

분자동역학 해석을 이용한 액체 극미세사의 열역학적 물성과 안정성 연구

김병근[†] · 최영기* · 권오명** · 박승호*** · 이준식****

A Molecular Dynamics Study of Thermophysical Properties and Stability of Nanoscale Liquid Thread

Byeong Geun Kim, Young Ki Choi, Ohmyoung Kwon, Seungho Park and Joon Sik Lee

Key Words : Molecular Dynamic Simulation(분자동역학 해석), Surface Tension(표면장력), Stability(안정성), Nanoscale Liquid Thread(극미세사)

Abstract

Molecular dynamics (MD) simulations are conducted to investigate the thermophysical characteristics and the stability of liquid threads for various conditions. A cylindrical thread in the simulation domain is made of Lennard-Jones molecules. The surface tension of liquid threads can be determined from local densities, local normal and transverse components of the pressure force. In order to understand the effects of thread radii on surface tensions, the Tolman equation is modified on the basis of the cylindrical coordinates for prediction of surface tensions. Surface tensions calculated from the MD simulation agree with the prediction from the modified Tolman equation. In addition, surface tensions decrease linearly with increasing system temperature. For a binary system, the surface tension decreased linearly compared to that for a pure system with increasing binary ratio of solute molecules which have relatively large value of the affinity coefficient. For a fixed binary ratio, the surface tension increased slightly with the affinity coefficient and the maximum value appear around where the affinity coefficient is 1.5 and decreased rapidly for upper value of 1.5. In addition, the critical wavelengths of perturbations are proven to be directly proportional to the equimolar dividing radii of the liquid threads.

기호설명

| | | | | | |
|-------|----------------|---------------------|-----------|----------------|---------------------|
| f | : 힘 | [N] | N | : 분자의 개수 | |
| k_B | : Boltzmann 상수 | [JK ⁻¹] | P | : 압력 | [N/m ²] |
| L | : 해석 공간의 특성 길이 | [m] | r | : 분자간의 거리, 반경축 | [m] |
| m | : 분자의 질량 | [kg] | R | : 반지름 | [m] |
| | | | t | : 시간 | [S] |
| | | | T | : 온도 | [K] |
| | | | x, y, z | : 직교 좌표계 | |

[†] 서울대학교 대학원 기계항공공학부
E-mail : jigolade@hotmail.com
TEL : (02)880-7123 FAX : (02)883-0179

* 중앙대학교 기계공학부
** 고려대학교 기계공학과
*** 홍익대학교 기계시스템디자인공학과
**** 서울대학교 기계항공공학부

그리스 문자

| | | |
|---------------|------------------|-----|
| α | : 인력계수 | |
| β | : 용질분자의 첨가비 | |
| δ | : Tolman 의 길이 | [m] |
| ε | : 포텐셜 함수의 에너지 크기 | [J] |

| | | |
|----------|----------|----------------------|
| ϕ | : 포텐셜 함수 | [J] |
| γ | : 표면장력 | [N/m] |
| ρ | : 수 밀도 | [kg/m ³] |

상첨자

* : 무차원화된 양

하첨자

| | |
|----------|-----------------|
| E | : 등분자 분할 표면 |
| g | : 기체 상태 |
| k | : 분할 영역 |
| K | : 동역학 성분 |
| l | : 액체 상태 |
| S | : 표면장력이 작용하는 표면 |
| N, T | : 수직방향 및 횡방향 성분 |
| U | : 구성 성분 |
| ∞ | : 평면 경계 |

1. 서론

액체의 분사와 코팅, 극미세사의 생성, 시린지(syringe) 분사, 잉크젯 프린터나 마이크로 광학 장치 제작 등의 광범위한 분야에서 나노 크기의 액체 극미세사의 특성에 대한 정확한 이해가 요구되어 왔다. 이에 나노 크기의 액체 극미세사에 대한 연구는 대략 10년 전부터 활발히 진행되고 있다. 액체 극미세사에 대한 실험적인 접근이 공간적인 제약으로 극히 어려우므로 대부분의 연구가 이론적이거나 수치적인 접근을 통해 이루어지고 있다.

