 된다.^[1]

① 평형 방정식(equilibrium equation).

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

② 항복 조건식(yield condition)

$$f(\sigma_{ij}) = C \quad \bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}, \dot{\varepsilon}) \quad (3)$$

③ 구성 방정식(constitutive equation)

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \lambda \frac{\partial f(\sigma_{ij})}{\partial \sigma_{ij}} \quad \left[\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\varepsilon}}{\bar{\sigma}} \sigma_{ij} \right] \quad (4)$$

④ 적합조건식(compatibility equation)

$$\ddot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5)$$

유효응력과 유효변형률속도의 관계는 식 (6)을 만족한다.

$$\bar{\sigma} = \sqrt{2/3} \{ \sigma_{ij} \sigma_{ij} \}^{1/2}, \dot{\bar{\varepsilon}} = \sqrt{2/3} \{ \dot{\varepsilon}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} \}^{1/2} \quad (6)$$

본 연구에서 사용한 점소성 변형에 대한 모델은 Perzyna 모델이다. Perzyna 모델에서 항복과 관련된 식은 식 (7)과 같다.^[2]

$$f(\sigma_{ij}) = |\sigma| - \sigma_y \quad (7)$$

식(4)를 Perzyna 모델을 고려하여 점소성에 대한 식으로 나타내면 다음과 같다.

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \frac{<\Phi(f)>}{\eta} \frac{\partial f}{\partial \sigma} \quad (8)$$

변형률(strain)에 대한 경화법칙은 식(9)와 같다.

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \frac{<\Phi(f)>}{\eta} \frac{\partial f}{\partial \sigma} \quad (9)$$

$$\begin{cases} <\Phi(f)> = 0 & \text{if } f \leq 0 \\ <\Phi(f)> = \Phi(f) & \text{if } f > 0 \end{cases}$$

과도응력함수(overstress function) $\Phi(f)$ 는 아래와 같은 식을 사용하였다.

$$\Phi(f) = f^{\frac{1}{m}} \quad (10)$$

Levy-Mises 방정식을 고려해서 과도응력함수인 $\Phi(f)$ 를 $\Phi = ((\bar{\sigma}/Y) - 1)^{1/m}$ [1]라 하면, 식 (11)이 성립한다.

$$\bar{\sigma} = Y \left[1 + \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\gamma} \right)^m \right] \quad (11)$$

여기에서, m 은 변형률 민감지수(strain-rate sensitivity index)이다

2. 2 유한요소 정식화

변분법원리(variational principle)를 이용하여 점소성 재료에 대한 유한 요소 정식화를 하면 다음과 같다.

$$\pi = \int_V E(\dot{\varepsilon}_{ij}) dV - \int_{S_r} F_i u_i dS + K * \int_V \frac{1}{2} (\dot{\varepsilon}_{ij})^2 dV \quad (12)$$

(F_i : surface traction, E : work function,

$$\frac{\partial E}{\partial \dot{\varepsilon}_{ij}} = \sigma_{ij}'$$

식(12)를 변분하게 되면 식 (13)이 유도된다.

$$\begin{aligned} \delta\pi &= \int_V \frac{\partial E}{\partial \dot{\varepsilon}_{ij}} \delta \dot{\varepsilon}_{ij} dV + K * \int_V \bar{\varepsilon}_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \int_{S_r} F_i \delta u_i dS \\ &= \int_V \bar{\sigma} \delta \dot{\varepsilon}_{ij} dV + K * \int_V \bar{\varepsilon}_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - \int_{S_r} F_i \delta u_i dS \end{aligned} \quad (13)$$

유한 요소 해석을 위해서는 강성행렬(stiffness

matrix)을 구해야 하며, 식(14)와 같이 구해질 수 있다.

$$\left[\frac{\partial \pi}{\partial v_I} \right]_{v=v_0} + \left[\frac{\partial^2 \pi}{\partial v_I \partial v_J} \right]_{v=v_0} \Delta v_j = 0 \quad (14)$$

식(14)를 행렬식으로 표현하면 아래와 같다.

