

〈 논문 〉

## 마이크로 채널 내 액체에서의 열삼투현상에 대한 이론 및 시뮬레이션 연구

한 민 섭\*

(2004년 9월 13일 접수, 2004년 11월 15일 심사완료)

### Theoretical and Simulation Study of Thermo-Osmosis of Liquid in Microchannel

Minsub Han

**Key Words :** Molecular-Dynamics Simulation(분자동역학), Thermo-Osmosis(열삼투), Microchannel  
(마이크로 채널)

#### Abstract

Thermo-osmosis of liquids in a microscale channel is investigated by theoretical and simulation study. From the basic set of conservation equations, the temperature and velocity distributions are derived in the function of the given temperatures and pressure gradient. The pressure gradient for a given temperature gradient is then obtained by the molecular simulation. It is shown that the temperature gradient tangential to the surface induces the pressure gradient and thus the flow in the interfacial region between the liquid and channel surface. The thermo-osmotic flow is proportional to the applied temperature gradient, and the factor of proportionality depends on temperature and intermolecular potential. The origin and characteristics of the phenomenon are discussed in molecular details.

#### 기호설명

$A$  : 흑연의 힘 계수  
 $a_s$  : 흑연의 격자 셀 당 면적  
 $D$  : 열삼투 계수  
 $d$  : 채널의 폭  
 $f_z$  : z 방향의 단위질량당 힘  
 $g_1^*$  :  $4\pi/\sqrt{3}$   
 $K$  : Bessel 함수  
 $k_B$  : Boltzmann 상수  
 $L$  :  $T_{hot} - T_{cold}$  의 온도 구배가 주어지는 길이  
 $L_0$  : 1 K 의 온도 구배가 주어지는 길이

$l_i$  : 계면 영역의 두께  
 $m$  : 액체 분자의 질량  
 $P$  : 압력 텐서(pressure tensor)  
 $Pe$  : 페클레트 수(Peclet No.);  $Pe \equiv U_{th}d/\kappa$   
 $q$  : 흑연의 표면 셀 당 원자수  
 $r$  : 액체 분자간 거리  
 $Re$  : 레이놀스 수(Reynolds No.);  $Re \equiv U_{th}d/\nu$   
 $s_1$  :  $\frac{1}{\sigma_{ss}} \left( \frac{x}{\sqrt{3}} - \frac{y}{\sqrt{3}} \right)$   
 $s_2$  :  $\frac{2y}{3\sigma_{ss}}$   
 $T$  : 온도  
 $U_{th}$  : 열삼투 속도  
 $u$  : x 방향의 속도 성분

\* 회원, 서울대학교 마이크로열시스템센터  
 E-mail : bard2@snu.ac.kr  
 TEL : (02)880-7123 FAX : (02)883-0179

$\bar{u}$	:	속도벡터
$x, z$	:	거시 좌표계
$\bar{x}, \bar{z}$	:	미시 좌표계
$\varepsilon$	:	액체 분자간 에너지
$\Delta z$	:	흑연 면들 사이의 거리
$\eta$	:	점도
$\kappa$	:	열확산도(thermal diffusivity)
$\lambda$	:	$d/L$
$\nu$	:	운동학적 점도(kinematic viscosity)
$\rho$	:	액체 밀도
$\sigma$	:	액체 분자간 직경
$\sigma_{ss}$	:	흑연 격자 내 원자간 최소 거리

## 하첨자

$C$	:	저온 영역
$e$	:	평형 상태
$f$	:	유체
$gs$	:	액체와 고체 분자간
$H$	:	고온 영역
$s$	:	고체

## 상첨자

$\cdot$	:	$\sqrt{3}\sigma_{ss}$ 로 나누어진 값
---------	---	--------------------------------

## 1. 서론

마이크로 채널 내에서의 유동에 대한 관심은 MEMS(Micro Electro Mechanical System)와 나노기술의 발전과 더불어 지속적으로 증가되어 왔다. 마이크로스케일 구조물 내에서의 유동은 기존 연속체 기반으로 유도된 열유체 방정식을 여전히 사용하여 접근할 수 있는 것으로 최근까지 보고되고 있다.<sup>(1)</sup> 그러나 스케일 특성에 따른 유동특성의 변화는 거시적인 유동과는 상이한 현상을 발생시킨다. 그 대표적인 예가 표면장력과 같은 계면에서의 특성이 유동을 주도하는 경우이다. 열삼투(Thermo-osmosis) 현상은 그 중 하나로, 온도구배가 주어진 세공(pore)에서 계면에 발생한 유체와 고체간 상호작용으로 인해 유동이 발생하는 현상이다. 이 현상은 다공성 매체(porous media)나 막(membrane) 등을 이용한 많은 공정에 이미 응용되고 있으며, MEMS 나 NEMS(Nano Electro Mechanical System)에서도 점차 중요하게 고려되고 있다.