분자동역학해석은 시스템을 구성하는 각각의 분자들의 거동을 관찰하기 때문에 나노 크기의 액체 극미세사의 안정성과 계면에서의 특성을 연구하는데 매우 유용한 방법이다. 분자동역학해석을 통해서 매 시각마다 분자의 위치나 속도 정보를 얻을 수 있다. 이를 이용하여 액체 극미세사의 거동이나 특성을 정확히 예측할 수 있다. 분자동역학해석은 공간 및 시간적으로 매우 작은 영역을 대상으로 하지만, 통계적 방법과 열역학적 모델을 이용하여 시스템의 미시적인 거동과 유용한 물성들을 파악할 수 있다[1].

지금까지 분자 동역학 해석을 이용하여 나노 크기의 액적[2], 액체 박막[3,4], 기포[5]에 대한 연구가 많이 이루어졌다. 그러나 액체 극미세사의 안정성과 열역학적 물성에 대한 연구는 활발히 이루어지지 않았다[6,7]. 또한 선행 연구들은 액체 극미세사의 형상이나 붕괴 시간 및 붕괴 조건에만 관심을 두었기 때문에 국소적인 온도, 밀도, 압력과 안정성과 같은 계면의 특성에 대한 연구는 그 중요성에 비해 거의 이루어지지 않았다.

따라서 본 연구에서는 액체 극미세사의 계면

영역을 분자동역학해석을 이용해서 관찰하였고, 이를 통해 얻은 국소 밀도, 온도, 압력 분포를 이용하여서 극미세사의 열역학적 물성을 얻었다. 또한 극미세사가 붕괴할 때 고전 역학에서의 Rayleigh 해석 결과와 마찬가지로 외부에서 가해지는 섭동의 임계 파장과 극미세사의 등분자 분할 반경이 선형적인 관계를 가짐을 관찰하였다[8].

2. 해석방법

본 연구에서는 분자동역학해석을 통해 액체 극미세사의 물성을 파악하기 위해서 Lennard-Jones(LJ) 포텐셜을 이용하였다.

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

여기서 r_{ij} 는 i 와 j 분자간 거리를 의미한다. $\epsilon(=1.67 \times 10^{-21} \text{ J})$ 과 $\sigma(=3.4 \times 10^{-10} \text{ m})$ 는 각각 포텐셜 함수를 대표하는 에너지와 거리 파라미터로 분자 질량이 $m(=6.63 \times 10^{-26} \text{ kg})$ 인 아르곤에 대해 구하였다. 분자들은 $6R^* \times L^* \times 6R^*$ 의 부피를 가지는 전체 주기경계조건을 만족하는 직사각형 내부에 존재한다. 식 (1)로부터 얻은 분자간의 힘은 뉴턴의 운동방정식에 적용된다.

$$\vec{F}_{ij} = -\frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} \hat{r}_{ij} = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad (2)$$

식 (2)와 “velocity Verlet” 알고리즘[9]을 사용해서 분자간의 운동을 해석할 수 있다.

액체 극미세사의 물성을 파악하기 위한 분자동역학해석을 수행하기 전에, 고체 면심입방격자(FCC) 구조를 가진 극미세사를 형성한 후, 매 시간 간격마다 해석 영역의 중심에 위치하게 한다. 각 분자들의 초기 속도는 시스템의 온도에 따른 Maxwell-Boltzmann 분포에 따른다. 그리고 시스템 전체의 운동량이 0이 되도록 속도를 조절하고, 또한 시스템의 온도에 맞게 속도를 재설정해서 모든 분자가 평형상태에 도달하도록 한다[1]. 시스템은 0.5 ns 이후 평형상태에 도달했을 때의 모습을 보여주고 있다. 평형상태 이후 0.25 ns 동안 각 시간 간격에서, 분할영역에서 계산된 밀도와 수직방향 압력을 시간에 대해 평균해서 밀도와 수직방향 압력분포를 구한다. 분할영역은 극미세사의 중심선을 동심축으로 하는 두께 $\Delta r = 0.1\sigma$ 인 관형이다.