$$K \Delta v = f \quad (15)$$

Δv 를 구하기 위해서 먼저 K 와 f 를 계산해야 하며, 이는 식(4)에서 각 항의 값을 다음과 같이 계산하여 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial \pi}{\partial v_I} = \int_V \frac{\bar{\sigma}}{\dot{\varepsilon}} P_{IJ} v_J dV + \int_V K C_J v_J C_I dV - \int_{S_F} F_J N_{Ji} dV \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \pi}{\partial v_I \partial v_J} &= \int_V \frac{\bar{\sigma}}{\dot{\varepsilon}} P_{IJ} dV + \int_V \frac{1}{\dot{\varepsilon}} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \dot{\varepsilon}} P_{IK} v_K v_M P_{MJ} dV \\ &+ \int_V \left(\frac{1}{\dot{\varepsilon}} \right)^2 \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \dot{\varepsilon}} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial \dot{\varepsilon}} P_{IK} v_K v_M P_{MJ} dV \\ &- \int_V \left(\frac{\bar{\sigma}}{\dot{\varepsilon}} \right)^3 P_{IK} v_K v_M P_{MJ} dV + \int_V K C_J C_I dV \end{aligned} \quad (17)$$

된다.

한편 식(4)에서 수치 안정성을 위해서 backward Euler 방법을 사용하면, 다음식이 유도된다.

$$\varepsilon_{n+1}^{vp} = \varepsilon_n^{vp} + \Delta \lambda \frac{\partial f}{\partial \sigma} \Big|_{n+1} \quad (18)$$

점소성 변형은 식(18)에서 $f > 0$ 에서 발생하므로, 점소성 변형의 변형량은 식 (19)의 시간증분항으로 표현된다.,

$$\Delta \lambda = \frac{\Phi(f)_{t+\Delta t}}{\eta} \Delta t \quad (19)$$

3. 이론적 해석 및 유한요소해석

3.1 해석 모델

Fig. 2는 개방형 다이를 이용하여 원판모양의 시편을 압축 성형하는 그림이다. 원판 모양의 시편을 개방형 다이가 정해진 속도로 압축하게 된다.

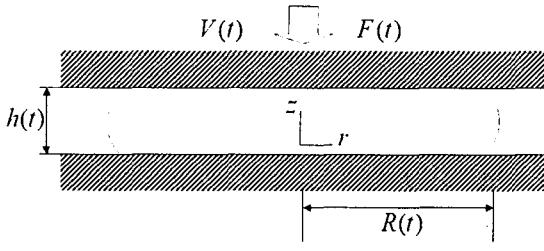


Fig. 2 Open-die RTP Process.

3.2 이론적 해석

Fig. 3은 시편의 미소체적에 대한 자유물체도이다. 반경방향의 힘 평형을 고려하면, 식(20)이 된다.

$$prd\theta dz - (p + dp)(r + dr)d\theta dz + 2p'dr \sin\left(\frac{d\theta}{2}\right) + \sigma rd\theta dr - (\sigma + d\sigma)rd\theta dr = 0 \quad (20)$$

여기에서 $p' = p + \frac{dp}{2}$, $\sin\left(\frac{d\theta}{2}\right) = \frac{d\theta}{2}$ 의 관계를 고려하면, 식 (21)으로 정리된다.

$$-dpdz = d\sigma dr \quad (21)$$

PMMA에 대한 항복응력을 식 (22)와 같이 가정하여 식(21)에 대입하면, 식(23)이 얻어진다.^[4]

$$\sigma = K(\dot{\epsilon})^n = K\left(-\frac{dv_r}{dz}\right)^n \quad (n=0.25) \quad (22)$$

$$\left(-\frac{dp}{dr}\right)dz = d\left[k\left(-\frac{dv_r}{dz}\right)^n\right] \quad (23)$$

여기에서, $r=R$ 이면 $p=0$ 이고, $z=\frac{h}{2}$ 이면 $v_r=0$ 이고, 이를 대입하여 적분하면 식 (24)가 얻어진다.

$$v_r = \frac{n}{(n+1)K^{\frac{1}{n}}}\left(-\frac{dp}{dr}\right)^{\frac{1}{n}}\left(\frac{h}{2}\right)^{\frac{n+1}{n}}\left[1-\left(\frac{2z}{h}\right)^{\frac{n+1}{n}}\right] \quad (24)$$