그러나 이 현상에 대한 그 동안의 연구는 나노 스케일 세공을 대상으로 한 실험적인 연구가 대부분이다.<sup>(2-4)</sup> 세공은 자체로 복잡한 구조와 특성을 가지고 있어 실험적 연구에 미시적인 모델의 뒷받침이 요구된다. 그 동안의 이론적인 측면에서의 연구들은 많은 경우 비평형 열역학에 근거한 현상학적 모델이거나 기체상에 대한 것들이며, 액체에 대한 미시적 수준에서의 체계적인 연구가 부족한 실정이다. 열삼투 현상은 계면에서의 특성에 대한 분자적 수준에서의 이해를 필요로 하기 때문에, 액체의 경우는 특히 이론적인 연구에 어려움이 있다. 비평형 열역학이 바탕을 둔 모델들은 대개 다음과 같은 관계식을 이용한다.

$$U_m = \rho D \frac{1}{T} \nabla T \quad (1)$$

열삼투 속도  $U_m$ 은 계수  $D$ 에 비례하는데, 이 계수는 물질 특성에 좌우되며 분자적인 모델이 없는 상태에서는 체계적인 실험이 뒷받침되어야 한다.

분자동력학 전산모사 (molecular dynamics simulation: MDs)는 기본적인 뉴턴 운동방정식에서 시작하여 분자의 집합적인 특성을 계산해 내기 때문에 새로운 현상을 연구하는 데 적합하다.<sup>(4)</sup> 특히 나노스케일(nanoscale) 유체의 동적, 열적 거동을 대상으로 할 때 장점을 가지고 있기 때문에 계면 특성을 분석하기에 유리하다. 반면에 MDs는 많은 계산량을 요구하기에 마이크로 스케일의 현상조차도 전체적인 구현은 현실적으로는 어렵다.

본 연구에서는 액체의 열삼투 현상에 대한 이론적인 접근을 통해 스케일 특성에 따라 문제영역을 구분한다. 특히 계면영역의 해를 MDs를 통해 구하고, 이를 바탕으로 전체 문제의 해를 얻어내는 방법을 도입한다. 특히 분자간 Van der Waals(VW) 상호작용의 모델을 통해 정밀하게 모사될 수 있는 흑연/아르곤 유체시스템에 대해 MDs를 행하였다. 또 거시적인 해를 기존의 모델과 비교하며, 발생 원인 및 특성 등을 분자적 수준에서의 자세한 정보로 고찰한다. 이온이나 쌍극자 등을 포함하는 유체시스템에서와 같이 VW 외의 분자 상호작용이 추가적으로 존재하는 경우에 대해서는 본 연구에서 다루지 않았다.

## 2. 이론

본 연구에서는 2 차원적(two-dimensional) 마이크로 채널 내의 액체가 일정한 온도 구배가 주어진 경우를 고려한다. Fig. 1은 문제의 개략도를 보여

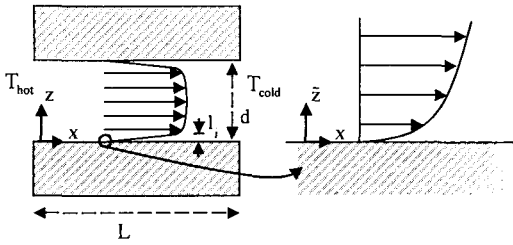


Fig. 1 The schematic of the thermo-osmotic flow

준다. 이 문제에서는 전형적으로 세 가지의 특징적인 길이 스케일이 존재하며 문제접근에 있어 중요한 의미를 지닌다. 첫번째가 온도 구배가 주어지는 길이 ( $L$ )이며 거시적인 스케일이다. 다음으로 채널의 폭( $d$ )으로 마이크로 스케일이다. 마지막으로 계면영역의 두께( $l$ )로 통상 나노 스케일에 해당한다. 온도구배에 의해 유동이 직접적으로 발생하는 곳은 계면 영역이며, 나머지 영역에서는 유동이 수동적으로 발생한다. 따라서 거시적으로는 플러그 유동(plug flow)의 형태를 갖는다. Fig 1의 오른쪽 그림에서  $\bar{z}$  좌표는 계면두께에 맞게 크기가 조정된 것으로 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$\bar{z} = z \cdot (d/l) \tag{2}$$