3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 분자간의 거리가 컷오프 반경인

r_c 가 3.0σ 이상일 때는 분자간의 관계를 고려하지 않았다. 해석에서의 시간 간격은 $\Delta t = 5$ fs 이다. 해석 공간은 $L_x^* \times L_y^* \times L_z^* (= 6R^* \times L^* \times 6R^*)$ 의 직사각형 공간이다. 해석에 필요한 모든 물성들을 Table 1 과 같이 무차원화하였다. 분자동역학 해석 조건은 Table 2 에 정리되어 있다. 이론적으로 L^* 은 주기 경계조건으로 인해 극미세사의 물성에 영향을 줄 수 없으므로 파라미터에서 제외되었다.

분자동역학 해석에서는 컷오프 반경인 r_c^* 의 선택이 해석 결과에 큰 영향을 끼치므로 Table 2 의 P1 조건으로 해석을 수행하였다. Fig. 1 과 2 는 각각 r_c^* 가 밀도분포와 압력분포에 끼치는 영향을 보여준다. Fig. 1 에서 $r_c^* = 3.0$ 일 때, 액상과 기상의 밀도는 각각 $\rho_l^* = 0.761$ 와 $\rho_g^* = 0.0147$ 이다. 이 결과는 실험을 통해서 구한 포화 상태에서의 액상과 기상의 밀도인 $\rho_l^* = 0.777$ 와 $\rho_g^* = 0.0101$ [10]과 잘 일치한다. 따라서 분자의 거동과 분포를 관찰할 때 컷오프 반경이 $r_c^* = 3.0$ 이상일 경우 비교적 정확한 값을 얻을 수 있고 분자간의 힘에 관련된 물성은 r_c^* 가 크면 클수록 정확한 값에 수렴을 하게 된다. 하지만 r_c^* 의 값이 커지면 계산의 정확성은 증대되나 계산에 소요되는 시간이 기하급수적으로 증가하기 때문에 r_c^* 를 어느 이상의 값으로 선택하는 것은 어렵다. 본 연구에서는 여러 파라미터에 대한 극미세사의 열역학적 물성들이 변화하는 모습을 관찰하고자 하기 때문에 분자의 거동과 분포를 비교적 정확히 예측할 수 있고 분자간의 힘의 관계도 정확하게 예측할 수 있는 컷오프 반경인 $r_c^* = 3.0$ 으로 해석을 수행하였다.

Fig. 1 에서의 무차원화된 밀도분포는 각 분할영역에서의 평균 분자수로부터 구할 수 있다.

$$\rho_k^* = \left\langle \frac{N_k}{V_k} \right\rangle \quad (3)$$

Table 1. Dimensionless properties for LJ system

| Property | Dimensionless form |
|-------------------------------|--|
| Density(ρ^*) | $\rho\sigma^3 / m$ |
| Energy(ϕ^*) | ϕ / ϵ |
| Force(f^*) | $f\sigma / \epsilon$ |
| Length(r^*) | r / σ |
| Pressure(P^*) | $P\sigma^3 / \epsilon$ |
| Surface Tension(γ^*) | $\gamma\sigma^2 / \epsilon$ |
| Temperature(T^*) | $k_B T / \epsilon$ |
| Time(t^*) | $t / \tau = t(\epsilon / m\sigma^2)^{1/2}$ |

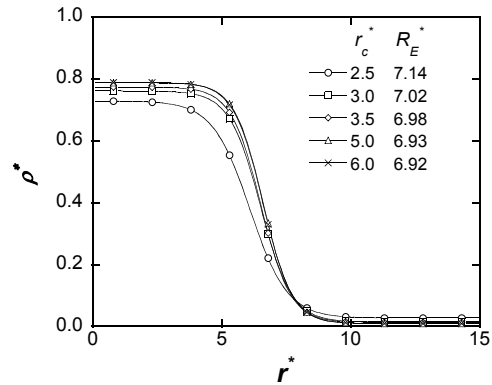


Fig. 1 Effect of the cutoff radius on density distributions.

