<학술논문>

고체 면에 흡착된 박막에서의 분리압력 특성에 관한 연구

한 민 섭[†] (2008년 9월 4일 접수, 2009년 1월 9일 수정, 2009년 1월 19일 심사완료)

Disjoining Pressures of Nanoscale Thin Films on Solid Substrate

Minsub Han

Molecular Dynamics Simulation(분자동력학 전산모사), Stability(안정성), Evaporation **Key Words :** (증발), Condensation(응축)

Abstract

The disjoining pressure is an important physical property in modeling the small-scale transport phenomena on thin film. It is a very useful definition in characterizing the non-continuum effects that are not negligible in heat and mass transport of the film thinner than submicro-scales. We present the calculated values of disjoining pressure of He, Kr and Xe thin films absorbed on graphite substrate using Molecular Dynamics Simulation (MD). The disjoining pressure is accurately calculated in the resolution of a molecular scale of the film thickness. The characteristics of the pressure are discussed regarding the molecular nature of the fluid system such as molecular diameter and intermolecular interaction parameters. The MD results are also compared with those based on the continuum approximation of the slab-like density profile and the results on other novel gases in the previous study. The discrepancies of the continuum model with MD results are shown in all three configurations and discussed in the view point of molecular features.

	기호설명 	그리스	느문자
$\begin{array}{c} A\\ C\\ G\\ T\\ U\\ a_s\\ a_1 \end{array}$: Hamaker 상수 : 상수 : 과도 자유에너지 : 온도 : 포텐셜에너지 : 흑연의 격자 셀 당 면적 : 흑연의 격자 셀 당 면적	$\Pi \\ \varepsilon \\ \kappa \\ \mu \\ \rho \\ \sigma \\ \overline{\sigma}$: 분리압력(disjoining pressure) : 상호작용 에너지 : 곡률 : 화학 포텐셜 : 밀도 : 분자 직경 : 표면장력
h	: 박막 두께	하첨지	다
p	: 압력	bulk	: 내부
q	: 흑연의 표면 셀 당 원자수	l	: 액체
r	:상대거리	n	: 수직방향
z	: 고체면까지의 거리	s	: 고체
Ť	회원, 인천대학교 기계공학과	v	: 기체
	E-mail : mhan@incheon.ac.kr	sf	: 고체와 유체간의
	TEL : 032-770-8411	ff	: 유체와 유체간의

101

1. 서 론

어느 기계 시스템에서나 고체 표면 위에 얇게 덥혀져 있는 액체 막을 쉽게 발견할 수 있다. 단 순히 자연적으로 응축되고 흡착되어 있는 액막 뿐 아니라 보호 목적의 코팅, 정밀 기계의 윤활, 반도 체 공정에서의 포토레지스트, 히트 파이프의 증발 막 등 다양한 기계 시스템에 응용되어 중요한 기 능을 담당한다. 이것들의 두께는 경우에 따라 1mm정도에서 작게는 1nm에 육박하는 경우도 있 다. 이 액체 박막이 두께가 1µm이상의 수준이라 면 기존의 연속체에 기반한 유체역학 이론을 대체 로 적용할 수 있다. 예를 들어 윤활이론 (Lubrication Theory)에 근거하여 다양한 시스템에 적용되는 액체 박막들에 대한 정확한 모델을 세울 수 있으며 이에 관한 많은 연구가 진행되어 왔 다.(1,2)

최근 들어서는 특히 두께가 1µm 이하인 극미세 박막이 포함된 유체시스템에 대한 관심이 늘어 가 고 있다. 이것은 정밀하고 소형화된 기계 시스템 에 대한 관심의 증폭, 즉, 주로 전자 기기, 마이크 로 기기, 나노 기술 등의 발전과 맥을 같이하고 있다. 그러나 크기가 1µm 이하인 유체에서는 기존 의 거시적 관점에 입각한 이론들로는 설명하기가 어려운 현상들이 나타나기 시작하며, 연속체에 기 반을 한 모델을 보완하거나 더 나아가 다른 기법 의 모델링을 사용할 필요가 있다.