계면영역에서 유동은 유동전체에 대해 주도적인 역할을 하는데 반하여 상대적으로 미소한 영역만을 차지한다. 따라서 이 영역에서의 유동을 따로 고려하고 전체유동을 다룰 때는 그 결과를 계면에서 미끄러짐 경계조건(slip boundary condition)으로 주면 편리하다.<sup>(10)</sup>

채널 내의 유체는 비압축성 액체로, 그 유동은 한 방향으로만 진행하고(unidirectional), 느린 유동 특성(creeping flow regime)을 가진다고 가정한다. 따라서 관성력과 대류전달의 영향은 점성과 열확산의 영향에 비해 미미하다. 즉, 페클레트수(Peclet No.:Pe)와 레이놀즈수(Reynolds No.:Re)는 무시할 만큼 작다. 세공을 대상으로 한 실험을 예로, 이 현상에서 보통 관련되는 스케일 들을 다음과 같이 고려해 볼 수 있다. 온도 333K, 온도구배 200K/cm 일 때 반경이 약 4 $\mu$ m 인 유리세공 내에서 물의 열삼투 속도를 측정하면 약 3 $\times 10^{-7}$ cm/s 이다.<sup>(2)</sup> 같은 상태에서 물의 열확산 계수와 운동학적 점도는 각각  $\kappa=1.6 \times 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s,  $\nu=4.8 \times 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s 이므로, 페클레트수와 레이놀즈수는 다음과 같은 수준이다.

$$Pe, Re \sim O(10^{-7})$$

이 수치는 세공에 대한 것으로 마이크로 채널에 대해서는 한 두 단위가 커질 수 있다.

채널 내 유체에서의 온도분포를 다음과 같은 무차원화된 방정식으로 정의할 수 있다.

$$Pe \lambda^2 u \frac{\partial T_f}{\partial x} = \left( \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) T_f \tag{3}$$

$$\left( \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) T_s = 0 \tag{4}$$

경계조건은 다음과 같이 주어진다.

$$T_f = T_s \quad \text{at } z = 0 \tag{5}$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad \text{at } z = 1/2 \tag{6}$$

$$T = T_H \quad \text{at } x = x_H \tag{7}$$

$$T = T_C \quad \text{at } x = x_H + L \tag{8}$$

$x_H$ 는  $T_H$ 의 온도를 갖는 위치이다.  $x, z$ 는  $L, d$ 로 각각 무차원화 하였다.  $u$ 는  $x$  방향의 속도로  $u = u(z)$ 이다. 또 길이 스케일들에 대한 비를 다음과 같이 정의한다.

$$\lambda = d/L$$

본 연구에서는  $\lambda$ 의 크기를 먼저 결정하지 않고, 다음과 같은 조건에서 해를 구하려 한다.

$$Pe \rightarrow 0; \lambda \approx 1$$

그렇다면 온도 해를 다음과 같이 점근전개(asymptotic expansion)를 통해 구할 수 있다.

$$T = T^0 + Pe T^1 + \dots$$

$\lambda = 1$ 로 두면, 첫 번째 해에 대한 방정식들은  $T_s^0$

와  $T_f^0$  에 대한 각각의 라플라스 방정식(Laplace Equation)이 된다.

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) T_{f,s}^0 = 0 \tag{9}$$

$T^0$  에 대한 경계조건은 식 (5)-(8)을 동일하게 적용한다.  $x = x_H, x_H + L$  에 각각 주어진 경계조건들은  $z$  방향에 변이를 갖지 않는 제한적인 것이어서, 첫 번째 해  $T^0$  는 경계조건들을 단순하게 만족시키는 것으로 다음과 같다.

$$T^0 = T_H + \frac{T_C - T_H}{L}(x - x_H) \tag{10}$$

두 번째 해  $T^1$  은 다음의 방정식과 경계조건들로부터 구한다.

$$u \frac{\partial T_f^0}{\partial x} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) T_f^1 \tag{11}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) T_s^1 = 0 \tag{12}$$

$$T_f^1 = T_s^1 \quad \text{at } z = 0 \tag{13}$$

$$\frac{\partial T_f^1}{\partial z} = 0 \quad \text{at } z = d/2 \tag{14}$$

$$T^1 = 0 \quad \text{at } x = x_o - x_H \tag{15}$$

$$T^1 = 0 \quad \text{at } x = x_o - x_H + L \tag{16}$$

여기서  $u$  는  $T^0$  에 의해 발생하는 유동으로 MDS 에서 구해지며,  $T^1$  는 수치적인 접근 방법을 요구한다. 이 연구에서는 첫 번째 해에 대한 결과만을 고려하기로 한다.