여기서 $\langle \rangle$ 는 시간에 대한 평균값을 의미한다. Fig. 2 에서 수직방향 압력분포는 동역학성분과 분자간 힘에 의한 구성성분으로 이루어진다[3].

$$P_N^*(r_k^*) = P_{N,K}^*(r_k^*) + P_{N,I}^*(r_k^*) \quad (4)$$

식 (4)의 각 성분들은 다음과 같이 정의된다.

$$P_{N,K}^*(r_k^*) = \langle \rho_k^* \rangle T^* \quad (5)$$

$$P_{N,U}^*(r_k^*) = \frac{-1}{2\pi r_k^{*2} L^*} \left\langle \sum_{i,j}^k \frac{|\vec{r}_{ij}^* \cdot (\vec{r}_{ij}^*)_r|}{r_{ij}^*} \frac{d\phi(r_{ij}^*)}{dr_{ij}^*} f_{k,ij} \right\rangle \quad (6)$$

여기서 하첨자 r 은 반경방향을 의미한다. 그리고 $f_{k,ij}$ 는 분할영역 내에서 힘이 작용할 때 힘이 작용하는 길이와 분할영역의 두께간의 비이다[3]. 수직 압력성분의 분포를 보면 r^* 이 0 에 가까워질수록 분할영역의 크기가 작아지기 때문에, 영역에 포함되는 분자수가 작아져서 P_N^* 이 크게 변동하게 된다. 그러나 균등질한 상에서 P_N^* 은 일정해야 하므로 분자동역학 해석에서 이 부분은 제외하고 표면장력을 구했다. 횡방향 압력성분은 수직방향 압력성분으로부터 구할 수 있다[2].

Table 2. Simulation conditions ($L^* = 15.620$ except C1)

| Label | R^* | T^* | $\alpha_{AB} (\beta)$ | r_c^* |
|-------|-------|-------------|-----------------------|---------|
| P1 | 6 | 0.826 | 1.0 (0.00) | 2.5~6.0 |
| S1 | 3~10 | 0.826 | 1.0 (0.00) | 3.0 |
| S2 | 6 | 0.669~0.909 | 1.0 (0.00) | 3.0 |
| S3 | 6 | 0.826 | 2.0(0~0.063) | 3.0 |
| S4 | 6 | 0.826 | 0.0~2.0(0.02) | 3.0 |
| C1 | 3~4.5 | 0.702 | 1.0 (0.00) | 3.0 |

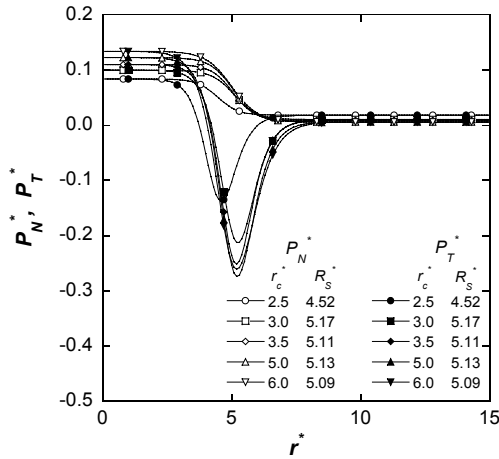


Fig. 2 Effect of the cutoff radius on normal and transverse pressure distributions.

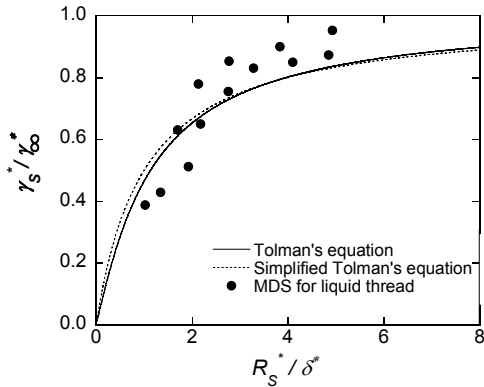


Fig. 3 Comparison of surface tension between simulation results and theoretical values.

$$P_T^*(r^*) = P_N^*(r^*) + r^* \frac{dP_N^*(r^*)}{dr^*} \quad (7)$$

식 (4)와 식 (7)을 이용해서 표면장력을 구하면 다음과 같다.