예를 들어, 고체 면에 완전 흡착된 액체 박막은, 특정 두께 이하에서 두께가 줄어들수록 포화상태 에서 보다 더 높은 내부 압력을 가지는 특성을 보 여준다. 이 과도압력은 두께에 따라 변하므로, 액 체 방울의 퍼짐이나 박막의 안정성, 접촉선 (Contact Line)에서의 증발 등에 직접적인 영향을 미친다. 그러므로 이런 현상들의 연구하기 위해서 는 과도압력의 특성을 이해하고 파악하여 모델에 포함시킬 필요가 있다. 이 과도 압력에 대해 가장 널리 쓰이는 정의 중의 하나가 분리압력(disjoining pressure)이다.⁽²⁾ 분리압력은 내부(bulk)에 존재하는 유체가 인접한 다른 상(phase)의 물질과 상호작용 함으로써 발생한다. 즉, 위의 예에서 고체가 유체 내부의 분자들과 상호작용을 하여 유체내부의 특 성을 변화시켜 발생하게 된다. 그러므로 분리압력 의 크기는 인접한 다른 상의 분자와 박막내의 유 체분자간에 상호작용의 영향에 비례하며, 기체 상 에 매달려 있는 액체 박막(free film)에서도 발생한 다.

그 동안 분리압력을 정량화하려는 노력은 다방 면으로 진행되어 왔다.(3) 이론적인 측면에서는 각 상(phase)들의 연속체 가정을 유지한 상태에서 고 전적인 분자 포텐셜에 근거하여 직접 계산하거나, 좀더 정확히는 분자의 분극률(polarizability)에서 시 작하여 유도해내기도 한다. 그러나, 이런 모델들은 기본적으로 연속체가정을 유지하고 각 상(phase)들 의 밀도가 일정한 값을 갖고 계면이 여전히 무한 소의 영역을 차지하고 있다고 가정하는 한계를 가 지고 있다. 계면영역의 크기는 경우에 따라 나노 크기에 이르기 때문에 박막의 두께가 나노 수준에 이르면 위의 모델들이 문제가 될 가능성이 많다. 실험적인 방법으로는 SFA(Surface Force Apparatus) 를 이용하거나 광학적인 측정 방법을 사용하는 것 이 보통이다. 박막의 두께가 작아질수록 시스템의 제약이나 측정의 정밀도 유지의 어려움이 두드러 지게 된다.

분자동력학 시뮬레이션(MD)은 분자 각각의 운 동 궤적을 모두 추적하여 계산하고 이것으로부터 시스템 전체의 정적, 동적 특성을 모사해낸다. 모 든 개체의 운동은 분자간의 상호포텐셜에 근거하 며 그 외의 주된 모델링은 기본적으로 없다. 그러 므로 시스템의 특성을 분자 수준의 정확도를 가지 고 구현해낼 수 있는 장점을 가지고 있다. 최근 들어 MD를 이용하여 분리압력을 정밀하게 계산 한 연구가 소개되고 있다. 참고 문헌 [4]에서는 MD를 이용하여 자유 액체박막에 대한 분리압력 을 처음으로 계산해 내었다. 최근에는 네온과 아 르곤이 흑연 면에 흡착되었을 때의 분리압력을 계 산하여 MFA(Mean Field Approximation)와 차이가 나는 것을 지적하는 연구가 수행되었다.⁽⁵⁾ 그러나 네온과 아르곤의 분자 물성과 상호작용 특성이 크 게 다르지 않아, 분자 특성에 따른 분리압력의 변 화를 두드러지게 비교하기 어려운 점이 있었다. 본 연구에서는 분자 특성의 차이가 좀 더 뚜렷한 헬륨과 크립톤, 크세논 등의 결과를 비교해 보고, 밀도 변화의 영향도 정량적으로 고려해 보겠다.

이러한 연구는 다음 단락에 제시되는 바와 같이 유체 박막의 지배방정식을 유도하는데 이용되어 예를 들어 박막의 퍼짐이나 냉각 현상 등과 관련 된 연구 개발에 응용될 수 있다.