다음으로  $Re \rightarrow 0$  인 경우에 대한 운동 방정식은 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$-\frac{\partial P_{zz}}{\partial z} + \rho f_z = 0 \tag{17}$$

$$-\frac{\partial P_{xx}}{\partial x} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0 \tag{18}$$

경계조건은 다음과 같다.

$$u = 0 \quad \text{at } \tilde{z} = 0 \tag{19}$$

$$\frac{\partial u}{\partial \tilde{z}} = 0 \quad \text{at } \tilde{z} = 1/2 \tag{20}$$

$f_z$  는  $\tilde{z}$  방향의 단위질량당 힘이며 여기에 고체가 유체분자에 작용하는 분자간 힘을 포함시킬 수 있다. 유동이 발생하는 영역은 계면까지 포함하기 때문에,  $P_{xx,zz}$  로 구분해 놓은 바와 같이 압력은 일반적으로 등방성을 갖고 있지 않다. 압력에 관한 사항은 아래서 더 자세히 논의한다.

위의 지배 방정식에서 유동 분포를 구할 수 있으며 아래와 같은 형태를 갖는다.

$$u = - \int_0^{\tilde{z}} d\tilde{z} \int_{\tilde{z}}^{1/2} dz' \frac{1}{\eta} \frac{\partial P_{xx}}{\partial x}(z') \tag{21}$$

유체 내부에서의 압력을 일정하게 두고 다음의 관계식을 적용한다.

$$\frac{\partial P_{xx}}{\partial x} = \frac{\partial P_{xx}}{\partial T} \frac{dT}{dx} \tag{22}$$

그러면 다음과 같은 관계식을 얻는다.

$$u = - \left[ \int_0^{\tilde{z}} d\tilde{z} \int_{\tilde{z}}^{1/2} dz' \frac{1}{\eta} \frac{\partial P_{xx}}{\partial x}(z') \right] \frac{dT}{dx} \tag{23}$$

유체내부에서의 속도는  $U_h [= u(\tilde{z} = \infty)]$ 로 유체 내부에서의 열삼투 속도로 정의한다.

식 (17), (18)은 압력의 비등방성으로 인하여 그

대로는 유일해(unique solution)을 갖지 못하며 추가적인 관계식을 요구한다. 이것은 계면 영역에서 액체상태를 분자적으로 정의하는 이론이 필요함을 의미한다. 이 연구에서는 MDS 를 이용하여 문제의 조건과 스케일에 부합하는 해들을 부분적으로 얻어 내고, 식 (21)을 이용하여 유동분포를 구해내는 방법을 채택한다. 그것을 위하여 다음과 같은 근사 방법을 도입한다.

$$P(x, z) = P_c'(x, z) + O(\nabla u, \nabla T) \\ = P_c[T^0(x), z] + O(\nabla u, \nabla T) \quad (24)$$

이 근사 방법의 물리적 근거를 다음과 같이 설명할 수 있다. 열삼투 현상에 있어 온도 구배에 의해 계면영역에서 압력구배가 발생할 수 있고, 이 압력 구배에 의해 유동이 발생할 수 있다. 이 유동이 발생한 동적 상태에서의 압력분포는 정적 상태의 분포와 차이를 가질 수 있는데, 이것의 크기는 온도와 속도 구배에 비례하며 무시할 만큼 충분히 작은 크기라고 가정한다. 이 가정은 후에 MDS 결과를 통하여 그 타당성을 다시 논의할 것이다.

계면영역에서 멀리 떨어진 유체 내부에서는 온도 구배에 의해 압력구배가 발생하지 않는다. 마이크로 스케일에서는 부력의 영향이 상대적으로 미미하기 때문이다. MDS 를 이용하여 유체 내부에서 특정 압력을 갖는 계면영역에서의 압력 분포들을 여러 온도에서 구해내며, 그 결과를 다음과 같은 관계를 통해 식 (21)에 대입한다.

$$\frac{\partial P_{xx}}{\partial x} = \frac{P_{xx}(T(x_2), z) - P_{xx}(T(x_1), z)}{x_2 - x_1} \quad (25)$$

이런 과정을 거쳐 식 (21)에서 유동분포를 구한다.

