

<학술논문>

DOI <http://dx.doi.org/10.3795/KSME-B.2015.39.11.871>

ISSN 1226-4881(Print)
2288-5324(Online)

친수성/소수성 복합표면상에서 초기 구형 액적의 이송 메커니즘

명 현 국*† · 권 영 후*

* 국민대학교 기계공학과

Transport Mechanism of an Initially Spherical Droplet on a Combined Hydrophilic/Hydrophobic Surface

Hyon Kook Myong*† and Young Hoo Kwon*

* Dept. of Mechanical Engineering, Kookmin Univ.

(Received June 9, 2015 ; Revised August 5, 2015 ; Accepted September 1, 2015)

Key Words: Droplet Transport Mechanism(액적이송 메커니즘), Hydrophilic/Hydrophobic Surface(친수성/소수성 표면), Capillarity Force Imbalance(모세관력 힘의 불균형), Surface Free Energy(표면자유에너지), VOF(Volume of Fluid), Numerical Simulation(수치해석), CFD(전산유체역학)

초록: 유체이송 기술은 마이크로 유체시스템 개발에서 핵심문제로 인식되고 있다. 최근 명(2014)은 외부 동력을 사용하지 않고 액적을 이동시킬 수 있는 새로운 개념을 제안하고, 초기에 반원통형 형상을 가지는 가상의 2차원 액적에 대한 수치해석을 통해 이 개념이 성립함을 보였다. 또한 명과 권(2015)은 친수성/소수성 표면위에서 초기 3차원 반구 형상의 실제 물 액적이송의 메커니즘을 시간에 따른 액적형상과 액적 내부의 운동에너지, 중력에너지, 표면자유에너지 및 압력에너지의 수치해석 결과를 통해 규명하였다. 본 연구는 새로운 개념을 확립시키기 위해 초기 구형액적에 대한 3차원 수치해석을 수행하고, 액적이송의 메커니즘을 모세관력 힘의 불균형 관점에서 액적 형상과 다양한 에너지의 수치해석 결과를 통해 규명하였다.

Abstract: Fluid transport is a key issue in the development of microfluidic systems. Recently, Myong (2014) has proposed a new concept for droplet transport without external power sources, and numerically validated the results for a hypothetical 2D shape, initially having a hemicylindrical droplet shape. Myong and Kwon (2015) have also examined the transport mechanism for an actual water droplet, initially having a 3D hemispherical shape, on a horizontal hydrophilic/ hydrophobic surface, based on the numerical results of the time evolution of the droplet shape, as well as the total kinetic, gravitational, pressure and surface free energies inside the droplet. In this study, a 3D numerical analysis of an initially spherical droplet is carried out to establish a new concept for droplet transport. Further, the transport mechanism of an actual water droplet is examined in detail from the viewpoint of the capillarity force imbalance through the numerical results of droplet shape and various energies inside the droplet.

1. 서론

액적이송(droplet transport)은 적은 양의 시료 사용, 빠른 응답성, 자동화 특성이 요구되는 마이크로 유체(microfluidic) 시스템 개발에서 유체이송(fluid transport) 기술의 대표적인 방법으로 최근까

지 많은 연구자들이 수치해석 및 실험연구를 진행하고 있다.⁽¹⁻⁸⁾ 일반적으로 마이크로 유체 시스템에서는 표면장력(surface tension)에 의한 힘이 지배적이므로, 액적이송은 통상적으로 외부 동력으로 열적, 전기적 및 감응원리에 기초한 다양한 메커니즘⁽¹⁻³⁾을 이용해서 표면장력을 인위적으로 조작하여 표면 습윤성 기울기(surface wettability gradient)를 만들어 구동시키는 유체작동(fluidic

† Corresponding Author, myong@kookmin.ac.kr

actuation)에 대한 연구가 많이 수행되어 왔다. 그러나 이들 방법은 온도상승, 전기퍼텐셜 및 화학적 상용성의 간섭과 같은 근본적인 문제가 필연적으로 수반된다.⁽⁴⁾ 반면, 물리적으로 표면의 미세구조 형상(pattern)을 변화시키거나, 화학적으로 포토 패터닝(photo patterning) 기술을 이용하여 결과적으로 표면 습윤성 기울기를 변화시켜 액적을 이송하는 방법은 특별한 추가적인 장치 없이 자연적으로 즉각적인 반응을 한다는 장점을 가지고 있다.⁽⁴⁻⁸⁾ 또한 이 방법들은 열적, 전기적, 화학적 문제로부터 야기되는 부작용이 없다는 면에서 마이크로 유체 시스템을 설계하기 위한 적절한 개념을 제공할 수 있어, 오랫동안 액적이송을 제어하는 방법으로 연구되어 왔다. 그러나 이 방법들은 공통적으로 점진적인 표면 습윤성 기울기 차이로 액적을 움직이기 때문에 액적이 표면과 접하는 접촉선(contact line) 부근에서만 비평형 Laplace 압력이 생성되는 준평형(quasi-equilibrium) 과정으로 이동거리가 비교적 짧으며, 또한 점진적인 표면 습윤성 기울기를 만들어 주어야하기 때문에 제작상의 어려움과 함께 작동장치의 크기 도 제약을 받게 된다.^(9,10)

최근 명^(9,10)은 외부동력을 사용하지 않고 표면 장력에 의해 구동되면서도 이러한 문제점을 해결할 수 있는 유체작동에 관한 새로운 개념을 제시하였다. 새로운 개념은 액적 중심을 단순히 친수성(hydrophilic)과 소수성(hydrophobic) 복합표면 경계면 위에 놓는 방법으로 액체의 응집력(cohesive force)과 부착력(adhesion force) 사이의 힘의 불균형 특성을 최대한 이용함으로써, 결과적으로 액적 전체 계면 곡률의 심한 비균일 분포로 인해 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태를 야기한 후 평형상태로 변하는 동적과정을 통해서 액적을 이송시키는 방법이다. 명^(9,10)은 친수성 표면과 소수성 표면 경계에 중심을 둔 가상의 반원통형 이차원 액적에 대한 수치해석을 통해 새로운 개념의 액적이송 메커니즘을 포함해 액적이 액적 크기의 수 배 이상 거리를 움직일 가능성을 확인하였다. 또한 명과 권⁽¹¹⁾은 실제 액적이 가지는 3차원 특성을 확인하기 위해 액적이 벽면바닥에 충돌시 중력에 의해 압착되는 액적의 초기형태를 모사한 반구형 액적을 대상으로 3차원 해석을 수행하고, 액적의 형상과 액적 내부의 각종 에너지 변화에 대한 분석을 통해 액적이송 메커

니즘을 규명하였다. 또한 반원통형 액적에 대한 2차원 수치해석 결과와 비교를 통해 3차원 특성을 파악하였다. 연구결과, 친수성/소수성 표면에 놓인 반구형 및 반원통형 액적이송의 기본적인 원리는 명^(9,10)이 제시한 액적이송의 구동원리와 같이 상대적으로 강한 소수성 표면에서의 응집력에 의한 힘과 친수성 표면에서의 부착력에 의한 두 힘의 시너지효과로 인해 운동에너지를 증가시키고, 강한 비평형상태로 인해 액적 내부에 형성되는 비균일 압력분포를 수정하기 위해 비평형 액적 계면에 발생하는 모세관과가 액적이송의 구동력이라는 것을 재차 확인하였다. 또한 액적이 운동에너지와 표면자유에너지 그리고 압력에너지의 변화에 크게 영향을 받아 이동하는 것을 확인하였다.⁽¹¹⁾

한편, 잉크젯 프린터에서의 액적과 같이 직경이 매우 작은 경우 액적의 충돌속도 효과가 무시될 수 있으며, 이 경우 액적 형상은 초기에 거의 구형을 유지하고 있다. 따라서 액적이송에 관한 기존의 대부분의 연구⁽¹⁻⁸⁾는 점진적인 표면 습윤성 기울기를 가진 바닥 표면위에 충돌 없이 놓인 3차원 구형 액적을 대상으로 수행되어졌다. 그러나 새로운 개념을 적용한 친수성 표면과 소수성 표면 경계에 중심을 둔 3차원 구형 액적에 대한 실험적 및 수치해석적 연구는 아직 수행되어 있지 않다. 따라서 향후 액적이송의 새로운 개념에 대한 연구결과 및 이들 연구결과와의 비교분석을 위한 연구자료를 제공할 필요가 있다. 또한 바닥 표면위에 충돌 없이 놓인 3차원 구형 액적은 초기에 친수성 표면과 소수성 표면에서 모두 액적이 바닥면에 퍼지는 현상^(12,13)을 나타내고 있는데, 이것은 초기에 상대적으로 강한 소수성 표면에서의 응집력에 의한 힘과 친수성 표면에서의 부착력에 의한 두 힘의 시너지효과에 의해 액적이 이송된다는 가상의 2차원 액적 또는 반구형 액적에 대해 입증된 기존의 액적이송 메커니즘⁽⁹⁻¹¹⁾으로는 명확히 설명하기 어렵다. 따라서 3차원 구형 액적의 이송 메커니즘은 적어도 액적이송 초기에 다른 특성을 나타낼 것으로 예상되므로, 이러한 관점에서 3차원 구형 액적에 대한 연구가 필요하다.