$$\gamma_S^{*2} = -(P_l^* - P_g^*) \int_0^\infty r^{*2} \frac{dP_N^*(r^*)}{dr^*} dr^* \quad (8)$$

그리고 고전역학에서 원주형 구조물의 곡률과 표면장력에 대한 관계식은 다음과 같다[11].

$$\frac{\gamma_S^*}{\gamma_\infty^*} = 1 - \frac{\delta^*}{R_S^*} + \dots \quad (9)$$

여기서 γ_S 와 γ_∞ 는 각각 극미세사의 표면장력과 무한 평면에서의 표면장력이다. 그리고 Tolman 의 길이 δ 는 다음과 같이 정의 된다.

$$\delta^* = R_E^* - R_S^* \quad (10)$$

여기서 R_E^* 와 R_S^* 는 각각 등분자 분할반경과 장력 표면반경이다. 식 (8), (9), (10)을 이용하면 R_E^* 와 R_S^* 를 구할 수 있다.

$$R_S^{*2} = \frac{1}{(P_l^* - P_g^*)} \int_0^\infty r^{*2} \frac{dP_N^*(r^*)}{dr^*} dr^* \quad (11)$$

$$R_E^{*2} = \frac{1}{(\rho_l^* - \rho_g^*)} \int_0^\infty r^{*2} \frac{d\rho^*(r^*)}{dr^*} dr^* \quad (12)$$

Fig. 3 은 S1 조건으로 분자동역학 해석을 해서 얻은 표면장력과 표면장력 반지름간의 관계를 Tolman 의 식으로부터 구한 관계와 비교하고 있다 [11]. 근사해는 식 (9)이고 엄밀해는 다음과 같다.

$$\ln\left(\frac{\gamma_S^*}{\gamma_\infty^*}\right) = \int_\infty^{r^*} \frac{(\delta^*/r^{*2})(1+\delta^*/2r^*)}{1+(\delta^*/r^*)(1+\delta^*/2r^*)} dr^* \quad (13)$$

근사해는 반경이 작을 경우를 제외하고 엄밀해와 매우 잘 맞는다. 그리고 분자동역학 해석으로 얻은 γ_S^* 는 식 (13)의 예측대로 반경이 증가함에 따라 무한평면의 표면장력에 접근하고 있다. 여기서 γ_∞^* 는 0.540 이다[4]. 해석을 통해 얻은 γ_S^* 는 Tolman 이 예측한 경향과 약간의 차이를 보이고 있다. 그 이유는 Tolman 이 해석하는 대상은 완벽한 원주형 구조물인 반면, 본 연구에서 해석하는 극미세사는 적은 수의 분자로 이루어진 완벽하지 않은 원주 구조이기 때문이다. 그리고 해석이 진행되는 동안 극미세사는 해석공간 내에서 형상이 고정되지 않고 약간씩 움직이게 되는 것도 두 예측이 차이를 보이는 이유이다. 마지막으로 Tolman 의 해석은 δ 가 일정하다고 가정하였으나 실제 분자동역학해석을 통해서 얻은 결과는 등분자 분할 반경이 증가함에 따라 δ 가 미약하게 증가하였다.

시스템의 온도는 극미세사의 표면장력에 영향을 주는 중요한 파라미터 중 하나이다. 시스템의 온도가 80K 이하가 되면 기체분자가 거의 형성되지 않았고, 시스템의 온도가 110K 이상으로 올라갈 경우 극미세사가 해석이 진행되는 동안 붕괴되면서 액적을 형성하였다. 따라서 본 연구에서는 Table 2 의 S2 조건에 대해 분자동역학 해석을 수행하여 Fig. 4 에서 그 결과를 나타내었다. 시스템의 분자 개수가 $N=1880$ 로 일정하기 때문에 시스템의 온도가 증가하면 분자의 운동이 활발해져서 액체의 밀도는 감소하고 기체의 밀도는 증가한다. 따라서 액체에서의 분자간의 인력성분($P_{N,l}^*$)이 수직방향 압력에 미치는 영향력이 크고, 기체에서는