2. 배경

고체 표면 위에 흡착되어 있는 액체 막에 있어 두께가 특정 값 이하로 줄어들게 되면 그 박막은 거시적인 특성에서 벗어난 성질을 가지게 된다. 예를 들면, 액막이 고체표면에 완전습윤(complete wetting)되는 경우에 액막 내의 포화압력보다 증가 하게 된다. Figure 1은 이런 현상을 도식적으로 보 여 준다. 박막은 접하는 계면이 평평하여 증기와 압력차이가 존재하지 않는다. 반면에 액체내부 (bulk liquid)는 계면에 곡률이 존재하며 증기압보다 낮은 압력으로 유지된다. 즉, 박막에 액체내부보다 높은 압력이 형성된다. 이것은 박막의 두께가 얇 아짐에 따라 고체가 액막에 미치는 원거리 분자력 (long-range intermolecular forces)이 무시할 수 없는 수준에 이르기 때문에 발생하는 현상이다. 이런 특성을 정량화하기 위해 분리압력을 정의하게 된 다.

$$\Pi = p_n - p_{bulk} \tag{1}$$

분리 압력은 과도자유에너지(excess free energy) 의 개념을 이용하여 열역학적으로 엄밀하게 정의 할 수 있다. 박막의 두께가 증가함에 따라 박막이 잃는 과도자유에너지의 양이 곧 분리 압력이다.

$$\Pi = -\frac{\partial G}{\partial h} \tag{2}$$

특정 박막이 갖는 과도자유에너지는 시스템에 존 재하는 모든 물질들 간에 상호작용을 고려하면 얻 을 수 있다. 예를 들어, 각 상들을 구성하는 분자 들이 충분히 원거리에서 상호작용하고 각 상들의 밀도가 일정하다는 가정을 세우면 비교적 수월하 게 계산해낼 수 있다. 주어진 시스템의 분자들이 감쇄(retardation)가 없는 van der Waals 힘으로만 상 호작용하는 경우에는 다음과 같은 관계를 갖는다.

$$\Pi = \frac{A}{6\pi h^3} \tag{3}$$

분자간의 상호작용을 Lennard-Jones 포텐셜로 대표 하면 Hamaker 상수 A는 다음과 같다.

$$A = 4\pi^{2}(\rho_{l} - \rho_{v})(\rho_{s}\varepsilon_{sf}\sigma_{sf}^{6} - \rho_{l}\varepsilon_{ff}\sigma_{ff}^{6}) \quad (4)$$

분리 압력은 미소 박막의 정적, 동적 특성을 모 델링하는 데에 중요한 역할을 한다. 예를 들어 Van der Waals 힘이 충분한 영향을 미치고 표면 장 력이 전 영역에서 일정하게 작용할 때, 박막을 지 배하는 방정식의 전형적인 형태는 다음과 같다.⁽¹⁾

$$\mu \partial_t h + \frac{A}{6\pi} \partial_x \left(\frac{\partial_x h}{h} \right) + \frac{1}{3} \sigma \partial_x \left(h^3 \partial_x^3 h \right) = 0 \quad (5)$$

이 식에 따르면 박막의 두께가 얇아질수록 분리 압력은 박막의 거동에 지대한 영향을 끼친다. 또, 박막에서 증발이나 응축이 일어나는 경우에 있어 질량유속(mass flux)는 보통 다음과 같이 모델링된 다.⁽⁶⁾

$$\dot{m} = C_1 \left(T_{surf} - T_{vapour} \right) - C_2 \left(\sigma \kappa + \Pi \right)$$
(6)

이 두 식에 따르면 박막의 두께가 얇아질수록 분 리압력은 박막의 거동에 지배적인 영향을 미치며 그 경향은 가속화된다. 그러므로, 극미소 박막에 있어서는 특히 분리압력을 정밀하게 모델링하는 것이 박막의 동적 거동을 예측하는 데에 중요한 요소를 차지한다.

분리압력은 분자동력학 시뮬레이션을 이용하여 다음과 같이 정밀하게 계산해낼 수 있다. 특정두 계의 박막에 대한 수직 압력(*p_n*)을 먼저 계산한다. 다음, 그 박막과 Figure 1 에서와 같이 평형을 이루 고 있는 액체내부의 압력(*p_{bulk}*)을 다음 Gibbs-Duhem식에 근거한 관계식에서 구해낸다.⁽⁴⁾

$$p_{bulk} = p_{sat} - \rho_{bulk} \left(\mu_{sat} - \mu_{bulk} \right) \tag{7}$$

마지막으로 식 (1)과(7)을 이용하여 분리압력을 계산해 낸다. 시뮬레이션에 있어 구체적인 계산 방법은 다음 장에 기술한다.