본 연구는 명^(9,10)이 제시한 액적이송에 관한 새로운 개념을 확립시키기 위한 연구로, 친수성/소수성 표면 경계면 위에 놓인 실제 구형 액적에

대한 수치해석을 통해 액적의 이송 메커니즘을 액적의 형상과 에너지 변화를 통해 명확히 파악하고자 한다. 특히 본 연구에서는 액적이송 메커니즘을 액적계면이 벽면과 만나는 접촉선에서 발생시키는 벽면 부착력과 액체분자들 사이의 응집력 차이로 인해 야기되는 모세관력 힘의 불균형 (capillarity force imbalance or uncompensated Young force) 관점에서 살펴보고, 이전 연구⁽⁹⁻¹¹⁾에서 보고한 액적이송 메커니즘과 연계시키려고 한다. 또한 3차원 해석이 보이는 특성을 확인하기 위해 추가적으로 2차원 원통형 액적에 대한 수치해석을 수행하고 해석결과와 비교를 통해 액적이송에 관한 메커니즘 및 3차원 특성을 살펴보고자 한다.

2. 해석대상 및 액적이송 메커니즘

본 연구의 해석대상은 표면장력 계수 σ 는 0.07 N/m, 밀도 ρ_w 는 1000 kg/m³이고 반경 $R = 0.002$ m로 초기화된 표면위에 놓인 실제 구형 물 액적의 움직임을 파악하는 초기 경계치 문제이다. 이 경우 충돌속도가 없어 관성력과 표면장력의 비로 표현되는 무차원수인 Weber 수, We 와 관성력과 점성력의 비로 표현되는 Reynolds 수, Re 가 $We = Re = 0$ 인 경우에 해당된다. 따라서 이 경우의 물리적인 현상을 파악하는 데에는 통상 충돌속도에 기초한 이들 무차원수를 개별적으로 고려하지 않고 다음 식으로 정의되는 것과 같이 점성력, 관성력 및 표면장력을 함께 고려하는 Ohnesorge 수, Oh 가 더 적절하다.^(12,13)

$$Oh = \frac{\mu_w}{\sqrt{\rho_w \sigma R}} = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (1)$$

위 식에서 ρ_w 및 μ_w 은 각각 물 액적의 밀도와 점성계수 값을 각각 나타낸다. 참고로 식 (1)의 Oh 는 충돌속도를 대표속도로 사용한 Re 와 We 에서 충돌속도가 0으로 접근할 때에도 자연스럽게 성립하며, 또한 특성 퍼짐(spreading) 또는 이송속도 $U = \sqrt{\sigma/(\rho_w R)}$ 를 대표속도로 사용하는 경우에는 Re 의 역수로 된다.⁽¹²⁾

한편, Schiaffino 등⁽¹³⁾은 액적의 퍼짐현상에 대한 연구에서 Bond 수, $Bo(= \rho_w g R^2 / \sigma)$ 가 작은 경우에 중력효과를 무시할 수 있으며, 또한 We

가 작을 경우 액적 퍼짐현상이 주로 모세관 효과 (capillarity effect)에 영향을 받아 일어나게 된다고 보고하였다. 이러한 관점에서 본 연구의 해석대상인 바닥 표면상에 놓여있는 구형 액적은 충돌속도가 없기 때문에 $We=0$ 이고, $Oh \approx 0.0027$, $Bo \approx 0.56$ 의 비교적 작은 값을 가지기 때문에 액적의 이송과정이 주로 모세관 효과에 의해 일어나고 중력의 효과는 크지 않을 것으로 예상할 수 있다. 또한, Schiaffino 등⁽¹³⁾은 모세관 효과에 의한 액적 퍼짐현상에서 액적 퍼짐 후에 퍼짐 시간 스케일과 같은 크기의 주기를 가진 진동(모세관파)이 수반된다고 보고하면서, 퍼짐 시간 스케일로 관성진동(inertial oscillation)의 시간 스케일 $\tau_{osc} = \sqrt{\rho_w R^3 / \sigma}$ 를 사용하고, 운동에너지가 감쇄하는 시간 스케일인 점성확산(viscous diffusion) 시간 스케일 $\tau_{visc} = \rho_w R^2 / \mu_w$ 와 구별하였다. 이 시간 스케일을 본 연구에 적용하면 $\tau_{osc} \approx 10.7$ ms, $\tau_{visc} \approx 4$ s로 되며, 이 두 시간 스케일의 비는 다음과 같이 된다.

$$\frac{\tau_{visc}}{\tau_{osc}} = \frac{1}{Oh} \quad (2)$$

본 연구에서 다루는 초기 구형 액적에 대해 적용하면 이 비가 약 370으로 매우 큰 값을 가진다. 따라서 본 연구에서 다루는 액적이송 현상에서도 액적이송 시간 스케일로 관성진동의 시간 스케일이 적절한 시간 스케일이 될 것으로 예상된다.

일반적으로 액적이 모세관 효과에 의해 움직이는 현상은 액적이 표면과 접하는 접촉선에서 다음 식과 같이 액적이 자신의 고유 평형 접촉각 상태로 이동하려는 힘인 모세관력 힘의 불균형으로 설명할 수 있다.

$$F = \sigma_{SG} - \sigma_{LS} - \sigma_{GL} \cos \theta = \sigma_{GL} (\cos \theta_{eq} - \cos \theta) \quad (3)$$

위 식에서 σ_{SG} 과 σ_{LS} 그리고 σ_{GL} 은 각각 고상-기상, 액상-고상 그리고 기상-액상 간의 표면장력을 나타내며, θ_{eq} 및 θ 는 각각 표면과의 평형 접촉각 및 현재 접촉각을 나타낸다. 모세관력 힘의 불균형을 나타내는 식 (3)의 힘은 주로 액적계면이 벽면과 만나는 접촉선에서 발생시키는 벽면 부착력과 액체분자들 사이의 응집력 차이로 인해 야기되는 힘으로, 액적이 평형상태를 이루려는

방향으로 발생한다. 따라서 전술한 바와 같이 친수성 표면과 소수성 표면 위에 각각 충돌 없이 놓인 3차원 구형 액적은 초기에 $\theta = 180^\circ$ 이므로 식 (3)으로부터 모세관력 힘의 불균형이 모두 양의 값을 나타내므로 결과적으로 모두 바닥 표면에 퍼지는 현상⁽¹²⁾을 나타내는 것을 명확하게 설명할 수 있다.

또한, 본 연구에서 대상으로 하는 액적 중심을 단순히 친수성과 소수성 복합표면 경계면 위에 놓는 새로운 개념의 액적이송에 이 모세관력 힘의 불균형 특성을 적용하면, 액적이송 메커니즘을 다음과 같이 3단계로 설명할 수 있다. 즉, 첫 번째 단계는 초기에 모세관력 힘의 불균형이 친수성과 소수성 표면에서 각각 반대 방향으로 작용하나, 친수성 표면에서의 모세관력 힘의 불균형이 상대적으로 강해 결과적으로 액적은 친수성 쪽으로 움직인다. 이 과정에서 두 표면 위에서의 모세관력 힘의 불균형이 시너지 효과를 발휘하여 액적 내부의 운동에너지를 증가시키면서, 액적 전체 계면곡률을 심한 비균일 분포로 만들며, 이로 인해 액적 내부에 심한 비균일 압력분포가 형성될 것이다. 두 번째 단계는 소수성 표면에서 모세관력 힘의 불균형이 점차 사라지면서 소수성 표면 위의 부착력에 비해 액적 계면곡률의 심한 비균일 분포에 따른 강한 힘(거시적으로 응집력)이 친수성 쪽으로 작용하고, 이 힘과 함께 친수성 표면에서의 상대적으로 강한 부착력이 시너지 효과를 발휘하여 액적은 전체적으로 친수성 쪽으로 계속 움직일 것이다. 이 과정동안 시너지 효과로 인해 액적 내부의 운동에너지는 한단계 더 증가되고, 액적 전체 계면곡률도 더욱 심한 비균일 분포로 되며, 이로 인해 액적 내부에 심한 비균일 압력분포가 형성되어, 결과적으로 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태를 야기할 것이다. 마지막 세 번째 단계는 이 강한 비평형상태로 인해 액적 내부에 형성되는 비균일 압력분포를 수정하기 위해 비평형 액적 표면에 발생하는 모세관과와 같은 진동을 수반하면서 힘의 평형을 이루는 접촉각 θ_{eq} 에 도달하는 동적과정을 통해 액적이 이송될 것이다.