### 3. 시뮬레이션 방법

MDS 는 평행한 두 흑연 벽 사이에 존재하는 아르곤 액체를 대상으로 한다. 이 물질 시스템을 채택한 이유는 분자에 있어 항상 존재하는 Van der Waals 힘이 작용하는 비교적 단순한 시스템이기 때문이다. 이것 이외에 다른 힘들도 고려할 수 있다. 예를 들면 이온을 포함한 경우에는 Coulomb 상호작용에 의한 전기적 double layer 영향도 고려하여야 한다. 이러한 영향들은 대상으로 하는 특정 물질 시스템에 따라 모델에 비교적 용이하게 추가시킬 수 있다.

아르곤에 대해서는 다음과 같은 분자간 Lennard

-Jones 12-6 포텐셜 모델을 사용한다.

$$\phi = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (26)$$

Table 1 에 아르곤에 대한 특성치들이 표시 하였다. 흑연 벽에 대해서는 널리 사용되는 Steele 의 10-4-3 흑연 바닥면(basal plane) 포텐셜을 이용한다.<sup>(6)</sup>

$$f_z = -\frac{d\phi_s}{dz}$$

이 포텐셜은 아르곤과 같이 VW 상호작용이 주로 작용하는 유체의 분자적 거동을 비교적 정밀하게 모사해 낼 수 있다.<sup>(9)</sup>

$$\phi_s = \epsilon_{gs} \frac{2\pi q A^6}{a_s^*} \left[ \frac{2A^6}{5(z^*)^{10}} - \frac{1}{(z^*)^4} - \frac{1}{3\Delta z^* (z^* + 0.61\Delta z^*)^3} \right] \quad (27)$$

아르곤에 대한 흑연 포텐셜의 특성치는 참고문헌 (6)을 참고하였다.

뉴턴방정식의 적분은 velocity Verlet 알고리즘을 사용 하였다.<sup>(7)</sup> 시간차분은  $0.0025 \sigma \sqrt{m/\epsilon}$  의 값을 사용하였다. 온도를 일정하게 유지하기 위하여 가우스 온도계(Gaussian thermostat)를 사용하는 동시에<sup>(5)</sup> 500 시간스텝마다 전체 속도를 일정 비율로 조정하였다(velocity scaling).

유체 내부의 압력을 목표한 값으로 맞추기 위하여 벽간의 간격, 즉, 유체의 부피를 조절하고 압력을 계산하는 과정을 반복적으로 수행하였다. 예를 들어 특정 온도를 갖는 평형상태의 내부 압력이 목표치 보다 낮으면 벽간의 간격을 축소시킨 후

Table 1 Reduced unit according to Argon's

Physical properties	Values
Length( $\sigma$ )	0.34 nm
Temperature( $\epsilon/k_B$ )	120 K
Time( $\sigma\sqrt{m/\epsilon}$ )	2.161 ps

20000 시간스텝 동안 다시 평형상태를 만든다. 그 후 70000 시간스텝 동안 압력을 계산하고 목표치와 비교한다. 이 과정은 내부압력이 목표치에 2% 이내로 접근할 때까지 반복하여 수행한다.

압력텐서(pressure tensor)의 계산은 면계산 방법(method of plane)을 이용하여 수행되었다.<sup>(8)</sup> 유동분포를 얻기위한 식 (21)의 적분은 사다리꼴 공식(trapezoidal rule)을 이용하였다.

마지막으로, 유체 점도의 계산은 비평형 분자동역학 시뮬레이션 (Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation: NEMD)을 수행하였다. 이 때 고체 포텐셜에는 주기적인 힘을 추가하였는데, 이것은 유체의 미끄러짐 현상을 제한하기 위해서 이다.

$$\phi'_s = \phi_s + \frac{2\pi A^6}{a_s^2} \left[ \frac{A^6}{30} \left( \frac{g_1^*}{2z^*} \right)^5 K_5(g_1^* z^*) - 2 \left( \frac{g_1^*}{2z^*} \right)^2 K_2(g_1^* z^*) \right] \times (-2) \cdot \{ \cos(2\pi s_1) + \cos(2\pi s_2) + \cos[2\pi(s_1 + s_2)] \}$$
(28)

매 시간스텝마다 평행한 벽들의 상대적 위치를 이동하여 간단한 전단유동(simple shear flow)을 발생시키고, 속도분포와 전단응력 분포를 구하여 점도를 얻었다.