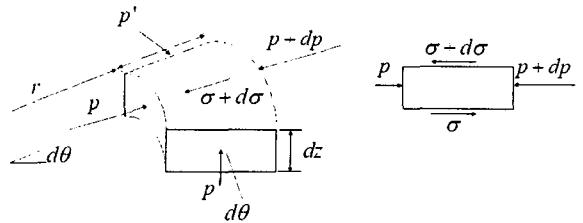


Fig. 3 Free body diagram for simple compression process with open die

RTP 공정 중 시편 주위의 재료유동률(material flux rate)은 다음과 같다.^[4]

$$q = 2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{h}{2}} v_r r dz d\theta = \pi r^2 V_c \quad (25)$$

식(24)와 식(25)를 연관하여 풀면 식 (26)이 얻어진다.

$$p = \frac{2}{n+1} \left(\frac{2n+1}{n}\right)^n \frac{KV_c^n}{h^{2n+1}} (R^{n+1} - r^{n+1}) \quad (26)$$

식 (26)을 사용하면 PMMA 소재 표면의 압력분포를 구할 수 있다.

3.3 FEM 모델링 및 해석

점소성 유한요소해석을 수행하기 위하여 응력-변형률 관계식(flow stress curve)은 Chen^[3]이 수행한 실험결과를 이용하였다. Fig. 4는 PMMA의 110°C에서의 변형률에 따른 응력-변형률 관계이다. Fig. 4.의 실험자료를 기초로 하여 응력을 변형량과 변형률의 관계식으로 표현하여 해석을 수행하였으며, 기본적인 FEM 해석 조건은 Table. 1과 같다.

유한요소해석은 축대칭을 사용하였으며, 해석에 사용된 사각형 요소는 500개 이상이면 타당한 압력분포를 얻을 수 있었다.

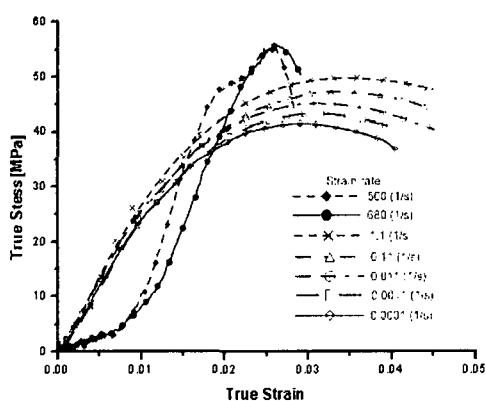


Fig. 4 Flow stress curve in PMMA (110°C) [3]

Table 1. Simulation conditions

Cylindrical Specimen	Diameter(mm)	50
	Height(mm)	2
Simulation Conditions	Velocity(mm/s)	0.02
	Temperature(°C)	110

몰드는 z방향으로 0.2mm 압축하였다.

Fig. 5는 단계별 시편의 형상 및 응력분포를 나타내고, Fig. 6과 Fig. 7은 시편을 0.2mm 압축하였을 때의 z방향 압력분포와 r방향의 속력분포이다.