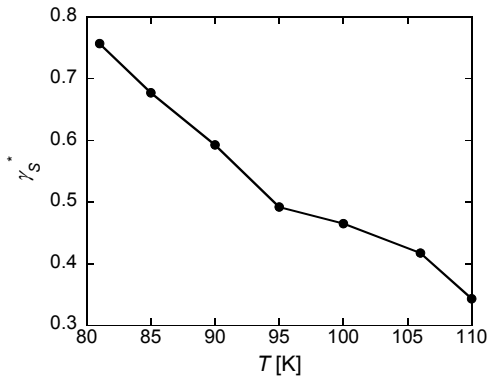


Fig. 4 Effect of system temperature on surface tension.

동역학 성분 ($P_{N,K}^*$)이 수직방향압력에 미치는 영향력이 크기 때문에 시스템의 온도가 증가할수록 P_T^* 은 감소하고 P_g^* 는 증가하게 된다. 또한 장력이 작용하는 표면의 반경 R_s^* 은 5.42(T=81K)에서 4.65(T=110K)로 감소하고 분자의 활발한 운동으로 인해서 계면 영역에서 작용하는 부분 응력인 $|P_N^* - P_T^*|$ 이 크게 감소하게 된다. 따라서 Fig. 4와 같이 표면장력은 시스템의 온도가 증가함에 따라 선형적으로 감소하게 된다.

Table 2의 S3 조건과 같이 용질분자의 인력계수를 $\alpha_{AB} = 2.0$ 으로 고정시키고 용질의 첨가비를 $\beta = 0 \sim 0.063$ 으로 변화시켰을 때 극미세사의 표면장력의 변화를 Fig.5에 나타내었다. $\alpha_{AB} = 2.0$ 이므로 β 가 증가함에 따라 용매분자의 재배열이 촉진되어서 분자들이 액체 극미세사의 내부로 집중되게 된다. 따라서 액체의 밀도 ρ_l^* 이 증가하고 이에 따라 분자간의 거리가 감소하므로 수직방향압력 P_N^* 의 성분 중 구성성분 $P_{N,I}^*$ 의 영향이 증가하게 된다. 따라서 표면 장력은 Fig.5와 같이 첨가비가 증가할수록 선형적으로 감소하게 된다.

용질분자의 성질이 극미세사의 표면장력에 미치는 영향을 알아보기 위해서 Table 2의 S4 조건과 같이 첨가비를 $\beta = 0.02$ 로 고정시키고 인력계수를 $\alpha_{AB} = 0 \sim 2.0$ 의 범위로 0.1 간격으로 변화시키며 분자동역학해석을 수행하였다. Fig.6에서 볼 수 있듯이 $\alpha_{AB} < 1$ 인 경우 용질분자와 용매분자간의 혼화성이 낮아서 표면장력이 거의 변하지 않지만, $\alpha_{AB} > 1$ 인 경우 용매분자의 재배열현상이 일어나므로 표면장력이 큰 변화를 보인다. $\alpha_{AB} \leq 1.0$ 일 경우에는 α_{AB} 가 증가함에 따라 표면장력이 약간씩 증가하게 된다. 또한 $\alpha_{AB} \sim 1.5$ 근처에서 표면장력은 최대값을 가지고, $\alpha_{AB} > 1.5$ 일 때는 표면장력이 급격하게 감소한다. 이를 통해서 2원자 시스템에서 표면장력이 대략 $\alpha_{AB} \sim 1.5$ 에서 최대가 됨을 확인할 수 있었다.

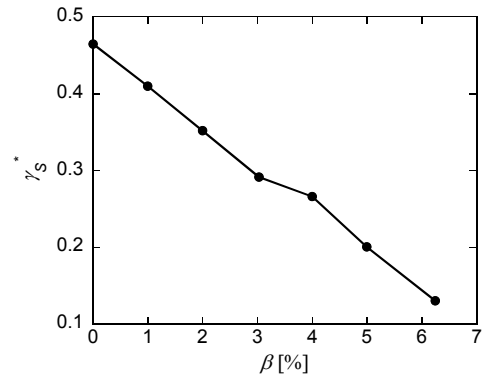


Fig. 5 Effect of the binary ratio of solute molecules on surface tension.

