

분자동역학 시뮬레이션을 이용한 미세유체역학의 연구 및 응용

! • 한 민 섭 / 서울대학교 마이크로열시스템연구센터, 연수연구원
e-mail • bard2@snu.ac.kr

이 준 식 / 서울대학교 기계항공공학부, 교수

이 글에서는 분자동역학 시뮬레이션이 미세유체역학 분야에 응용된 예를 소개한다.

미세유체역학(microfluidics)은 미세한 양으로 이루어진 유체시스템의 특성을 연구하여 관련 기기나 공정들을 설계하고 조정하며 제조하는 등에 대한 과학기술 분야이다. 이 분야는 MIT가 차세대 10대 기술의 하나로 선정할 만큼 미래핵심기술로 주목을 받고 있으며 활발한 연구와 투자가 진행되고 있다. 실제로 잉크젯 프린터 헤드, DNA 칩 등의 상용화된 제품에 이미 적용되고 있으며, 의공학, 화학, 기계 등의 많은 산업분야에 응용될 잠재력을 가지고 있다.

수년 전부터 미세유체역학은 일반인의 상상력을 자극하여, 수증탐사선(때로는 조종사까지) 축소시켜 인체 내에 투입하고 문제를 해결하는 등의 이야기들을 만들어 내기도 했다. 그러나 실제 크기의 설계를 그대로 축소시켜 제작한다면 제대로 작동하지 않을 가능성이 많다. 무엇보다도 크기가 미소하게 작아짐에 따라 지배적인 물리인자들이 달라지기 때문이다. 일례로 점성저항이나 표면장력 등에 비해 중력이나 관성력의 영향은 무시할 만큼 작아지므로 이에 맞게 설계되어야 한다.

더 나아가 최근에는 나노 크기의 유체시스템에 대한 연구(nanofluidics)도 등장하고 있는데, 여기서는 유체의 물성치나 거동이 거시적인 관점에서 이해되고 있는 것

과는 사뭇 다른 양상을 가진다. 크게 잡아 약 10nm 정도에 불과한 경계영역이 시스템의 상당한 부분을 차지하며 다른 상(phase) 사이의 뚜렷한 구분이 없어져 버린다. 경계면 영역은 이웃한 상들이 변천해 가는 곳이므로 거시적인 관점에 단순화시켜 특성화하기 어렵다.

이렇게 새로운 특성들에 부합하는 설계가 이루어져야 함과 동시에 최근의 눈부신 발전에도 불구하고 여전히 미소영역에 대한 측정, 시험, 제작 등이 어려움 점은 해석기술의 필요를 더욱 절실하게 한다. 분자동역학 시뮬레이션(MD : Molecular Dynamics Simulation)은 기존의 유체역학 해석을 보완하거나 대체할 방법들 중의 하나로 주목 받고 있으며 이에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.

먼저 미세유체역학에서 다루어지는 일반적인 대상들의 예시를 통해 다양한 크기들에 대한 이해를 돕도록 하겠다. 프린터에 쓰이는 잉크젯에서는 작게는 피코리터(pico liter: 10^{-12} L) 단위의 잉크 방울들이 분사된다. 이것은 한 모서리의 길이가 $10\mu\text{m}$ ($1\mu\text{m}=10^{-6}\text{m}$)인 정육면체의 부피에 해당한다. 이것을 또 다른 미세유체시스템이라 할 수 있는 혈관과 비교해 보면, 평상시 혈액은 팔에서 밀리미터 단위의 직경을



갖는 상박동맥을 지나 모세혈관에 접근할 수록 점점 작아진다. 모세혈관은 10 μ m 단위의 직경을 가지고 있는데 가장 작은 것은 건강한 적혈구의 크기보다 약간 큰 정도이다. 이 적혈구 안에는 산소를 운반하는 헤모글로빈이라는 단백질이 포함되어 있고 활성상태의 직경을 약 5nm(1nm=10⁻⁹m) 정도로 볼 수 있다. 마지막으로, 물 분자는 평균 Van der Waals 직경으로 약 2.82Å(1Å=10⁻¹⁰m)의 크기이다. MD에서는 이런 분자들의 궤적을 직접 계산한다.