이상 본 연구에서 제시한 구형 액적에 대한 액적이송 메커니즘은 초기에 액체의 응집력과 부착력 사이의 힘의 불균형 특성을 최대한 이용함으로써, 결과적으로 액적 내부의 운동에너지를 증

가시키고 액적 전체 계면곡률의 심한 비균일 분포로 인해 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태를 야기한 후 평형상태로 변하는 동적과정을 통해 액적을 이송한다는 기존의 액적이송 메커니즘⁽⁹⁻¹¹⁾과 다음과 같은 이유로 기본적으로 구동원리가 동일함을 알 수 있다. 즉, 가상적인 반원통형 또는 반구형 액적의 이송 메커니즘에 관한 연구⁽⁹⁻¹¹⁾에서 액적 움직임을 초기에 상대적으로 강한 소수성 표면에서의 응집력에 의한 힘과 친수성 표면에서의 부착력에 의한 두 힘의 시너지효과라고 구체적으로 기술(표현)한 것은 구형 액적이송에서만 존재하는 첫 번째 단계를 설명하기 어렵다. 그러나 구형 액적의 이송 메커니즘의 첫 번째 및 두 번째 단계를 액적 내 운동에너지를 증가시키기 위해 친수성 표면과 소수성 표면에서의 액체의 응집력과 부착력 사이의 힘의 불균형, 즉 모세관력 힘의 불균형 특성을 최대한 이용한다는 관점에서 보면 구동원리에 대해 명⁽⁹⁾이 처음 제안한 새로운 개념과 동일하게 설명이 된다. 따라서 본 연구에서는 위에 제시한 액적이송 메커니즘을 수치해석을 통해 입증한다.

3. 수치해석 방법

수치해석방법은 기본적으로 이전 연구⁽⁹⁻¹²⁾와 동일하므로 여기서는 특징적인 점만 간략하게 언급한다. 먼저, 본 연구에서는 수치해석도구로써 이전 연구⁽¹¹⁾에서와 같이 상용 프로그램인 Fluent 14.0의 VOF (Volume Of Fluid) 모델을 사용하였으며, 액적이송이 표면장력과 벽면부착에 크게 의존하므로 Brackbill 등⁽¹⁴⁾이 제안한 표면장력에 대한 CSF 모델 및 벽면부착 경계조건을 사용하였다. 그리고 체적포착법(volume capturing method)⁽¹⁵⁻¹⁷⁾에서 크게 문제가 되는 번짐 현상과 같은 계면의 비물리적인 변형 및 수치확산 문제를 크게 개선한 것으로 알려진 HR(High Resolution) 도식인 CICSAM⁽¹⁸⁾(Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes)을 사용하여 수치해석을 수행하였다.

해석공간은 구형 액적인 경우 Fig. 1과 같이 계산시간을 절약하기 위해 대칭조건을 사용하여, x 축 방향으로 $H=0.050$ m, y 축 방향으로 $W=0.010$ m, z 축 방향으로 $B=0.008$ m로 각각 설정하고, 바닥 표면을 소수성 표면($x < 0.006$ m)과 친수성 표면($x > 0.006$ m)으로 구분하여, 결과적

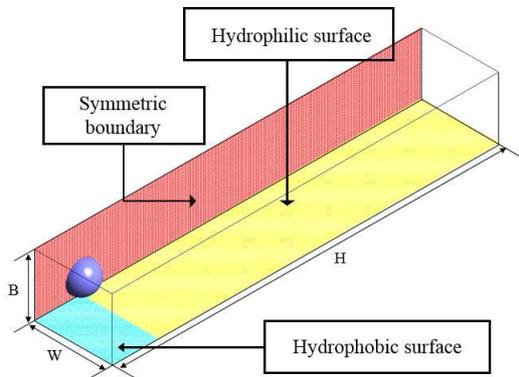


Fig. 1 Computation domain of simulation cases for an initially spherical droplet on a horizontal hydrophilic/hydrophobic surface

으로 초기에 구형 액적 중심이 $(x, y, z) = (0.006 \text{ m}, 0 \text{ m}, 0.002 \text{ m})$ 에 놓여있는 것으로 하였다. 또한, 이전 연구⁽⁹⁻¹¹⁾에서와 같이 소수성 표면과 친수성 표면에서는 명기된 접촉각 $\theta_{eq} = 135^\circ$ 와 45° 를 각각 갖는 것으로 가정하였다. 그러나 이 접촉각들은 최적의 값이 아니므로 향후 두 표면에서의 접촉각에 따른 영향을 파악할 필요가 있다. 이와 함께 경계조건도 바닥 표면은 벽면조건, 대칭면은 대칭조건을, 나머지 경계는 압력경계조건으로 각각 설정하였다.⁽⁹⁻¹¹⁾ 참고로 본 연구에서는 액적의 크기에 비해 바닥 표면 거칠기가 상대적으로 매우 작은 매끄러운 표면을 가정하여 표면 경계조건으로 no-slip 조건을 사용하였으나, 이 조건을 적용할 수 없는 거칠기라면 이에 따른 영향이 있으므로 표면 거칠기에 대한 적절한 경계조건을 설정해 주어야 할 것으로 사료된다. 격자계는 유사한 해석대상에 대한 격자 민감도 테스트 결과^(11,12)를 반영시켜, 정육면체의 비정렬 등간격자로 500,000 (250×50×40) 개의 제어체적을 사용하였다. 또한 2차원 원통형 액적에 대해서는 초기에 원통형 액적 중심은 $(x, z) = (0.006 \text{ m}, 0.002 \text{ m})$ 에 놓여있으며, 등간격 격자계로 18000 (360×50)개의 제어체적을 사용한 것 이외에는 구형 액적의 경우와 같다.

초기화 상태에서 액적이 채워지는 부분의 오차를 줄이기 위해 이전 연구⁽⁹⁻¹²⁾에서와 같이 액적이 부분적으로 채워지는 각각의 셀에 대하여 1천 개의 작은 셀로 다시 나누어 차지하는 분율, 즉 VOF값 α 를 정확히 산정하는 방법을 사용하였다. 또한 시간스텝 $\Delta t = 5 \times 10^{-6} \text{ s}$ 을 사용하나,

이후 수치해석의 안정성을 위해 전체적으로 Courant 수가 0.1에 가까운 값을 갖도록 조절하여 사용하면서, 구형 및 원통형 액적의 움직임이 멈추는 0.6 s까지 수치해석을 수행하였다. 참고로 본 연구에서 사용한 Courant 수는 비정렬격자계에서도 유용하게 사용될 수 있는 형태로, Δt 시간동안 계산 영역내 각 셀에 대해서 셀면을 통해 유출하는 플럭스 $(\vec{v} \cdot \vec{S})\Delta t$ 의 합을 셀 체적으로 나누는 값^(11, 15-17)의 최댓값으로, 이 개념은 VOF 값 α 에 대한 지배방정식을 풀기 위한 CICSAM 도식에도 적용되고 있다.

4. 해석결과 및 고찰

본 수치해석방법의 유효성 및 격자 적합성은 벽면부착에 의해 야기되는 다상유동현상의 동적 거동을 연구한 이전 연구⁽⁹⁻¹²⁾에서 이미 입증되었다. 또한 본 수치해석에서는 시간 경과에 따른 액적 계면이 퍼지는 변침 현상이 거의 없었으며, 또한 처음 액적의 체적에 대해 약 120,000 시간 스텝이 지난 이후에도 약 0.11 %의 매우 작은 오차를 가지면서 질량보존을 잘 만족시켜 주고 있어, 본 수치해석방법의 유효성 및 정확성을 추가적으로 입증해 주고 있다고 판단된다.

4.1 구형 액적이동의 해석결과

본 절에서는 친수성/소수성 표면에 구형으로 초기화된 액적의 이송과정을 시간전개에 따른 액적 형상 및 압력분포를 통해 살펴보기로 한다.

Fig. 2에는 초기 구형 액적이 시간에 따라 변화되는 형상 및 움직임을 측면도(side view) 및 상면도(top view)로 나타냈다. 각 시각별 그림에서 위쪽이 측면도, 아래쪽이 상면도이며, 왼쪽 부분이 소수성 표면, 오른쪽 부분이 친수성 표면이고, VOF 값 $\alpha \geq 0.5$ 인 부분을 액적으로 나타냈다.

먼저 초기화 상태의 액적은 Fig. 2(a)와 같이 표면 바로 위에 놓여 있는 정지된 구형상이기 때문에 액적과 바닥표면의 접촉각 $\theta = 180^\circ$ 이다. 이 액적은 시간이 경과함에 따라 각각 친수성 표면의 평형 접촉각 $\theta_{eq} = 45^\circ$ 와 소수성 표면의 평형 접촉각 $\theta_{eq} = 135^\circ$ 를 이루려고 하므로, 식 (3)으로 나타내는 모세관력 힘의 불균형이 액적의 접촉선에서 강하게 발생하게 된다. 이 힘은 친수성 표 면상에서 상대적으로 매우 강하기 때문에 접촉선이 반경방향으로 매우 빠르게 퍼져나가며 바닥