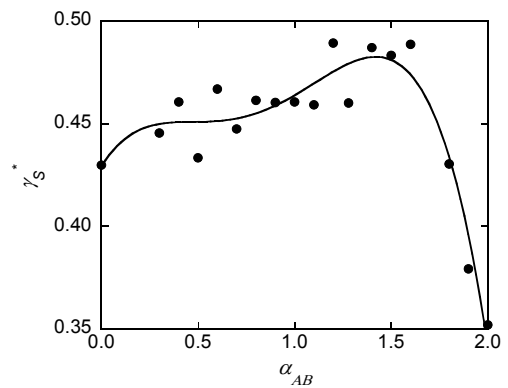


Fig. 6 Effect of attractive coefficients of solute molecules on surface tension.

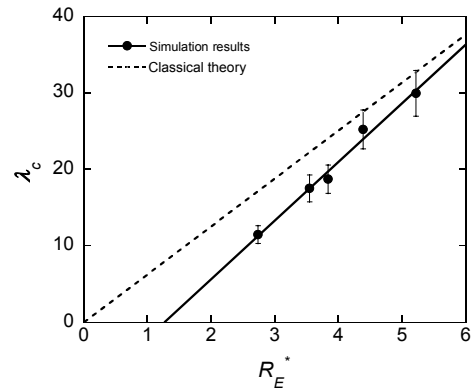


Fig. 7 Relation between the critical wavelength of perturbation and the equimolar dividing radius compared to the classical theory.

분자동역학해석의 장점은 실험적으로 불가능한 매우 작은 시간과 공간 영역에서 임계현상들에 대한 관측과 분석이 가능하다는 것이다. 극미세사의 붕괴 시간과 형태에 대한 분자동역학해석은 이루어진 바 있다[3,5]. 노즐에서 분사되는 액체제트에 섭동이 가해졌을 때 액체반경과 섭동의 임계파장과의 관계는 고전 역학에서 다음과 같이 선형적인 관계를 가진다[12].

$$\lambda_c = 2\pi R_0 \tag{14}$$

여기서 λ_c 와 R_0 는 제트에 가해진 섭동의 임계 섭동과장과 붕괴 직전의 액체제트의 반경이다. Fig. 7 은 Table 2 의 C1 의 조건과 같이 극미세사의 반경에 따른 임계 파장간의 관계를 거시적인 관점에서 해석한 식 (14)와 비교하고 있다. 직선 보정으로 R_E^* 와 λ_c^* 간의 관계를 구해보면 다음과 같다.

$$\lambda_c^* = 2.44\pi(R_E^* - 1.23) \quad (15)$$

고전 역학을 통해서 얻은 식(14)와 분자동역학해석을 통해서 얻은 식 (15)는 약간의 차이를 보이고 있다. 이는 거시적인 관점에서의 해석이 완벽한 원주형의 액체 제트를 대상으로 하고 있는 반면, 본 연구에서 다루는 액체 극미세사가 적은 수의 분자로 이루어져서 완벽한 원주형태를 이루지 못하기 때문이다. 또한 액체 극미세사는 분자간의 결합으로 인해서 생성되므로 최소 반경이 존재하게 되는데 식 (15)를 통해서 극미세사의 최소 반경을 $R_E^* = 1.23$ 로 예측할 수 있다.

4. 결 론

본 연구는 Lennard-Jones 포텐셜을 지니는 아르곤을 이용하여 분자동역학 해석을 수행하였고 이를 통해서 극미세사의 열역학적 물성을 예측하였다. 극미세사의 등분자 분할 반경 및 온도와 2 원자 시스템에서의 용질 분자의 첨가비와 성질에 따른 표면장력의 변화를 관찰하였다. 또한 극미세사에 섭동을 가하여 붕괴가 일어날 때의 등분자 분할 반경에 따른 섭동의 임계과장을 고전적인 이론과 비교하였다. 이를 통해서 극미세사의 최소 반경에 대한 기준을 제시하였다. 본 논문의 결론은 다음과 같다.