MD에 대한 기본적인 사항은 이미 본 저널에서 소개된 적이 있으므로¹⁾ 여기서는 미세유체역학과 관련된 측면을 중심으로 다루고자 한다. 기존의 유체역학은 연속체(continuum) 가정을 바탕으로 두고 있다. 즉, 유체역학의 가장 핵심적인 성과 중의 하나인 Navier-Stokes 식(N-S식) - 점성을 가지는 유체의 운동방정식 - 과 안 미끄러짐(no-slip) 경계조건 - 고체면에서 유체는 평행한 방향으로 동일한 속도를 가진다는 조건 - 은 연속적인 물체에 대한 관계식이며, 그것을 근본적으로 구성하는 분자들의 특성은 표면적으로 드러나지 않는다. Stokes가 N-S식을 유도할 때 분자들의 개체적이고 무작위한 특성이 거시적인 관점에서 평균적으로는 연속적이고 균일하며 등방성을 가질 것이라고 가정하였다. 그러나 분자의 존재를 완전히 무시할 수는 없다. 점성은 분자들로 인한 운동량 교환이 있어야 설명될 수 있고, 잉크방울이 물 속에서 번져나가는 것은 열적요동(thermal fluctuation) 때문이다. 이들 특성은 물성치로 포함되며 측정을 통해 얻어진다. 안

미끄러짐 조건도 경계영역에서의 유체분자와 고체원자와의 상호작용을 거시적인 관점에서 단순화시킨 것이다. 경계영역은 부피가 주어지지 않고 경계하는 두 상을 특정 조건으로 연결시키는 수동적 역할만을 한다. 이러한 가정들은 거시적인 관점에서는 큰 문제가 없어 보이며(반면 이것으로 유리창 표면의 물방울이 어떻게 흘러 내리는지 설명하기 곤란하다), 유체역학의 많은 문제들에 성공적으로 적용되어 왔다. 하지만 미세유체역학에서는 문제점들이 드러나기 시작한다. 예를 들어 나노 크기에 비견하는 유동시스템에서는 유동특성의 시간적 공간적 구배가 크게 발생하여 위의 기본적 가정이 적절하지 않을 수 있다. 또 비교적 큰 크기의 시스템에서도 경계영역이 유동에 지배적인 영향을 미치므로 그 특성을 정확하게 구현하는 모델이 요구된다. MD는 유체의 기본 요소인 분자의 관점에서 시작하여 상호작용(inter-molecular interaction)을 구하고 분자의 운동을 뉴턴방정식에 따라 계산하는 과정을 거친다. 그러므로 기본적으로는 상호작용의 정의 외에 따로 발견적(heuristic) 모델링이 포함되지 않으며, 이것은 새로운 현상을 연구하는 미세유체역학 관점에서는 장점이라 할 수 있다.

분자적 관점에서 유동특성을 연구할 수 있는 방법은 MD만 있는 것은 아니다. 몬테카를로(Monte Carlo) 방법과 같은 통계적인 시뮬레이션이 또 하나의 대표적인 방법이다. 특징적으로 이것은 MD와 같이 분자의 시간에 따른 궤적을 추적하여 필요한 정보를 추출하지 않는다. 그보다는 분자집합 전체의 구성(configuration)에 주목하여



가능한 구성들을 무작위적으로 구해내고 이것들의 확률에 따라 구현되는 특성을 정의한다. 이런 점에서 MD는 희박가스와 같은 상에 적용하는 것은 적절하지 않다. 가스분자는 대부분의 시간을 자유롭게 표류하며 다른 분자와의 충돌은 적거나 짧은 시간 동안 발생한다. MD로 직접 모사하기에는 허비되는 시간이 많다. MD로 가스상을 연구하는 경우는 고상과의 경계영역에 대한 것이 많다. 반면에 분자간의 상호작용이 지배적으로 발생하는 액체의 경우는 이상적이