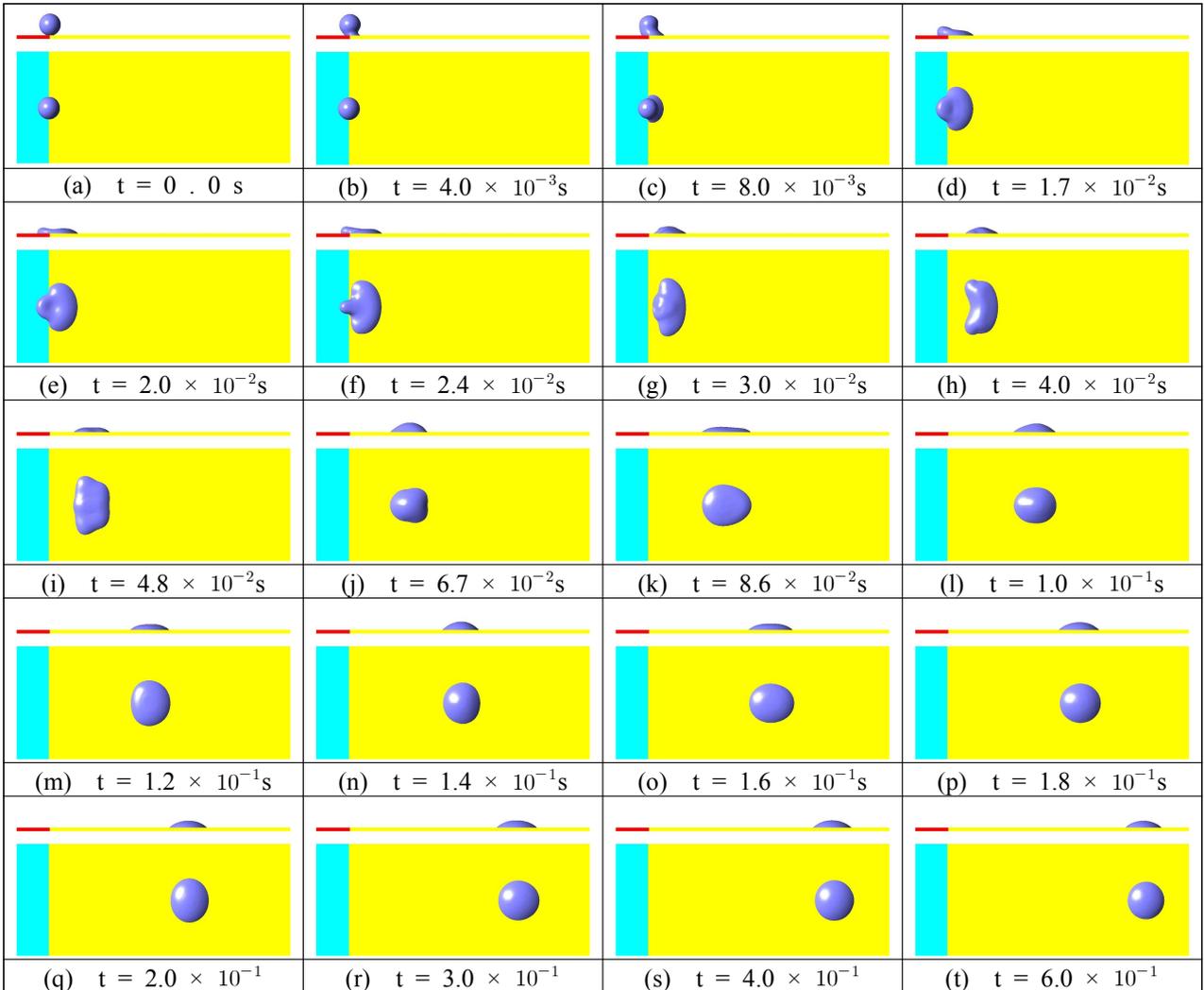


Fig. 2 Time evolution of the movement of initially spherical actual water droplet on a horizontal hydrophilic/hydrophobic surface

표면과의 접촉면적을 증가시키는데 반해, 소수성 표면상에서는 상대적으로 이 힘이 약해 접촉선이 약하게 퍼져나가며 또한 넓게 퍼지지도 못한다 (Fig. 2(b)-(d)). 한편 관성에 의해 지배되는 중앙부분의 액체는 친수성 표면상에서의 퍼짐이 매우 빠르기 때문에 결과적으로 뒤처지게 되며, 급격한 곡률변화가 중심부 쪽으로 파고든다. 그러나 소수성 표면상에서도 느끼기는 하나 퍼짐으로 인해, 결과적으로 액적의 중심은 친수성 표면 쪽으로 이동하나 꼭지 형상의 물방울 형상은 소수성 표면 쪽으로 서서히 이동하면서 표면 위로 서서히 압착되는 형태로 변화(Fig. 2(b)-(d))한다. 이러한 현상은 이전 연구⁽⁹⁻¹²⁾에서 다른 초기 반구형 및 반원통형 액적이송에서는 없던 현상으로 초기 구형 액적에서만 나타나는 현상이다. 이것은 전

술한 바와 같이 모세관력 힘의 불균형 관점으로 설명할 수 있다. 즉, 모세관력 힘의 불균형이 친수성 표면과 소수성 표면에서 각각 반대방향으로 작용하는 시너지 효과로 인해 액적 전체 계면곡률의 심한 비균일 분포를 야기해 결과적으로 액적 형상을 심한 비평형 상태로 만들고 있다. 이와 함께 친수성과 소수성 표면 경계에서 이미 친수성 표면위에 넓게 퍼진 액적이 부분적으로 소수성 표면에 가로막히는 블록효과(blockage effect)로 인해 액적의 형상은 더욱 심한 비평형 상태로 변화시킨다. 이러한 과정은 액적의 형상이 Fig. 2(e)의 강한 비평형 형상으로 변화할 때까지 액적이 친수성 및 소수성 표면과 접촉하는 접촉면적이 증가하게 되나, 그 후 액적은 모세관력 힘의 불균형이 점차 사라지며 소수성 표면 위의 액적

계면곡률의 심한 비균일 분포에 따른 힘(거시적으로 응집력)에 의한 비평형 상태의 액적 형상을 수정하기 위해 Fig. 2(e)-(g)에서 보는 바와 같이 형상이 급격하게 변화한다. 즉, 이 과정동안 소수성 표면 위에 액적꼬리를 남기며 이동하던 액적이, 접촉 면적이 줄어들며 점차 액적꼬리가 작아지다(Fig. 2(e-f))가, 친수성 표면위에서 액적 내부로 빠르게 흡수되어 사라지게 된다(Fig. 2(g)). 액적꼬리가 사라지면서 액적의 후행 부분에서 형상 변화를 크게 일으킨 후(Fig. 2(h)), 친수성 표면위로 액적의 움직임 가속시켜 넓게 퍼져나가게 되고, 액적은 강한 비평형 상태인 신장상태로 변화하게 된다(Fig. 2(i)). 그리고 과도한 신장상태로 인해 액적내부는 불균일한 압력분포가 형성되며, 이를 수정하기 위해 액적의 형상이 점차 불룩하

고 매끄러운 형상으로 회귀하게 된다(Fig. 2(j)). 그 후 액적은 진행방향 및 진행 수직방향으로 신장·수축을 반복하며 이동하며, 이동속도가 시간에 따라 점차 느려지면서 평형상태에 도달하게 된다(Fig. 2(j)-(t)).

Fig. 3에는 상면도에서 본 시간에 따른 구형 액적의 변화되는 압력분포를 액적 형상(대칭성을 고려해서 위쪽에는 액적 형상을 아래쪽에는 압력 분포를 절반씩 나타냄)과 함께 나타냈다. 결과로부터 먼저 전체적으로 액적의 계면곡률에 기인하여 액적내부에 발생하는 비균일 압력분포가 액적의 형상과 함께 빠르게 변하는 것을 알 수 있다. 구체적으로 살펴보면, 초기에 액적 중심부에 존재하던 높은 압력이 액적 접촉면이 친수성 및 소수성 표면상으로 퍼져나가면서, 소수성 표면 쪽