#### 4. 결과 및 고찰

##### 4.1 온도별 압력과 밀도 분포

MDS를 통해 유체내부에서의 압력이  $0.405 \epsilon/\sigma^3$  이고 온도가  $0.95 \sim 1.35 \epsilon/k_B$  범위의 유체특성의 분포를 얻었다. 주어진 조건의 대부분 영역에서 아르곤은 액체상태로만 존재한다. Fig. 2 는 고체 표면에 평행인 방향( $x$ )의 압력 분포를 보여 준다. 각 온도 별로 구해진 압력 분포들은 유체내부에서, 즉, 고체에서 충분히 멀리 떨어진 지점에서, 목표로 하는 압력으로 접근함을 볼 수 있다. 고체 표면으로부터 약  $8 \sigma$  이상의 위치에서는 평균 압력이 목표 압력과 1.5% 오차내에서 일치하고 있다. 그러나 이러한 상태는 고체에 근접한 곳에서는 더 이상 유지되지 못한다. 고체 면에 수평 방향의 압력은 고체로 가까이 갈수록 점점 증가하는 동시에 증감을 주기적으로 반복한다. 또한 유체 내부에서는 일치하던 압력들이 온도에 따라 차이가 발생한다. 온도가

낮을수록 압력의 증가량이나 반복적 증감의 정도가 커지는 것을 볼 수 있다.

Fig. 3 에서는 온도의 차이에 따른 수평 방향의 압력 구배를 온도별로 보여준다. 앞에서 기술한 대로 유체 내부에서는 압력 구배가 존재하지 않으나,

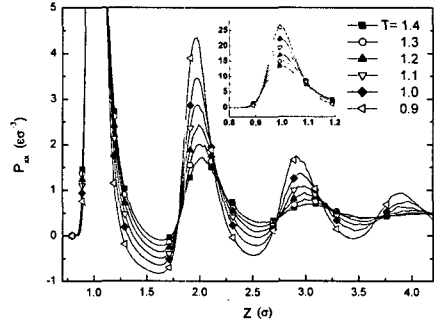


Fig. 2 Tangential pressure profile ( $P_{bulk}=0.405$ )

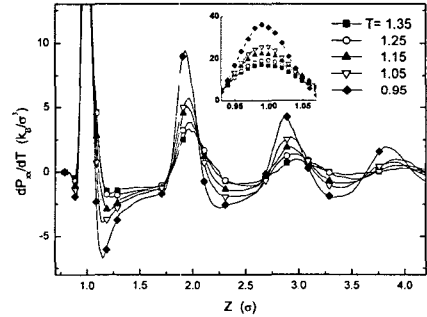


Fig. 3 Tangential pressure gradient with respect to temperature ( $P_{bulk}=0.405$ )

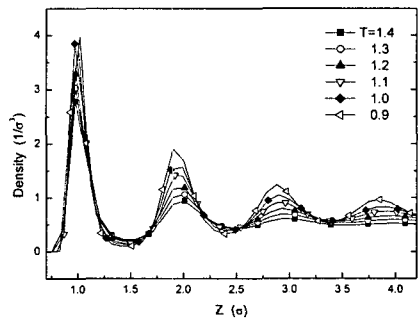


Fig. 4 Density profile ( $P_{bulk}=0.405$ )

고체에 근접한 곳에서는 무시할 수 없는 양의 압력 구배가 발생한다. 마찬가지로 온도가 낮을수록 압력 구배와 반복적 증감의 양이 커짐도 볼 수 있다.

이러한 결과들은 고체와 액체 사이의 계면이 가지는 특성에서 기인하는 것으로 밀도 분포를 통해서 더 분명하게 설명할 수 있다(Fig. 4). 액체 분자들의 집합적인 힘보다 상대적으로 강한 고체의 인력으로 인해, 액체의 밀도는 유체 내부에서 보다 증가하게 된다. 거기에 덧붙여 유체 분자들간의 척력은 밀도가 높아짐에 따라 더욱 커져서 고체 면에 평행한 정렬을 하게 된다.

따라서 고체에 가까워 질수록 액체의 밀도 분포는 증가하는 동시에 증감을 반복하는 형태를 가지게 된다. 이러한 특성은 끈 압력과 압력 구배에 반영되어 있다. 또 고체에 의한 이러한 액체상태의 변화는 주어진 온도 구배에 대한 고체 면에 평행한 방향으로의 압력 구배를 발생시키는 요인이 된다.