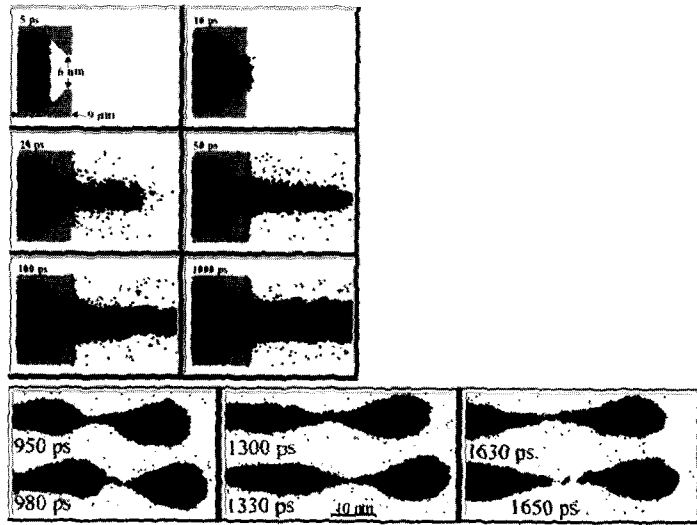


그림 1 나노젯에 대한 MD 시뮬레이션⁽¹⁾

다. 또, 비평형 상태를 자연스럽게 구현할 수 있다. 예를 들어 통계적 시뮬레이션은 평형상태에 근접하다는 등의 가정을 도입한다. 이외에도 두 방법의 특성이 혼합된 직접 모사 몬테 카를로 방법(DSMC : Direct Simulation Monte Carlo)이나 운동학 이론에 바탕을 둔 브라우니안 역학(Brownian Dynamics)이나 Lattice Boltzmann 방법 등도 최근 많이 이용되고 있다.

MD는 적절하고 정확한 분자 포텐셜 (intermolecular potential)이 주어져야 한다. 일반적인 목적에 맞도록 조정된 것들은 점점 많이 제공되고 있는 추세이고, 최초(ab initio) 양자화학적 방법을 통해 직접 구할 수도 있다. 이보다 더 큰 제약은 MD가 구현할 수 있는 시스템의 크기에 있다. 거시적인 크기의 유동을 직접 모사하는 것은 비현실적이다. 현재 컴퓨터의 계산능력으로는 0.1 μ m와 1ns(1ns=10⁻⁹s)이 통상

접근할 수 있는 문제의 한계이다⁽¹⁾.

다음으로는 MD가 직접 적용된 예들을 각 연구들의 특징들을 중심으로 서술하도록 하겠다. 다음에 소개될 두 연구는 MD로 미세 유체시스템 전체를 구현한 예들이다. 첫 번째는 나노젯(nanojet)에 관한 연구이다⁽²⁾. 이것은 프린팅, 나노주사(nano syringe injection), 나노 제조공정 등에 많은 응용 분야를 가지고 있다. 여기서는 금으로 만들어진 노즐을 통해 프로판이 분출되어 유체 방울을 생성하는 과정을 모사하였다(그림 1 참조). 노즐 내부에서는 약 500MPa의 압력과 150K의 온도가 주어졌다. 연속체 모델은 이와 같은 시스템에 대해 유동특성의 큰 변화와 분자적 특성까지 모델링에 포함해야 하는 어려움을 갖는다. 시뮬레이션은 약 10만 개의 분자로 약 2ns 정도 진행되며 병렬연산방식이 적용되었다. 나노젯이 구동되기 위한 디자인 인자들이 제시되었고

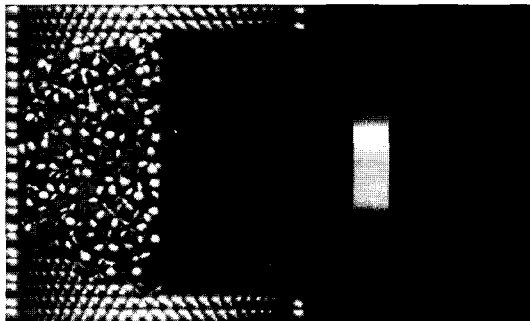
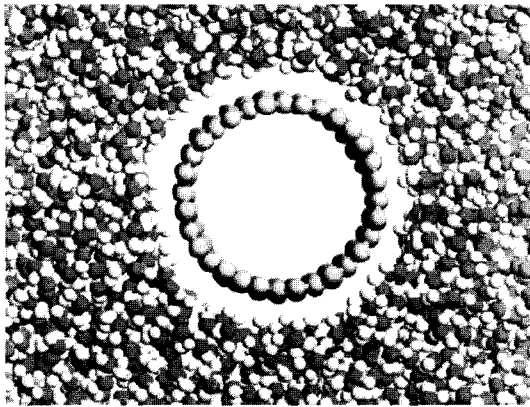
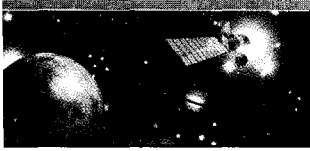


그림 2 탄소나노튜브와 물로 구성된 시스템에 대한 MD 시뮬레이션^(3,4)