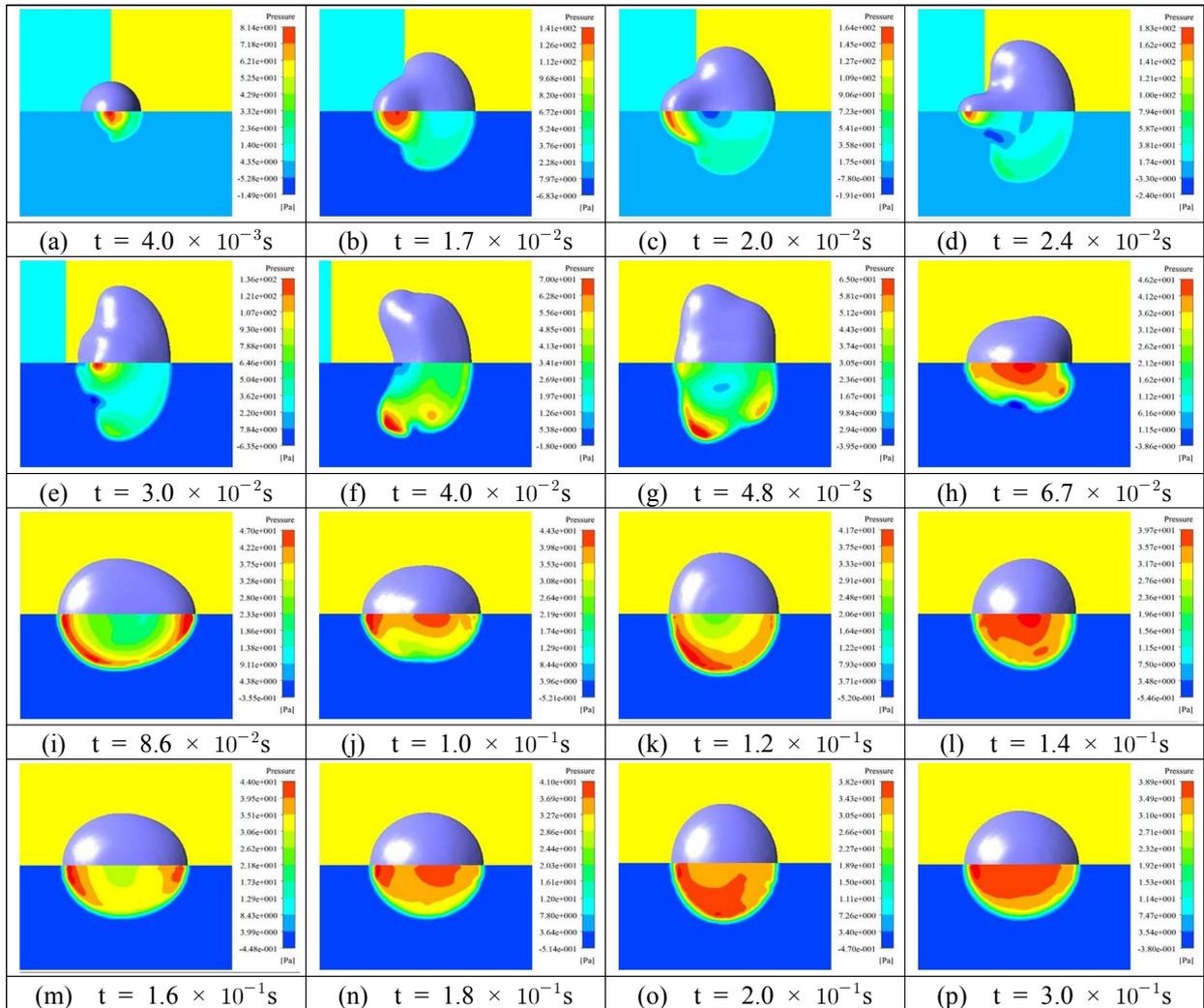


Fig. 3 Time evolution of pressure distributions of initially spherical actual water droplet on a horizontal hydrophilic/hydrophobic surface

으로 이동하는 꼭지 형상의 액적 중심에 더욱 높은 압력이 발생하게 된다(Fig. 3(a)-(b)). 이 소수성 표면위에 존재하는 액적 꼬리부분의 심한 곡률변화로 인해 이 부분에 매우 높은 압력이 분포하게 된다. 이 압력 비균일에 의한 힘으로 액적은 소수성 표면으로의 퍼짐을 멈추고 소수성 표면 접촉선은 친수성 표면 쪽으로 되돌림을 시작하면서 소수성 표면상의 접촉면적이 줄어들고, 또한 블록효과가 시너지 효과를 발휘하면서 액적의 꼬리부분도 작아지며 높은 압력 중심이 친수성 표면 쪽으로 이동하게 된다(Fig. 3(c)-(d)). 액적이 소수성 표면을 벗어나면 블록효과가 사라져 액적 내부의 압력값들이 상대적으로 낮아지며 복잡한 압력분포를 만들면서 액적 후행 부분의 커다란 형상변화를 동반하며, 높은 압력이 이동방향과 수직인 양쪽 접촉선 부분으로 옮겨지며 액적은 강한 비평형 상태인 신장상태로 변화하면서 친수성 표면위로 액적의 움직임이 가속시켜 넓게 퍼져나가게 된다(Fig. 3(e)-(g)). 그러나 과도한 신장상태로 인해 액적내부는 불균일한 압력분포가 형성되며, 이를 수정하기 위해 다시 액적의 형상이 점차 블록하고 매끄러운 평형상태와 유사한 형상으로 회귀하게 되면서 높은 압력이 중앙으로 이동하게 된다(Fig. 3(h)). 그 후 액적은 수평방향(진행방향)과 수직방향으로 신장·수축을 반복하며 이동하게 된다(Fig. 3(i)-(p)).

또한 Fig. 3의 결과로부터 다음과 같은 새로운 사실을 확인할 수 있다. 즉, 액적 중심의 곡률이 작은 신장상태에서는 액적 접촉선 주변이 중심에 비해 상대적으로 높은 압력분포를 가지며, 이 높은 압력이 액적 중심으로 이동하면서 액적은 수축하게 된다. 반대로 액적 중심의 곡률이 블록한 형상으로 회귀한 수축상태에서는 중심부가 액적 접촉선 주변에 비해 상대적으로 높은 압력분포를 가지며, 이후 중심부의 높은 압력이 액적 접촉선 주변으로 이동하면서 액적은 신장하게 된다. 이와 같이 본 연구를 통해 액적내 압력분포를 이용하여 신장·수축을 하며 이동하는 액적의 형상 변화를 설명할 수 있다.

4.2 구형 액적이동 과정에서 에너지 변화

본 절에서는 친수성/소수성 표면 위에 놓인 초기 구형 액적이 강한 비평형 상태에서 형상변화와 함께 이동하는 구동원리를 명확히 파악하고자 반구형 액적에 관한 이전 연구⁽¹¹⁾와 마찬가지로

시간전개에 따른 액적내부의 각종 에너지 변화를 이용하여 파악하였다.

시간전개에 따른 액적내부의 운동에너지(kinetic energy), KE , 중력(또는 위치)에너지(gravitational energy), GE 및 표면자유에너지(surface free energy), SE 는 각각 다음 식으로 정의된다.⁽¹¹⁾

$$KE = \sum_{i=1}^{n-cells} \frac{1}{2} \rho_i v_i^2 (V_i) \quad (4)$$

$$GE = \sum_{i=1}^{n-cells} \rho_i g h_i (V_i) \quad (5)$$

$$SE = \sigma_{GL} (A_{GL} - \sum_{i=1}^n A_{LS}^i \cos \theta_w^i) \quad (6)$$

위 식에서 V_i , ρ_i 및 \vec{v}_i 은 각각 물 액적($\alpha \geq 0.5$ 인 부분)의 i 번째 셀의 체적, 밀도 및 속도이다. 또한 A_{GL} 은 기상-액상 간의 경계면적을 나타내며, A_{LS}^i 와 θ_w^i 는 각각 액상-고상이 만나는 i 번째 벽면 셀의 면적과 (평형)접촉각을 각각 나타낸다. 그리고 $n-cells$ 및 n 은 물 액적 내의 셀 총수 및 액상-고상이 가지는 벽면 셀의 수를 각각 나타낸다. 또한 본 연구에서는 에너지 손실을 의미하는 점성소산(viscous dissipation), D 를 다음과 같이 구하였다.

$$KE + GE + SE + D = KE_0 + GE_0 + SE_0 \quad (7)$$

위 식에서 KE_0 , GE_0 , SE_0 는 초기화 상태일 때의 운동에너지, 중력에너지 및 표면자유에너지를 각각 나타낸다. 또한 친수성/소수성 표면상의 액적이송 메커니즘에서 비평형 형상으로 인해 액적내부에 발생하는 압력변화를 확인하기 위해 다음 식으로 정의된 압력에너지(pressure energy), PE 의 변화를 살펴보았다.

$$PE = \sum_{i=1}^{n-cells} p_i (\alpha_i V_i) \quad (8)$$

참고로 식 (8)은 액적내 평균 압력에 체적을 곱한 것으로도 인식할 수 있으므로, 액적내 평균 압력의 변화로 이해해도 무리가 없다.⁽¹¹⁾

Fig. 4(a)는 본 수치해석을 통해 예측된 친수성/소수성 표면위에 놓인 초기 구형 액적의 시간에 따른 운동에너지, 중력(또는 위치)에너지, 표면자유에너지, 점성소산 그리고 압력에너지의 변화를, Fig. 4(b)는 액체와 기체사이의 계면면적, 친수성