3. 방법

본 연구에서 행한 시뮬레이션에서는 모두 축소된 단위(reduced unit)가 사용되었다.(Table2) 다음 단락의 결과에서는 축소된 단위에 대응하는 물리적 단위들 로 환산된 결과를 제공하였다.(Table 2) 본 연구에서 는 분자동력학의 시뮬레이션 공간을 202.96×14×14σ³ 으로 하고 최고 12000 개의 단원자 분자들을 시뮬레 이션 하였다. 운동 방정식은 velocity Verlet 알고리즘 을 사용하여 수치적으로 적분하였고,⁽⁷⁾ 시간 스텝은 0.0025 ε^{-1/2}σ³을 사용하였다.

유체 내에서 단원자 분자간에 작용하는 힘은 다음 의 절단이동된 (truncated and shifted) Lennard-Jones 포텐셜에 근거하여 계산되었다.

$$U = \begin{cases} U_{LJ}(r) - U_{LJ}(r_c) & \text{if } r < r_c \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$
(8)

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$
(9)

포텐셜이 절단되는 거리는 r_c = 6.5 s로 하였다. 유체 내 단원자 분자와 고체 사이에 작용하는 힘은 고체 포텐셜을 사용하여 구하였다. 여기서는Steele이 제안 한 흑연의 포텐셜을 사용하였다.

$$U_{s} = \frac{2\pi\varepsilon_{fs}qA^{6}}{a_{s}/a_{1}^{2}} \times \left[\frac{2}{5}A^{6}\left(\frac{a_{1}}{z}\right)^{10} - \left(\frac{a_{1}}{z}\right)^{4} - \frac{a_{1}^{4}}{3\Delta(z+0.61\Delta)^{3}}\right]^{(10)}$$

각 단원자분자들에 대한 매개변수들은 Table 1 에 정리하였다.

분리압력은 식 (1)과 (7)을 사용하여 구하였다. 각 압력값들은 평평한 액체 박막과 접한 기체 상 에서 계산하여 얻었다. 먼저 수직압력(*p_n*)은 Irving-Kirkwood 식을 사용하여 계산되었다.⁽⁸⁾ 화학포텐셜 (μ)은 Widom의 투입방법(Insertion Method)를 사용 하여 구하였다.⁽⁷⁾ 유체 내부(bulk)의 특성을 구하기 위해 두께가 충분히 커서 각각의 특성들이 수렴되 는 액막에 대하여 계산한 결과를 이용하였다. 즉, 두께가 30σ이상인 액막에서 액체 밀도(*p*₁)를 구하 였고, 그 액막과 접한 기체상에 에서 수직압력 (*p_{sat}*)과 화학포텐셜(μ_{sat})을 계산하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1 물질별 특성 및 밀도 분포

연구될 대상 물질들, 즉, 헬륨, 크립톤, 크세논등 의 시뮬레이션 상수들은 Table 1 에 비교되어 있다. 모든 특성들이 각 단원자 분자들의 원자량에 따라 증가하고 있는 것이 나타나 있다. 분자 직경, 분자 간 상호 에너지, 흑연과의 상호에너지 등의 크기 가 각각 헬륨, 크립톤, 크세논의 순서대로 증가하 는 값을 갖고 있다. 특히, 흑연과의 상대적인 상호 작용 에너지(ɛfs/ɛ)는 각각 1.56, 0.39, 0.34 로서 크립 톤과 크세논의 경우에는 동종 분자간 상호에너지 가 흑연과의 에너지보다 높은 것을 보여준다. 이 런 모든 특성들이 MDS의 계산 결과에도 반영되 어 나타난다. 먼저 각 물질들에 대한 밀도 분포를 Fig. 2 에 비교하여 보았다. Figure 2 의 경우들은 유 체분자의 개수(1296)와 무차원화된 온도 (ɛ/k_B=0.79653)가 서로 같은 경우에 대한 밀도 분 포들이다. 그러므로 각 물질들에 대해 서로 다른 절대 온도(He: 8.6K, Kr: 136.21K, Xe:184.00K)를 설 정한 것이 된다. 계산된 결과는 전체적으로 흡착 된 유체막의 특성을 분자적인 밀도 분포의 측면에 서 잘 보여주고 있다. 먼저, 부분적으로 나마 세 개의 상(phase)들이 동시에 존재하고 있는 것이 나 타난다. 두 종류, 고체와 액체, 액체와 기체 사이 의 계면들도 뚜렷하게 나타나져 있다. 또 정도의 차이는