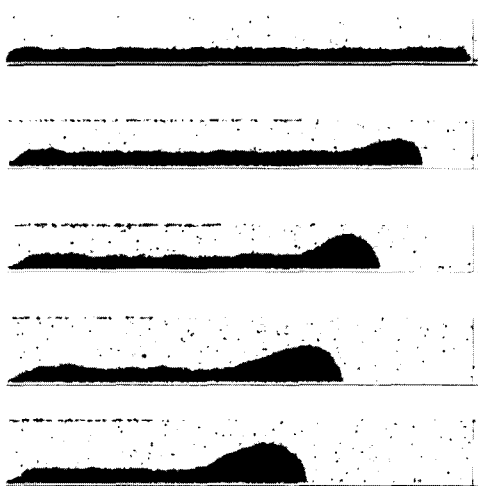


그림 3 탈습윤(dewetting)현상에 대한 MD 시뮬레이션⁹⁾

미소크기에서 중요하게 부각되는 특성도 파악되었다. 특히, 노즐출구 표면의 습윤(wetting) 특성이 젯의 작동여부에 지배적인 영향을 주며, 액체기둥의 파열은 열적요동이 중심적인 역할을 한다는 사실을 밝혔다.

MD로 구현할 수 있는 또 하나의 유체시스템으로 탄소나노튜브(CNT : Carbon Nano Tube)를 들 수 있다. CNT는 독특한 기계적/전기적인 특성으로 마이크로/나노기술에서 유용하게 이용될 기본 요소로 주목받고 있다. 미소유체역학 측면에서는 특히 CNT와 유체와의 상호작용 특성이 중요하며 유체기기의 디자인에 지대한 영향을 미칠 것이다. MD는 불순물 등의 개입 여지가 없이 물질 특성 및 구성 에너지에 대한 다양한 정보를 제공한다. 그림 2는 CNT와 물로 구성된 시스템을 구현한 것이다.^(3,4) 물이 내부와 외부에 존재하는 모든 경우에 있어 CNT는 혐수성(hydrophobic)을 가짐을 보여준다.

다음에 소개될 두 연구는 나노 크기에 비길 만큼 작은 영역에서 중요하게 발생하는 현상들을 모사한 경우들이다. 박막의 전개, 붕괴, 탈습윤(dewetting) 등은 코팅공정을 비롯하여 많은 화학 및 재료공정에 적용되는 현상이다. 그림 3은 탈습윤현상을 모사한 예이다⁽⁵⁾. 유체박막이 비습윤(non-wetting) 특성을 갖는 고체표면에 균일하게 도포되었을 때 작은 요동에도 불안정해지고 붕괴되어 작은 유체방울로 남는다. 이 현상에 대해 특성을 파악하기가 난해한 이유로 미세크기에서 고체표면이 갖는 복잡성-물리적 거칠기, 화학적 불균일성, 결합,

불순물 등-과 접촉선(contact line)-액체/증기간의 경계가 고체와 만나는 영역-의 포함 등을 들 수 있다. 분자적으로 균일한 고체표면에서 탈습윤은 그림 3에서 볼 수 있듯이 반원 모양의 테두리가 형성되어 이것이 증가하면서 진행되며 거시적인 현상과 일치한다. 반면에 주로 현상학적으로 주어지는 탈습윤율의 값을 직접 제공하였다.

미세마찰공학(microtribology)은 미세 유체기기를 작동시키는 데 중요하게 발전되어야 할 분야들 중의 하나이다. 주요 연구 분야로 마이크로/나노 베어링(micro/nanobearing), 하드 디스크나 미세전자 기계시스템(MEMS : Micro Electrical Mechanical System)의 응착(Stiction), 표면 탐침 현미경(SPM : Surface Probe Microscopy)의 고체/고체, 고체/액체 접합(junction) 및 접착(adhesion) 등을 들 수 있다. 그림 4는 hexadecane($n-C_{16}H_{34}$) 박막이 거칠기를 포함하는 금으로 이루어진 표면들 사이에서 운환되는 현상을 보여준다⁽⁶⁾. 초기 수직부하는 없이 온도는 350K이고 상하 표면은 10m/s의 상대속도로 전단력을 준다. 표면간 간격은 23.2Å이며 거칠기간의 간격은 각각 4.6Å, -6.7Å이다. 특히 주목되는 것은 두 거칠기에 의해 유체의 영역이 제한되어 갈수록 고체표면 근접부위에 분자적 층이 현저하게 형성된다는 점이다. 이것은 직접적으로 유체의 점성을 증가시키는 동시에 점탄성효과를 발생시키는 원인이 된다. 층이 갖는 개체적 성질 때문에 간헐적으로 미끄러지는 현상(stick-slip)의 원인이 되기도 한다.