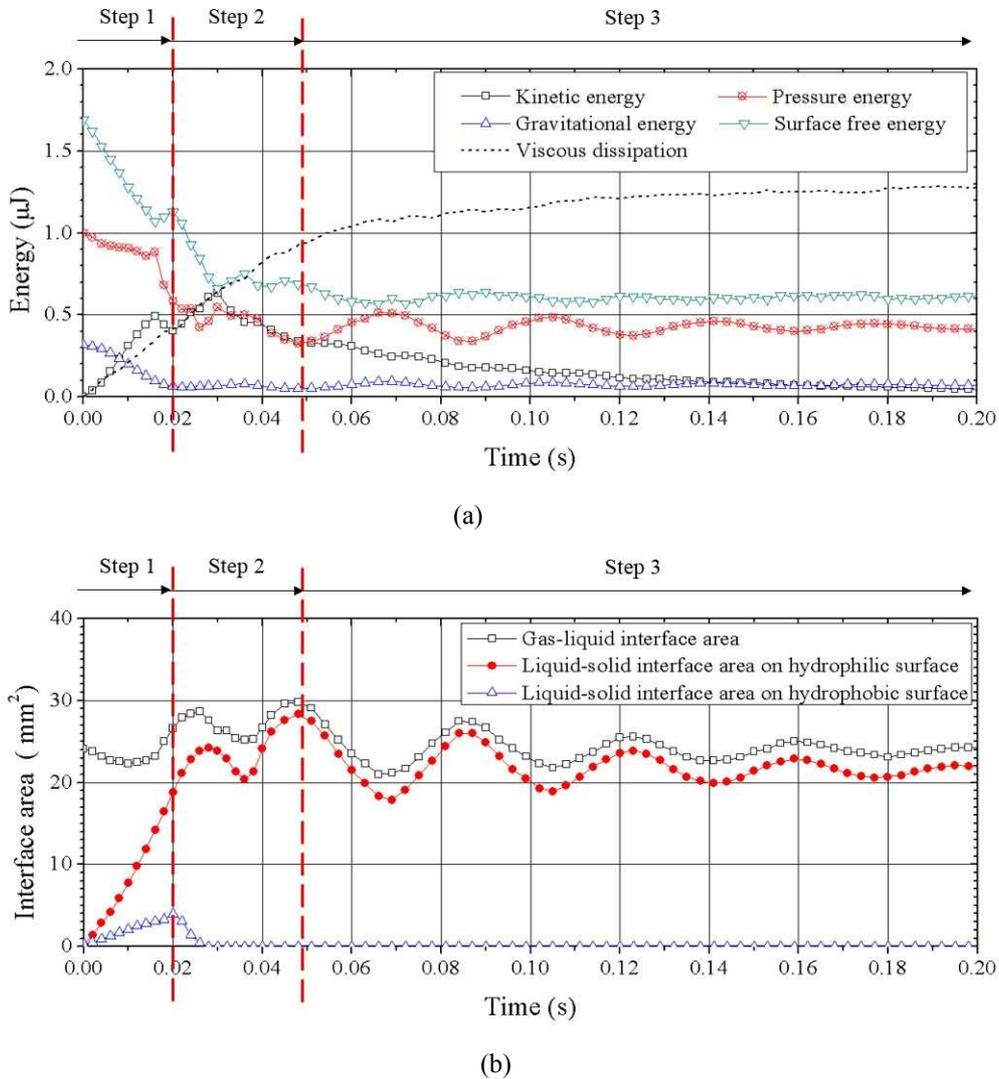


Fig. 4 (a) Time evolution of kinetic, gravitational, surface free and pressure energies with viscous dissipation inside the initially spherical droplet; (b) Time evolution of the area of hydrophilic and hydrophobic surfaces having liquid-solid phase and the area of the gas-liquid interface

표면과 소수성 표면과 액적의 접촉면적 변화를 각각 나타냈다.

먼저, 점성소산에 대한 결과를 보면, 다소 변동성이 존재하지만 예상한대로 시간에 따라 점성소산은 점차 증가하는 경향을 보여주고 있다. 이 결과는 본 수치해석의 적합성을 간접적으로 입증해 주고 있다고 사료된다.

본 연구에서는 구형 액적의 이동과정 동안 에너지 변화를 전술한 세 단계로 구분하여 액적이 송 메커니즘을 설명한 것과 같이, 세 영역으로 나누어 설명하고자 한다. 첫 번째 영역은 $t \approx$

0.02 s까지의 구간으로 친수성과 소수성 위로 액적이 형상 변화와 함께 양 방향으로 퍼져나가는 영역이다. 그리고 두 번째와 세 번째 영역은 비평형 형상이 심화되는 순간인 $t \approx 0.048$ s를 기준으로 나눌 수 있다.

먼저 첫 번째 영역은 전술한 바와 같이 구형으로 초기화된 액적이 친수성 표면의 평형 접촉각 45° 와 소수성 표면의 평형 접촉각 135° 를 이루기 위해 양 방향으로 퍼져나가려는 힘, 즉 모세관력 힘의 불평형이 발생한다. 이때 액적과 친수성/소수성표면의 접촉 면적이 모두 증가하게 되어(Fig.

4(b)) 표면자유에너지는 $t \approx 0.017$ s 까지 크게 감소하고, 반대로 운동에너지는 급격히 증가하며, 압력에너지는 서서히 감소하는 것을 볼 수 있다. 그러나 $t \approx 0.017$ s 이후에 운동에너지는 갑자기 다소 감소하고 표면자유에너지는 다소 증가하는데 반해 압력에너지는 급격하게 감소하게 된다 (Fig. 4(a)). 이 현상은 모세관력 힘의 불균형이 점차 사라지고, 부분적으로 소수성 표면에 가로막히는 블록효과가 상대적으로 액적에 강하게 작용하면서 액적의 형상을 더욱 심한 비평형상태로 변화시켜, 결과적으로 운동에너지는 다소 감소하게 되나, 액상-기상 간의 계면 면적이 급격히 늘어나게 되면서 표면자유에너지는 다소 증가하게 되고, 압력에너지는 급격하게 감소하게 된다고 사료된다. 또한, 첫 번째 영역에서 액적은 전반적으로 표면위로 압착되며 액적의 높이가 낮아지므로 위치에너지는 초기화 이후 감소하게 된다. 그러나 Fig. 4(a)의 에너지 변화를 보면 운동에너지의 변화 경향은 위치에너지 보다 표면자유에너지의 변화에 의해 영향을 받아 변화하는 것으로 보여진다. 이것은 본 연구에서 액적의 움직임이 중력의 효과보다 주로 모세관 효과에 의해 일어나게 된다는 것을 입증해주고 있다고 사료된다.

두 번째 영역에서 표면자유에너지는 액적이 소수성 표면을 벗어난 후, 액적꼬리가 사라지는 $t \approx 0.03$ s까지 다시 한차례 크게 감소한다. 이때 감소한 표면자유에너지는 액적을 친수성 표면 방향으로 이동하게 만드는 운동에너지로 전환되어 운동에너지는 다시 증가하여 $t \approx 0.03$ s에서 최솟점에 도달한 후 이후 단조 감쇄된다. 이것은 다음과 같이 설명할 수 있다. 즉, 전술한 바와 같이 소수성 표면위에 존재하는 액적 꼬리부분의 심한 곡률변화로 인해 이 부분에 매우 높은 압력이 분포하게 되어 이 압력 비균일에 의한 힘으로 액적이 소수성 표면으로의 퍼짐을 멈추고 소수성 표면 접촉선은 친수성 표면 쪽으로 되돌림을 시작하면서 소수성 표면상의 접촉면적이 급격히 줄어든다. 또한 블록효과가 시너지 효과를 발휘하면서 액적의 꼬리부분도 작아지고 높은 압력 중심이 친수성 표면 쪽으로 이동하게 된다. 그러나 친수성 표면 위에서 액적은 상대적으로 강한 부착력으로 인해 접촉면적이 증가하고, 액상-기상 간의 계면면적도 액적의 급격한 형상변화로 증가하다 액적이 소수성 표면을 벗어나면서 최고점에

이른다. 그후 블록효과가 사라져 액적 내부의 압력값들이 상대적으로 낮아지며 복잡한 압력분포를 만들면서 액적 후행 부분의 커다란 형상변화를 동반하면서 액적의 운동에너지는 감소하게 된다. 이 과정동안 압력에너지는 액적의 형상변화와 함께 불규칙적으로 진동하다가 최대 신장상태인 $t \approx 0.048$ s에서 최솟값을 보인다. 이것은 아래에 기술하는 바와 같이 액적이 불균형한 형상에서 최대 신장상태로 비평형 상태가 극대화 되었다는 것을 압력에너지로부터 확인할 수 있다.

마지막 세 번째 영역은 비평형 상태의 액적이 신장·수축을 반복하며 이동하면서 액적이 평형상태에 도달하는 과정이다. 결과로부터 이 과정에서 운동에너지는 점성소산에 의해 점차 단조 감쇄하게 되나, 액적내부에 발생하는 비균일 압력 분포들의 총합인 압력에너지는 액적이 신장·수축을 반복하는 주기와 거의 동일한 변화를 하면서 상대적으로 느리게 감쇄하고 있음을 확인할 수 있다. 이것은 다음과 같이 설명할 수 있다. 즉, 액적 중심의 곡률이 작은 신장상태에서는 Fig. 3에서 본 바와 같이 액적 접촉선 주변이 액적 중심에 비해 상대적으로 높은 압력분포를 가지며 전체적으로 내부압력이 작아지게 되어, 압력에너지 또한 작아지게 된다. 반대로 액적 중심의 곡률이 블록한 형상으로 회귀한 수축상태에서는 Fig. 3에서 본 바와 같이 중심부가 액적 접촉선 주변에 비해 상대적으로 높은 압력분포를 가지며, 전체적으로 내부압력이 커지게 되어, 압력에너지 또한 증가하게 된다. 또한 Fig. 4(b)의 결과는 전술한 바와 같이 관성진동의 시간 스케일 $\tau_{osc} \approx 10.7$ ms가 신장·수축을 반복하며 액적이 이동하는 구간의 특성 시간 스케일로 적절함을 확인할 수 있다.