 Table 1
 Potential parameters used in each gas case

Gas	$\epsilon_{fs}/k_{\rm B}~({\rm K})$	Α	σ(Å)	ε/k _B (K)
Не	16.9	1.21	2.57	10.8
Kr	66.6	1.42	3.6	171
Xe	79.5	1.52	4.047	231

Table 2Reduced units used in simulation

Physical properties	Values	
Length	σ	
Temperature	$\epsilon/k_{ m B}$	
Time	σ√(m/ ε)	

각각 다르지만 계면의 구조를 볼수있다. 예를 들 어, 고체와 액체 사이의 계면에 있어 주된 특징인 큰 고점과 영에 가까운 저점을 좁은 구간에서 급 격히 반복하는 구조를 가지고 있다.

4.2 분리압력

각 물질 별로 정도의 차이는 있지만 주어진 유 체와 흑연 사이의 상호작용 에너지는 충분히 크기 때문에 흡착된 박막은 두꺼운 막의 경우보다 높은 자유에너지 상태로 유지될 수 있게 된다. 이것에 의한 과도 압력이 곧 분리압력이다.

MD 를 이용하여 분리압력을 계산한 결과가 Figs. 3-5 에 있다. MD 결과와 함께 평균장이론(Mean Field Theory: MFT)에 근거하여 계산된 결과를 함 께 비교해 놓았다. 평균장이론은 주어진 시스템 상의 세 상이 모두 일정한 밀도 값을 가진다는 가 정에 기초하고 분자상호간에 원거리 상호작용 에 너지만을 포함시켜 유도한 이론이다. 비교에 사용 된 관계식은 다음과 같다.

$$\Pi = 2\pi (\rho_l - \rho_v) \frac{qA^6}{a_s / a_1^2} \frac{\varepsilon_{gs}}{\varepsilon} \left(\frac{a_1}{\sigma}\right)^4 \times \left[\frac{1}{h^4} + \frac{1}{3\Delta (h + 0.61\Delta)^3}\right] \quad (11)$$
$$-\frac{2}{3}\pi \rho_l (\rho_l - \rho_v) \frac{1}{h^3}$$

Figures 3-5 들에서의 결과는 전체적으로 분리압 력의 값이 고체로부터 멀어질수록 평이하게 곡률 의 변화가 없이 줄어드는 것을 보여주고 있다. 이는 세 물질의 경우 모두에 있어 안정되게 흡착

104



Fig. 1 Schematic of a thin film in contact with vapour, solid and bulk liquid



Fig. 2 Density distribution of noble gases (n=1296, T=0.79653)

된 박막의 경우들을 나타낸다. 그리고 MFT로 계 산한 값들은 MD의 결과를 전체적인 경향에 있 어서는 수렴하는 것을 보여주고 있다. 하지만 각 각의 경우에 있어 부분적일 지라고 상당한 정도 의 정량적인 차이는 존재한다. Figure 3의 헬륨의 결과에서 보면 전체적으로 계산 값들의 산포가 적지 않은 면은 있으나 흑연 표면에 근접한 영역 에서 MD와 MFT의 차이가 두드러진다. 즉, 흑연 표면에서 약 4nm이내의 값들에서 평균장이론은 MD결과를 상당히 과소평가하고 있음을 알 수 있다. 비슷한 경향이 앞서 연구되었던 네온과 아 르곤의 경우들에서도 발견되었다.⁽⁵⁾ 이 상당한 양 의 차이는 앞서 연구에서 추론한 바와 같이 평균 장이론의 부정확한 가정으로 인하여 발생하는 것 으로 보인다. 즉, 전 단락에서의 밀도 분포에서 본 바와 같이 고체와 액체간의 계면에서 구조가 평균장이론에서 가정한 것과 같이 일정하다고 보 기는 어렵다. 그래서 그 계면에서의 높은 밀도분 포로 인한 분리압력의 증가 경향을 반영하지 못 하는 것으로 판단된다.