미세유체역학에서 다루어지는 기기나 공

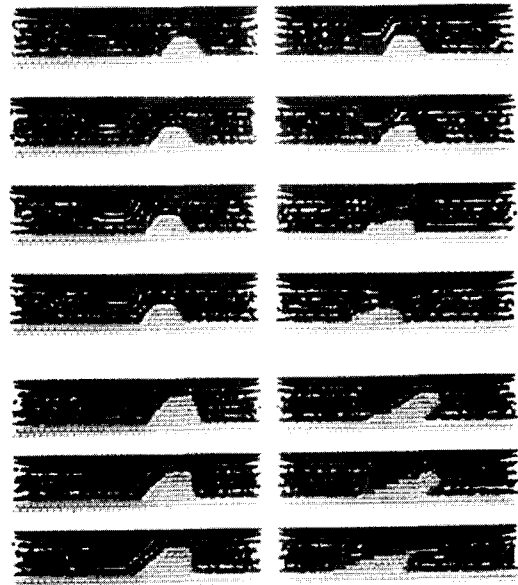


그림 4 금 표면 사이에서의 hexadecane의 운환 현상에 대한 MD 시뮬레이션⁽⁶⁾

정 중 많은 경우들은 MD로 전체를 구현하기에는 어려운 경우가 많다. 또 보통의 MEMS와 같은 μm 크기의 시스템에 대해서는 많은 경우 기존 유체역학이론이 수정없이 적용된다. 그러나 이런 문제들에서도 부분적으로 기존 이론을 보완해야 정확한 예측이 가능한 경우가 발생하는데 경계조건에 대한 것들이 많이 차지한다. 다음에 소개될 연구들은 경계영역에서 발생하는 현상과 그 특성들을 다룬 내용들이다. 그림 5는 액체와 고체의 경계면에서 운동량전달 특성을 분자적으로 고찰한 내용이다⁽⁷⁾. 기체나 중합체의 경우에서 안 미끄러짐 조건은 이미 보완되어 사용되고 있지만 액체의 경우도 일반적인 조건으로 볼 수 없으며 미끄러짐(slip) 조건의 최소 한계 값을 보여준다. 기체/고체 경계면에 대한 모델로 시작된

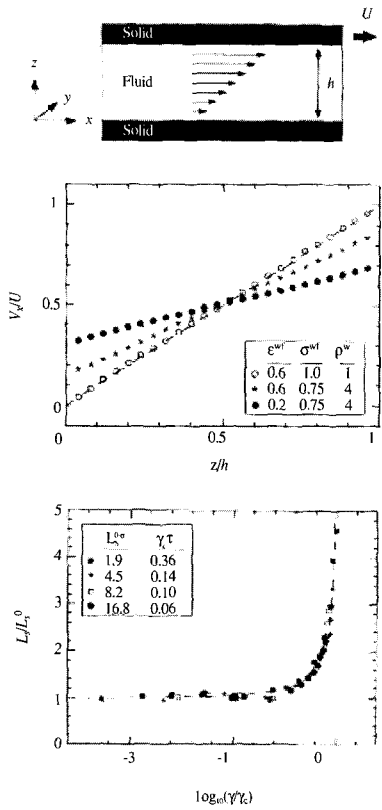
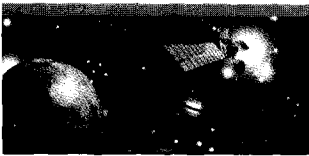