4.3 3차원 원통형 액적이동의 해석결과

Fig. 5는 2차원 원통형 액적이 시간에 따라 변화되는 형상 및 움직임 결과를 나타낸다. 시간별 그림에서 왼쪽 아래 굵은 선으로 표시한 부분이 소수성 표면이고, 나머지 부분이 친수성 표면이며, VOF 값 $\alpha \geq 0.5$ 인 부분을 액적으로 나타냈다. 먼저, Fig. 5(a)-(g)를 보면 원통형 액적의 움직임 또한 구형 액적의 움직임과 마찬가지로 시간이 경과함에 따라 모세관력 힘의 불균형으로 인해 액적이 각각 친수성 표면과 소수성 표면의

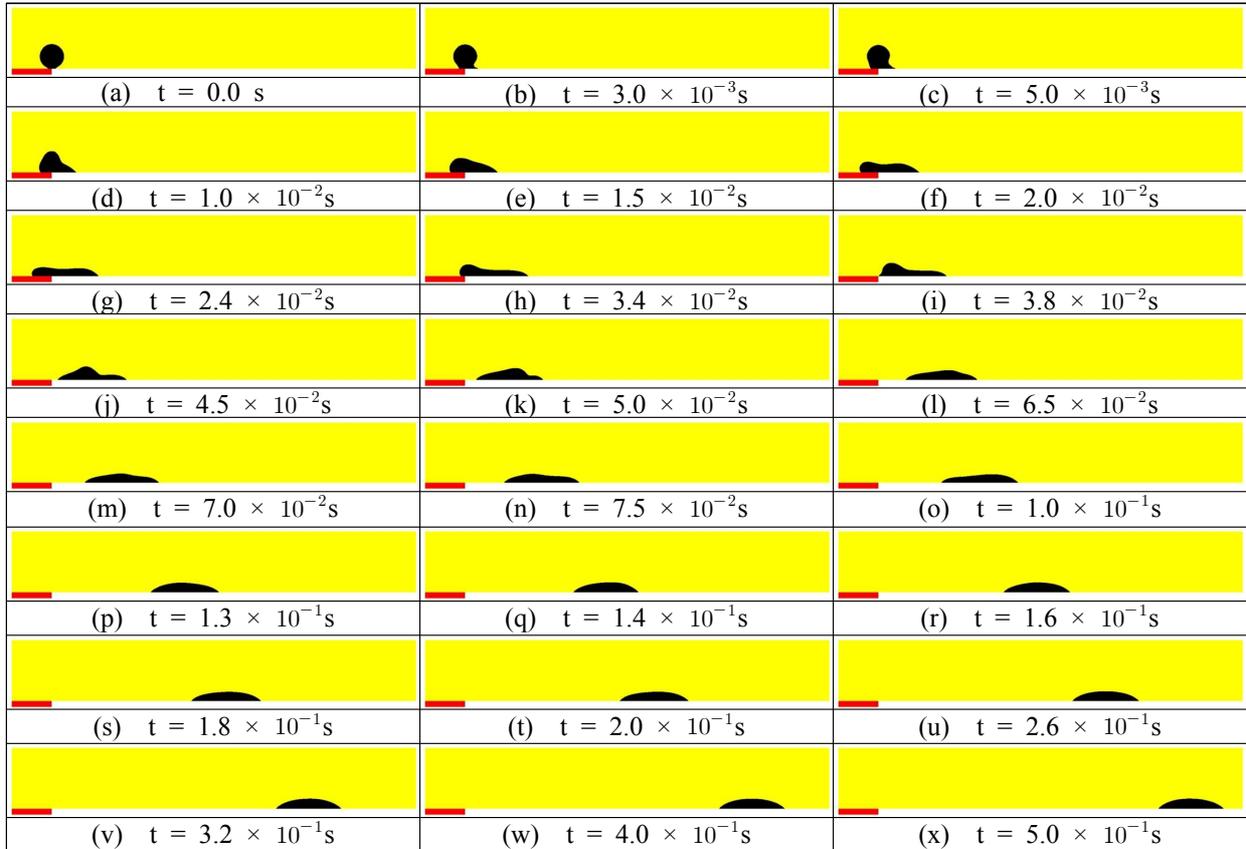


Fig. 5 Time evolution of the movement of water droplet initially having a cylindrical shape on horizontal hydrophilic/ hydrophobic surfaces(2D simulation)

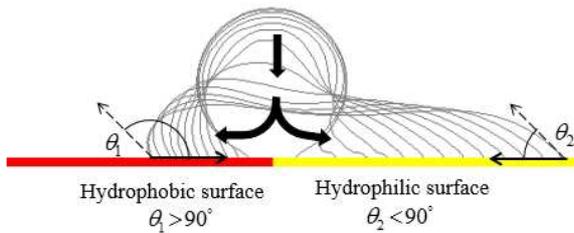


Fig. 6 Droplet shape contours of an initially cylindrical droplet on a combined hydrophilic/hydrophobic surface at several times (2D simulation)

평형 접촉각에 도달하기 위해 양(또는 반대)방향으로 퍼져나가게 된다. 이해도를 높이기 위해 초기에 시간에 따른 액적이 친수성 표면과 소수성 표면에 압착되며 접촉면적을 넓혀가는 보다 상세한 과정을 Fig. 6의 액적의 형상으로 나타냈다. 그림에서 보는 바와 같이 2D 원통형 액적 또한 3D 구형 액적과 마찬가지로 친수성과 소수성 표면 위에서 힘의 평형을 이룰 때까지 양끝으로 과도하게 퍼져나가기 때문에 액적 중심이 함몰되는

급격한 형상 변화가 일어나 액상-기상 간의 계면면적이 늘어나게 된다. 이때 친수성 표면위에서 액적은 지속적으로 친수성 방향으로 퍼져나가지만, 소수성 표면위에서 액적은 퍼져현상이 점차 느려지는 것을 볼 수 있다. 모세관력 힘의 불균형이 평형을 이룬 후, 액적은 친수성 표면의 상대적으로 강한 부착력과 소수성 표면의 급격한 형상변화로 수반되는 비균일 압력분포를 수정하기 위한 힘(거시적으로 응집력)으로 인한 두 힘의 시너지 효과에 의해 친수성 표면 쪽으로 이동하게 되는데, 소수성 표면 위에 작은 액적꼬리를 남기며 이동하는 구형액적의 이동과는 다소 다른 현상을 보인다. 즉, 구형 액적에서 나타나는 3차원 블록효과와 비균일 압력분포가 액적형상 및 액적이동에 전방향으로 영향을 미치는데 반해, 2차원 원통형 액적인 경우 오직 단방향으로만 작용하고 또한 단방향으로만 퍼져나갈 수밖에 없기 때문에 액적형상이 Fig. 3에 나타난 구형 액적과는 달리 위로 블록하게 나타나는 산의 형상이 마치 파도와 같이 앞으로 이동하며 신장상태의 액

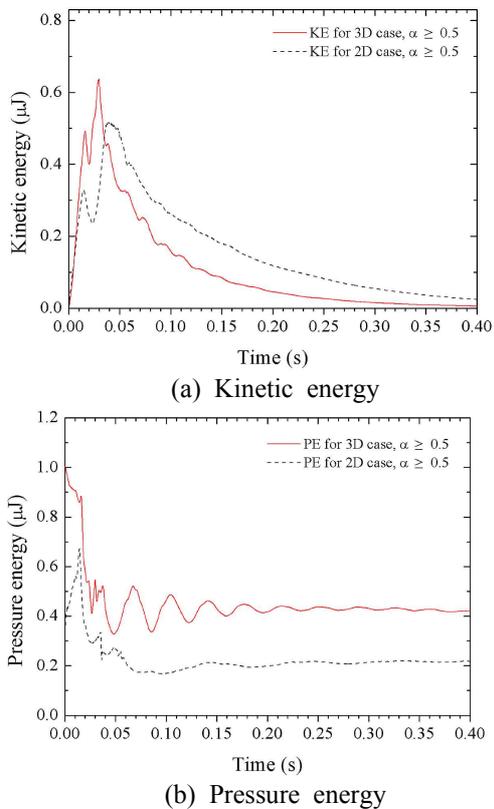


Fig. 7 Comparison between 2D simulation for a cylindrical droplet and 3D simulation for a spherical droplet on time evolution of total kinetic and pressure energies

적형상으로 변화하게 된다(Fig. 5(h)-(l)). 그 후 액적은 신장·수축을 하며 시간에 따라 점차 느려지면서 이동하고, 결국 평형상태에 도달하게 된다(Fig. 5(m)-(x)). 그러나 이 과정에서도 원통형 액적은 3차원 특성이 배제된 채 진행방향으로만 신장·수축을 하는 점이 구형 액적의 움직임과 다르다. 그러나 이와 같이 다른 특성에도 불구하고 친수성 표면위에 평형상태에 도달할 때까지 원통형 액적과 구형 액적의 액적 중심이 모두 초기 지름(원통형 액적은 체적에 기초한 상당 직경으로 환산함)의 약 9배까지 이동하는 것이 확인되었다.

4.4 2차원 원통형 액적과 3차원 구형 액적에 대한 에너지 변화 해석결과의 비교

Fig. 7은 가상적인 원통형 액적에 대한 2차원 해석과 구형 액적에 대한 3차원 해석에서 얻어진 액적의 시간에 따른 운동에너지와 압력에너지 변화를 비교한 그래프로, 2차원 해석은 점선으로, 3차원 해석은 실선으로 나타냈다. 참고로 그래프

에서 에너지는 정량적인 비교를 위해 원통형 액적의 축방향 길이를 조절하여 동일한 체적을 기준으로 하였다.