(1) 장력이 작용하는 표면 반지름이 증가함에 따라 극미세사의 표면장력이 무한평면에서의 표면장력에 접근함을 확인했다. 이러한 현상은 수정된 Tolman 식이 예측한 값과 일치한다.

(2) 시스템의 온도가 증가함에 따라 분자의 운동이 활발해지면서 분자의 확산이 일어난다. 이로 인해서 등분자 분할반경과 계면의 두께는 증가한다. 또한 표면장력이 작용하는 표면의 반경은 감소하고 부분응력 역시 감소한다. 그 결과 시스템의 온도가 증가함에 따라 극미세사의 표면장력은 선형적으로 감소하게 된다.

(3) 2 원자 시스템의 경우, 인력계수가 큰 용질 분자의 첨가비가 증가할수록 액체 극미세사의 내부로 분자의 집중화 현상이 발생한다. 이로 인해 등분자 분할반경은 감소하고 계면의 두께는 증가한다. 또한 표면장력이 작용하는 표면의 반경은 일정한 반면 부분 응력이 감소한다. 그 결과 용질 분자의 첨가비가 증가함에 따라 극미세사의 표면장력이 선형적으로 감소한다.

(4) 용질분자의 첨가비를 고정시키고 용질분자

의 성질을 변화시켰을 때는 인력 계수가 1.5 근처의 값을 가질 때 극미세사의 표면장력 값이 최대가 된다.

(5) 극미세사의 등분자 분할반경이 증가할수록 섭동의 임계과장도 선형적으로 증가한다. 이러한 현상은 고전역학에서 노즐에서 분사된 액체 제트의 해석과 유사하였으나 극미세사의 최소반경이 존재한다는 점에서 두 해석이 차이를 보였다.

참고문헌

- (1) J.M. Haile, 1992, *Molecular Dynamics Simulation, John Wiley & Sons*, pp.260-267.
- (2) S.M. Thompson, K.E. Gubbins, J.P.R.B. Walton, R.A.R. Chantry, J.S. Rowlinson, 1984, "A Molecular Dynamics Study of Liquid Drops," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 81, No. 1, pp. 530-542.
- (3) J.G. Weng, S.H. Park, J.R. Lukes, and C.L. Tien, 2000, "Molecular Dynamics Investigation of Thickness Effect on Liquid Films," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 113, No.14, pp. 5917-5923.
- (4) J.I. Lee, S.H. Park, O.M. Kwon, Y.K. Choi, and J.S. Lee, 2002, "Characteristics of Thin Liquid Films Using Molecular Dynamics Simulation," *KSME International Journal*, Vol. 16, No. 11, pp. 1477-1484.
- (5) S.H. Park, J.G. Weng, and C.L. Tien, 2001, "A Molecular Dynamics Study on Surface Tension of Microbubbles," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, pp. 1849-1856.
- (6) S. Kawano, 1998, "Molecular Dynamics of Rupture Phenomena in a Liquid Thread," *Physical Review E*, Vol. 58, No. 4, pp. 4468-4472.
- (7) M. Moseler and U. Landman, 2000, "Formation, Stability, and Breakup of Nanojets," *Nature*, Vol. 289, pp. 1165-1169.
- (8) V. P. Carey, 1992, *Liquid-Vapor Phase-Change Phenomena, Hemisphere*, pp. 98-105.
- (9) W.C. Swope, H.C. Anderson, P.H. Berens, and K.R. Wilson, 1982, "A Computer Simulation Method for the Calculation of Equilibrium Constants for the Formation of Physical Clusters of Molecules: Application to Small Water Clusters," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 76, pp. 637-649.
- (10) Robert H. Perry, Don W. Green, 1997, "Perry's Chemical Engineering's Handbook 7th Edition," McGraw-Hill.
- (11) R.C. Tolman, 1949, "The Effect of Droplet Size of Surface Tension," *Journal of Chemical Physics*, Vol. 17, No.3, pp. 333-337.
- (12) Van P. Carey, 1992, *Liquid-Vapor Phase-Change Phenomena, Hemisphere*, pp. 98-105.