그림 5 고체/액체 경계면에서의 미끄러짐을 MD를 이용하여 고찰한 결과⁽⁷⁾

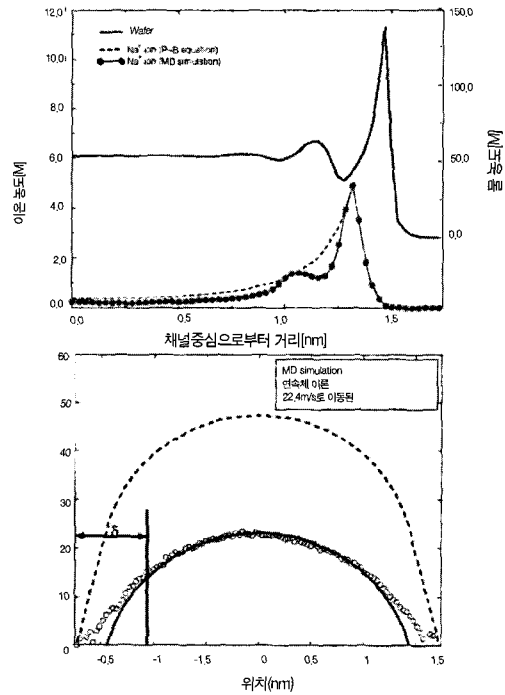


그림 6 염화나트륨 수용액이 실리콘 면 사이에서 전기장에 의해 이동하는 현상을 MD로 계산한 결과⁽⁸⁾

Navier 조건(미끄러짐 양이 전단응력에 비례해 증가하는 조건)을 적용하여 그 미끄러짐 길이(slip length)의 특성을 살펴보면 분자 상호간의 에너지와 분자 크기 및 격자 구조 등이 지배적으로 작용하며, 이들 인자들에 의한 영향을 하나의 곡선으로 포괄할 수 있음이 발견되었다.

DNA 마이크로 어레이(microarray)와 같은 bio-MEMS에서는 동전기적인 힘(electrokinetic force)을 작동원으로 사용하는 경우가 많다. 이에 대한 성능예측이

나 해석은 주로 N-S식과 Poisson-Boltzmann 식(이온분포와 전기장간의 관계를 정의한 식)을 바탕으로 삼는다. 이것은 역시 연속체 가정에 근거한 것으로 이온의 크기를 극미하게 보고 내부(bulk)영역에 대한 모델을 세운 것이다. 그림 6에서는 이 접근 방법의 유효범위를 명료하게 보여준다⁽⁸⁾. 이것은 실리콘 표면 사이에 위치한 염화나트륨 수용액이 전기장에 의해 이동하는 현상을 MD로 계산한 결과이다. 용액과 용질 모두 고체표면 1nm 내에서는 서로간

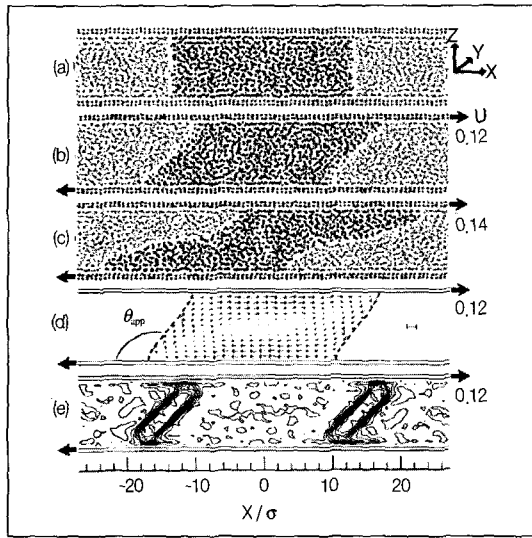


그림 7 접촉선(contact line)의 MD 시뮬레이션⁽⁹⁾

의 상호작용을 통해 층 구조가 형성된다. 이것은 점성도를 증가시키는 요인이 되어 위의 연속체 모델이 유량을 높게 예측하는 결과를 낳는다.

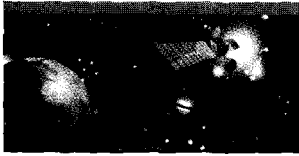
마지막으로, 유리창 위의 물방울이나 컵에 담긴 물과 같이 세 개의 상이 만나는 접촉선(contact line)을 포함하는 유체시스템을 주위에서 쉽게 찾을 수 있다. 최근 여러 MEMS에서도 기포나 미세 액체방울이 주요소인 예를 많이 찾을 수 있다. 그러나 이런 유체시스템에 N-S식과 안 미끄러짐 조건을 적용하면 유체자체를 움직일 수 없다는 예측을 한다. 즉, 무한대의 전단력이 접촉선에 작용해야만 한다. 이 문제를 해결하기 위해서는 접촉선을 포함하는 영역에 부분적으로 위의 모델을 변경해야 한다는 이론이 많이 제기되었다. 그러나 대부분은 특별(ad hoc) 모델들로 직접적으로 측정되

거나 증명된 적은 없다. 접촉선은 경계면들의 경계이므로 특별히 작고 특성화시키기 곤란한 영역이다. 그림 7은 이 문제에 MD를 적용한 예이다⁽⁹⁾. 접촉선에서 미끄러짐이 발생하며 전단응력은 크게 발생하나 발산하지 않는 것이 관찰되었다.