4.2 열삼투 속도

점도는 앞 장에서 기술한 바와 같이 단순 전단 유동을 유도하여 계산하였다(Fig. 5). 점도는 온도가 증가함에 따라 감소하는 특성을 갖는다. 점도 계산시에 전단 유동의 발생에 의한 비평형 상태의 압력이 변화하는 정도를 조사하였다. 단순 전단 유동에서 최대 전단율  $0.01\sqrt{\epsilon/m}/\sigma$ 에서 최대 10% 이내의 압력 변화가 발생하였다. 열삼투 현상에 의한 최대속도를  $0.02\sqrt{\epsilon/m}/L_0$  크기로 두고 이 크기의 속도변화에 대한 유효거리를  $3\sigma$ 로 두면, 전단율은 약  $7.0 \times 10^{-3}\sqrt{\epsilon/m}/L_0$ 로 추정된다. 보통의 온도구배를 100K/cm 정도로 정하면,  $L_0$ 은 약  $2.94 \times 10^3 \sigma$ 가 되고 현 시스템의 열삼투 현상에서 최대 전단율은 약  $2.38 \times 10^{-8}\sqrt{\epsilon/m}/\sigma$ 이다. 이것은 단순 전단 유동에서의 수치에 비해 크게 작은 수치이며 압력 변화도 이에 따라 미미할 것으로 판단된다. 그러므로 식 (24)에 도입한 가정은 적절하다고 판단된다.

Fig. 6은 식 (23)에 의하여 계산한 유체내부 속도와 온도 구배와의 관계를 보여주고 있다. 식 (1)에서와 같이 일정 온도에서 열삼투 속도가 주어진 온도 구배와 선형적으로 비례하는 것은 대체로 시뮬레이션 결과와 일치한다.  $-dT/dx \cdot L_0$ 의 값이 0.015 이하인 경우에는 변동 폭이 더 두드러지나, 작은 온도 구배에서의 계산 편차로 보인다.

Fig. 7은 열삼투 속도의 온도에 따른 경향을 보여주고 있다. 온도  $1.1 \epsilon/k_B$  이하에서는, 온도가

감소함에 따라 열삼투 속도가 감소하며 하한점에서는 속도 방향이 바뀌기까지 하는 것을 볼 수 있다. 반면에 온도  $1.1 \epsilon/k_B$  이상에서는 온도가 증가함에 따라 속도가 비교적 완만하게 감소하는 경향을 가진다. 이것은 식 (1)에서 비례상수  $D$ 가 온도에 민감한 함수임을 보여준다.

열삼투 현상의 발생 원인과 특성을 식 (23)과 Fig. 2의 결과를 통해 고찰해 볼 수 있다. 유체 내부에 온도 구배가 주어진 경우, 저온인 영역은 밀도가 상대적으로 크게 유지된다. 따라서 고체 면 근처에서 밀도가 증가할 때, 저온인 영역의 밀도 증가율이 더 커지게 된다. 이것은 직접적으로 압력 분포에 영향을 미쳐서, 저온인 영역의 압력이 전반적으로 고온인 영역보다 높아지는 결과를 낳는다. 이것은 고체 면에 평행한 방향으로 압력 구배가 발생하며, 고온 방향으로 유동이 발생하는 원인이 된다. 이러한 현상에 반대적인 작용을 하는 요소들도 존재한다. 첫 번째가 열적 운동성으로, 온도

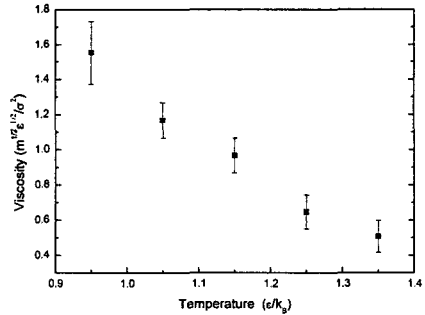


Fig. 5 Viscosity of argon near graphite surface

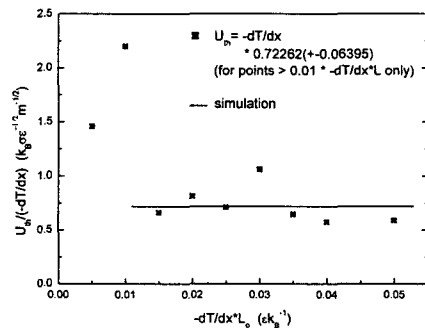


Fig. 6 Relationship between thermo-osmotic velocity and applied temperature gradient (T=1.15)