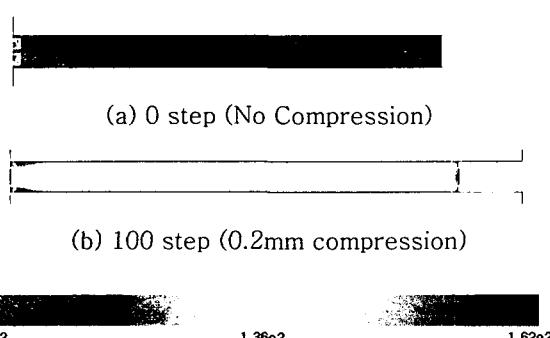


Fig. 5 Before and after compression process

Simulation

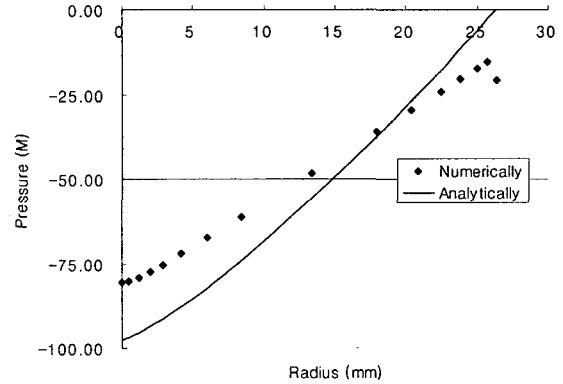


Fig. 6 Pressure distribution of theoretical and FEM

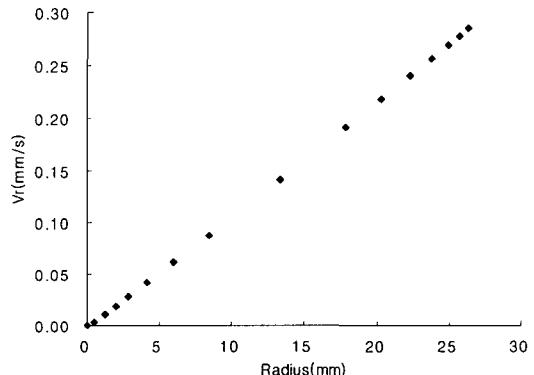


Figure 7. Velocity distribution of FEM

점소성 유한요소해석으로 구한 결과와 이론적으로 구한 결과는 비슷한 경향을 보이고 있다. 반경 방향의 속도는 거의 선형적으로 진행되고 있다. 비록, 두 계산결과가 약간의 차이를 보이고 있으나, 이는 이론계산에 사용된 항복응력은 변형률 속도만으로 표현된 항복응력식을 사용하고, 해석에서도 Chen^[4]의 실험치를 보간법을 이용하여 변형률, 변형률 속도의 함수로 표현했기 때문이다. 이들 계산으로부터 구한 압력분포는 시편의 변형률에는 무관하므로 실제 실험과는 오차가 있으나, 적분계산의 편의를 위해 항복응력을 단순 가정한 것이다.

4. 결 론

계산 결과에서 보는 바와 같이 RTP 공정시 압축공정에서는 중심으로 갈수록 시편이 받는 압력이 높아지게 된다. 이후, 응력완화현상이 발생하게 되면, 시편에 작용하는 압력은 균일한 압력의 분포로 회복되게 된다. 이러한 결과를 바탕으로 본 연구를 정리하면 다음과 같다.

냉각과정과 디몰딩 과정을 거치면서 시편에 작용하는 압력과 응력의 변화는 바깥부분보다는 중심부분에서 심하게 나타난다. 이러한 압력의 변화 차이는 중심으로부터의 거리, 냉각시간 등에 의해 변화될 것이므로, 결국 이러한 인자의 정확한 해석이 시편의 품질을 결정할 것이다. 일반적으로 이러한 응력완화 현상은 점탄성 해석을 통하여 해석이 가능할 것이다.

다만, 본 연구에서 보인 바와 같이, 압축공정에서의 시편의 표면에서의 압력분포를 점소성 유한요소법으로 계산한 결과를 바탕으로 디몰딩 과정 후의 시편의 압력분포도 어느 정도 예측이 가능할 것이다. 따라서, 냉각시 시편의 표면에서 압력의 변화가 없는 위치 및 그 압력을 구할 수 있다면, 점탄성을 고려하는 해석 없이도 어느 정도의 공정 해석이 가능할 것이다.

참 고 문 헌

- (1) Shiro Kobayashi, Soo-Ik Oh, Taylan Altan, "Metal Forming and The Finite Element Method", 1989, Oxford University Press.
- (2) Perzyna, P. , "Fundamental Problems in Viscoplasticity", Advances in Applied Mechanics, Vol. 9, 1966, pp. 243~377.
- (3) C. R. Lin, R. H. Chen, C. Hung, "Preventing non-uniform shrinkage in open-die hot embossing of PMMA microstructures", Journal of Materials Processing Technology, 140, 2003, pp. 173-178.
- (4) W. Chen, F. Lu, M.Cheng, "Tension and compression tests of two polymers under quasi-static and dynamic loading", Polymer Testing 21, 2002, pp. 113-121.
- (5) L.J.Heyderman, "Flow behaviour of thin polymer films used for hot embossing lithography", Microelectronic Engineering ,200, 54;pp. 229~245.