MD의 시간적, 공간적인 제약은 미세유체역학의 많은 문제들을 단독으로 풀어내는 데에는 효과적이지 않을 수 있다는 것을 의미한다. 그런 면에서 다른 모델과 연계시키는 것이 중요한 대안이 될 수 있다. 예를 들어 MD에서의 정보를 중간크기(mesoscale)의 경제적인 모델에 제공하고 그 모델을 직접적으로 문제를 해결하는 데 사용하는 것이 한 방법이다. 즉, 한 문제 내에서 MD와 연속체모델을 연결시켜 동시에 푸는 것도 가능할 것이다. 이와 관련된 연구들은 단순한 유동에 대해서는 성공한 사례도 등장한다. 그러나 이러한 노력들이 실제로 응용되기에는 아직 시작 단계이며, 다양한 시스템에서도 작동하는 동시에 계산 측면에서 경제적인 접근방식의 개발이 요구되고 있다.

참고문헌

- (1) 박승호, 2003, "분자동역학 시뮬레이션의 응용", 기계저널, Vol. 43, No. 3, p. 49.
- (2) Moseler, M. and Landman, U., 2000, "Formation, Stability, and Breakup of Nanojets", Science, Vol. 289, p. 1165.
- (3) Walther, J.H., Jaffe, R., Halicioglu, T. and Koumoutsakos, P., 2001, "Carbon Nanotubes in Water: Structural Characteristics and Energetics", Journal of Physical



- Chemistry B, Vol. 105, p. 9980.
- (4) Werder, T., Walther, J.H., Jaffe, R.L., Halicioglu, T., Noca, F. and Koumoutsakos, P., 2001, "Molecular Dynamics Simulation of Contact Angles of Water Droplets in Carbon Nanotubes", Nano Letters, Vol. 1, No. 12, p. 697.
 - (5) Koplik, J. and Banavar, J. R., 2000, "Molecular Simulations of Dewetting", Physical Review Letters, Vol. 84, No. 19, p. 4401.
 - (6) Gao, J., Luedtke, W.D. and Landman, U., 1995, "Nano-Elastohydrodynamics : Structure, Dynamics, and Flow in Nonuniform Lubricated Junctions", Science, Vol. 270, p. 605.
 - (7) Thompson, P.A. and Troian, S.M., 1997, "A General Boundary Condition For Liquid Flow at Solid Surfaces", Nature, Vol. 389, 25 Sep., p. 360.
 - (8) Qiao, R. and Aluru, N.R., 2003, "Ion Concentrations and Velocity Profiles in Nanochannel Electroosmotic Flows", Journal of Chemical Physics, Vol. 118, No. 10, p. 4692.
 - (9) Thompson, P.A. and Robbins, M.O., 1989, "Simulations of Contact-Line Motion: Slip and the Dynamic Contact Angle", Physical Review Letters, Vol. 63, No. 7, p. 766.

기계 용어 해설

레이저 형광기법(Laser Induced Fluorescence)

레이저 형광기법은 형광입자가 레이저에 의해 여기된 후 발산하는 성질을 이용하여 농도나 온도를 구하는 기법으로서 종래의 기법인 전기전극에 의한 커패시터 프로브에 비해 유동에 대한 교란이 적을 뿐 아니라, 순간적인 평면의 정보를 얻을 수 있으므로 스칼라 확산 연구에 매우 유용한 기법이다.

스테레오 입자영상 유속계(Stereoscopic Particle Image Velocimetry)

스테레오 입자영상 유속계는 얇은 레이저 시트를 이용하여 3차원 속도를 계측할 수 있는 매우 유용한 방법으로 처음에는 두 눈을 통하여 물체를 3차원적으로 인식할 수 있다는 사실로부터 출발하였다. 이 기법은 기본적으로 두 대의 CCD카메라, 싱크로나이저, 레이저와 같은 고가의 장비를 필요로 하며, 실험 후에도 적절한 후처리 과정이 필요하다.