Figures 4-5 에서는 크립톤과 크세논의 결과를 보여준다. 여기서의 MD 결과와 평균장이론과의





Fig. 5 Disjoining pressure of Xe (T=0.79653)

h(*0.1nm)

100

큰 차이는 MD결과의 경우 고체표면과 근접한 경우에 있어 분리압력의 급격한 증가가 보이지 않는다는 점이다. 즉, MD결과로는 분리압력이 두 께에 따라 전체적으로 평이하고 완만하게 줄어드 는 경향만을 보인다. 고체표면과 근접한 위치에 서 결과의 분해 정밀도를 증가시키는 시도도 병 행하였으나 큰 차이는 없었다. 즉, 두께가 극도로 작은 또는 유체입자가 극도로 적은 경우에 대한 결과를 내 보았으나 경향 자체는 변하지 않았고 두께가 0 으로 접근할 때 분리압력이 발산하는

경향은 보이지 않았다. 이 두 물질에 있어서의 공통된 특징은 앞서 연구된 물질들, 즉, 네온, 아 르곤, 헬륨 등과 달리 흑연과의 상대적인 상호작 용 에너지(ɛ_ʃ,/ɛ)가 1 보다 작다는 점이다. 물론 흑 연과 분자들간 상호작용 에너지가 충분히 커서 흡착이 발생하고 0 보다 큰 분리압력 에너지가 발생하는 것은 사실이지만 여전히 그 흡착상태가 강한 것은 아닌 것으로 보인다. 이것으로 위의 결과와 같이 박막의 두께가 극도로 작아질 때 강 하게 압축된 막이 형성하지 않는 결과를 낳는다 고 추론한다. 그래서 결과적으로 분리압력의 수 렴은 평균장이론의 예측과는 달리 발산하지 않는 것으로 생각된다.

5. 결론

본 연구에서는 분자동력학 전사모사를 이용하여 헬륨, 크립톤, 크세논 등 세 가지 물질에 대한 분 리압력을 계산하고 이를 평균장이론의 예측과 비 교하고 분석하여 보았다. 이에 대한 결론을 다음 과 같이 정리할 수 있다.

(1) 유체분자들의 흡착 밀도는 흑연과의 상대 상호작용 에너지(ε_{fs}/ε)에 비례하고 박막의 두께는 반비례한다. 이것은 이 상호작용 에너지가 초기 상태 이 후에는 흡착에는 큰 영향을 못 미치고 박 막의 자유에너지 증가에는 기여하는 이유로 보인 다.

(2) 헬륨, 크립톤, 크세논 등, 대상 물질 모두에 있어서 계산된 모든 영역에서 흑면 표면에 안정된 흡착 상태를 보여 주었다.

(3) 헬륨의 경우는 네온과 아르곤에서와 같이 흑연면과 근접한 영역에서의 분리압력에 있어 평 균장이론이 MDS 결과를 과소평가한다. 이는 평균 장이론의 각 상에 있어서 밀도가 균일하다는 가정 에 기인한 것으로 판단된다. (4) 크립톤과 크세논에 대해 MDS 로 계산된 결과는 평균장이론의 예측과 다르게 박막의 두께가 0으로 접근할 때 발산하는 경향을 보이지 않는다. 이것은 실제로 흑연과의 상대 상호작용 에너지가 작은 경우에 있어 박막의 두께가 0에 가까울 경우 일정한 두께의 안정된 박막을 형성하지 않기 때문으로 판단된다.

후 기

이 논문은 인천대학교 2007 년도 자체연구비 지 원에 의하여 연구되었음.

참고문헌

- (1) Oron, A., Davis, S.H. and Bankoff, S.G., 1997, "Long-Scale Evolution of Thin Liquid Films," *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 69, p. 931.
- (2) Derjaguin, B.V., Churaev, N.V., and Muller, V.M., 1988, *Surface Science*, Consultants Bureau (Plenum), New York.
- (3) Stubenrauch, C. and von Klitziiing, R. 2003, "Disjoining Pressure in Thin Liquid Foam and Emulsion Films-New Concepts and Perspectives," *J. phys. Condens. Matter.*, Vol. 15, p. R1197.
- (4) Bhatt, D., Newman, J. and Radke, C.J., 2002, "Molecular Simulations of Disjoining-Pressure Isotherms for Free Liquid, Lennard-Jones Thin Films," *J. phys. Chem.*, Vol. B106, p. 652e.
- (5) Han, M., 2008, "Disjoining Properties of Ne and Ar on Graphite Surface," *Colloid Surf. A Physicochem. Eng. Aspects*, Vol.317, pp. 679~686.
- (6) Potash, M., Jr. and Wayner, P.C., Jr. 1972, "Evaporation from a Two-Dimensional Extended Meniscus," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 15, pp. 1851~1863.
- (7) M.P. Allen and D.J. Tildesley, 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.

106