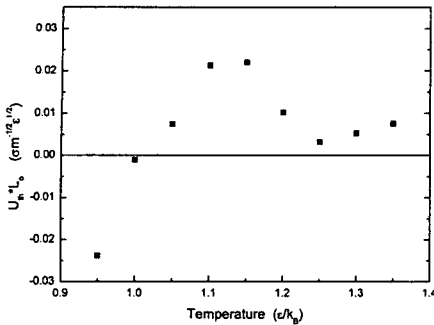


Fig. 7 Thermo-osmotic velocity

가 높을수록 분자 운동에너지가 커져서 고체면 근처에서 밀도가 증가하는 경향이 줄어들게 된다. 따라서 고온으로 갈수록 열삼투 속도가 줄어드는 경향을 갖는다. 두 번째가 유체 분자간의 단 범위(short-range) 척력으로 인한 정렬로 압력 분포가 증감을 반복하는 구조를 갖게 하며, 열삼투 속도를 발생시키는 작용 특성(mechanism)을 감소시킨다. 이 같은 현상은 저온에서 크게 작용하며, 조건에 따라 저온 영역으로 유동을 발생시키는 역할을 하기도 한다.

## 5. 결론

본 연구에서는 분자동력학 전사모사를 이용하여 마이크로 채널 내 액체의 열삼투 현상에 대한 연구를 수행하여 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- (1) 마이크로 채널 내 액체에 온도 구배가 주어진 경우에 부력의 영향과 관계없이 액체와 채널면 사이의 경계 영역에서 압력 구배가 발생한다.
- (2) 이 현상은 채널 면의 고체 분자들이 액체분자들에 작용하는 Van der Waals 힘에 의한 것이며 모든 물질 시스템에 일반적으로 적용된다. 이온이나 쌍극자 등의 포함하는 유체에 대해서는 부가적인 분자상호작용 모델을 통한 구현이 필요하다.
- (3) 압력 구배는 온도와 물질들을 구성하는 분자들간의 포텐셜에 따라 결정된다. 이에 따라 경계

영역에서 유동이 발생하며, 거시적인 관점에서는 미끄러짐 조건(slip condition)에 의한 플러그 유동(plug flow)의 형태를 갖는다.

(4) 열삼투 속도는 주어진 온도 구배에 선형적으로 비례하며, 그 비례상수는 온도와 분자 포텐셜의 지배를 받는다.

## 후기

본 연구는 한국과학재단 지정 마이크로 열시스템 연구센터와 삼성코닝의 지원으로 수행하였으며 이에 감사드립니다.

## 참고문헌

- (1) Stone, H.A. and Kim, S., 2001, "Microfluidics: Basic Issues, Applications, and Challenges," *AIChE J.*, Vol. 47, pp. 1250~1254.
- (2) Derjaguin, B.V., Churaev, N.V. and Muller, V.M., 1988, *Surface Science*, Consultants Bureau (Plenum), New York.
- (3) Ash, R., Barrer, R.M., Edge, V., Foley, T. and Murray, C.L., 1993, "Thermo-Osmosis of Sorbable Gases in Porous Media. Part III. Single Gases," *J. Membrane Sci.*, Vol. 76, pp. 1~26.
- (4) Yuan, S.W.K. and Frederking, T.H.K., 1983, "Darcy Law of Thermo-Osmosis for Zero Net Mass Flow at Low Temperatures," *Proc. ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference*, Vol. 2, pp. 191~197.
- (5) Rapaport, D.C., 1995, *Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, Cambridge.
- (6) Steele, W.A., 1973, "The Physical Interaction of Gases with Crystalline Solids. I. Gas-Solid Energies and Properties of Isolated Adsorbed Atoms," *Surf. Sci.*, Vol. 36, pp. 327~352.
- (7) Allen, M.P. and Tildesley, D.J., 1987, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford. 494.
- (8) Todd, B.D., Evans, D.J. and Daivis, P.J., "Pressure Tensor for Inhomogeneous Fluids," *Phys. Rev. E.*, Vol. 52, pp. 1627~1638.
- (9) Lee, J.I., Park, S.H., Kwon, O.M., Choi, Y.K. and Lee, J.S., "Characteristics of Thin Liquid Films Using Molecular Dynamics Simulation," *KSME International Journal*, Vol. 16, No. 11, pp. 1477~1484.
- (10) Probstein, R.F. 1994, *Physicochemical Hydrodynamics*, John Wiley & Sons, Inc., New York.