먼저 Fig. 7(a)의 운동에너지 변화를 살펴보면, 초기 구형 액적의 이송과 원통형 액적의 이송에서 모두 초기에 액적의 운동에너지가 급격하게 증가하였다가 다소 감소한 후 다시 빠르게 증가하여 최댓값을 나타낸 후 단조 감소하는 현상을 보이는 것을 확인할 수 있다. 그러나 3차원 해석과 2차원 해석의 차이점으로는 구형액적은 친수성 전 방향으로 빠르게 퍼져나가기 때문에 운동에너지가 $t \approx 0.03$ s에서 최댓값을 보인 직후에 급격히 감소하지만, 원통형 액적의 경우 오직 단 방향으로 퍼져나갈 수 밖에 없어 액적형상이 위로 볼록하게 산의 형상을 이루며 운동에너지를 크게 잃지 않기 때문에 $t \approx 0.038$ s에서 최댓값을 보인 후 $t \approx 0.05$ s 이후부터 급격히 감소하는 차이점을 확인할 수 있다. 또한 Fig. 7(b)의 모세관 파로 설명할 수 있는 압력에너지 변화를 통해 진행 방향으로 천천히 신장·수축을 반복하는 원통형 액적이동에 비해, 3차원 구형 액적은 진행방향과 진행방향의 수직방향으로 신장·수축을 주기적으로 빠르게 반복하며 이동하기 때문에 압력변화의 주기가 다른 것을 명확히 보여주고 있다.

5. 결론

본 연구에서는 외부동력을 사용하지 않고 표면장력에 의해 구동되는 명^(9,10)이 제시한 액적이송에 관한 새로운 개념을 확립시키기 위해서, 친수성/소수성 복합표면 경계면 위에 놓인 실제 구형 액적에 대한 수치해석을 통해 액적의 이송 메커니즘을 액적의 형상과 에너지 변화를 통해 명확히 파악하였다. 특히 본 연구에서는 액적이송 메커니즘을 액적계면이 벽면과 만나는 접촉선에서 발생시키는 벽면 부착력과 액체분자들 사이의 응집력 차이로 인해 야기되는 모세관력 힘의 불균형 관점에서 살펴보고, 이전 연구⁽⁹⁻¹¹⁾에서 보고한 액적이송 메커니즘과 연계시켰다. 또한 3차원 해석이 보이는 특성을 확인하기 위해 추가적으로 2차원 원통형 액적에 대한 수치해석을 수행하고 해석결과와 비교를 통해 액적이송에 관한 메커니즘 및 3차원 특성을 살펴보았다.

수치해석은 상용 프로그램인 Fluent 14.0의 VOF 방법을 사용하여 비정렬격자계 및 체적포착

법에서 크게 문제가 되는 번짐 현상과 같은 계면의 비물리적인 변형 및 수치확산 문제를 크게 개선한 것으로 알려진 CICSAM 모델⁽¹⁸⁾과 벽면부착 경계조건을 사용하여 수치해석을 수행하였다.

연구결과 초기 구형 액적에 대한 액적이송 메커니즘은 기존의 액적이송 메커니즘⁽⁹⁻¹¹⁾과 기본적으로 구동원리가 동일하며, 구체적으로 다음과 같이 3단계로 설명할 수 있음이 입증되었다. 즉, 첫 번째 단계는 초기에 모세관력 힘의 불균일이 친수성과 소수성 표면에서 각각 반대 방향으로 작용하나, 친수성 표면에서의 모세관력 힘의 불균일이 상대적으로 강해 결과적으로 액적은 친수성 쪽으로 움직인다. 이 과정에서 두 표면 위에서의 모세관력 힘의 불균일이 시너지 효과를 발휘하여 액적 내부의 운동에너지를 증가시키면서, 액적 전체 계면곡률을 심한 비균일 분포로 만들며, 이로 인해 액적 내부에 심한 비균일 압력분포가 형성된다. 두 번째 단계는 소수성 표면에서 모세관력 힘의 불균형이 점차 사라지면서 소수성 표면 위의 부착력에 비해 액적 계면곡률의 심한 비균일 분포에 따른 강한 힘(거시적으로 응집력)이 친수성 쪽으로 작용하고, 이 힘과 함께 친수성 표면에서의 상대적으로 강한 부착력이 시너지 효과를 발휘하여 액적은 친수성 쪽으로 계속 움직인다. 이 과정동안 시너지 효과로 인해 액적 내부의 운동에너지는 한단계 더 증가되고, 액적 전체 계면곡률도 더욱 심한 비균일 분포로 되며, 이로 인해 액적 내부에 심한 비균일 압력분포가 형성되어, 결과적으로 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태를 야기한다. 마지막 세 번째 단계는 이 강한 비평형상태로 인해 액적 내부에 형성되는 비균일 압력분포를 수정하기 위해 비평형 액적 표면에 발생하는 모세관과와 같은 진동을 수반하면서 힘의 평형을 이루는 접촉각 θ_{eq} 에 도달하는 동적과정을 통해 액적이 이송된다.

이와 함께, 구형 액적에서 나타난 특징적인 현상이 추가적으로 수행한 2차원 원통형 액적의 수치해석에서도 마찬가지로 나타나는 것을 확인할 수 있었다.

향후 본 연구에서 제시한 액적이송 메커니즘을 이용하여 이송할 수 있는 액적의 최대크기를 포함하여, 표면 거칠기 및 접촉각에 따른 영향 등에 관한 연구를 추진할 예정이다.

후 기

본 연구는 2013년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지 기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제(20131040200580)입니다. 또한 교육과학기술부와 한국연구재단의 BK21플러스사업의 일환으로 수행된 연구(S14SN01D0502)입니다.

참고문헌 (References)

- (1) Mettu, S. and Chaudhury, M. K., 2008 "Motion of Drops on a Surface Induced by Thermal Gradient and Vibration," *Langmuir*, Vol. 24, No. 19, pp. 10833~10837.
- (2) Mohseni, K., Arzpeyma, A. and Dolatabadi, A., 2006, "Behaviour of a Moving Droplet under Electrowetting Actuation: Numerical Simulation," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 84, No. 1, pp. 17~21.
- (3) Banerjee, A. N., Qian, S. and Joo, S. W., 2011, "High-Speed Droplet Actuation on Single-Plate Electrode Arrays," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 362, No. 2, pp. 567~574.
- (4) Yang, J. T., Chen, J. C., Huang, K. J. and Yeh, J. A., 2006, "Droplet Manipulation on a Hydrophobic Textured Surface with Roughened Patterns," *J. Microelectromechanical Systems*, Vol. 15, No. 3, pp. 697~707.
- (5) Chandesris, B., Soupremanien, U. and Dunoyer, N., 2013, "Uphill Motion of Droplets on Tilted and Vertical Grooved Substrates Induced by a Wettability Gradient," *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Vol. 434, pp. 126~135.
- (6) Kooij, E. S., Jansen, H. P., Bliznyuk, O., Poelsema, B. and Zandvliet, H. J. W., 2012, "Directional Wetting on Chemically Patterned Substrates," *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Vol. 413, pp. 328~333.
- (7) Zhu, X., Wang, H., Liao, Q., Ding, Y. D. and Gu, Y. B., 2009, "Experiments and Analysis on Self-motion Behaviors of Liquid Droplets on Gradient Surfaces," *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 33, No. 6, pp. 947~954.

- (8) Lee, J. S., Moon, J. Y. and Lee, J. S., 2014, "Study of Transporting of Droplets on Heterogeneous Surface Structure using the Lattice Boltzmann Approach," *Applied Thermal Engineering*, Vol. 1, No. 72, pp. 104~113.
- (9) Myong, H. K., 2014, "A New Concept to Transport a Droplet on Horizontal Hydrophilic/ Hydrophobic Surfaces," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 38, No. 3, pp. 263~270.
- (10) Myong, H. K., 2014, "Droplet Transport Mechanism on Horizontal Hydrophilic/ Hydrophobic Surfaces," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 38, No. 6, pp. 513~524.
- (11) Myong, H. K. and Kwon, Y. H., 2014, "Numerical Analysis of the Movement of an Initially Hemispherical Droplet on Hydrophilic/ Hydrophobic Surfaces," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 39, No. 5, pp. 405~414.
- (12) Myong, H. K. and Kwon, Y. H., 2015, "Behavior of Liquid Driven by Capillarity Force Imbalance on Horizontal Surface under Various Conditions," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 39, No. 4, pp. 359~370.
- (13) Schiaffino, S. and Sonin, A. A., 1997, "Molten Droplet Deposition and Solidification at Low Weber Numbers," *Physics of Fluids*, Vol. 9, No. 11, pp. 3172~3187.
- (14) Brackbill, J. U., Kothe, C. and Zamach, C., 1992, "A Continuum Method for Modeling Surface Tension," *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 335~354.
- (15) Myong, H. K. and Kim, J. E., 2006, "A Study on an Interface Capturing Method Applicable to Unstructured Meshes for the Analysis of Free Surface Flow," *KSCFE J. of Computational Fluids Engineering*, Vol. 11, No. 4, pp. 14~19.
- (16) Myong, H. K., 2011, "Numerical Simulation of Surface Tension-Dominant Multiphase Flows with Volume Capturing Method and Unstructured Grid System," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 35, No. 7, pp. 723~733.
- (17) Myong, H. K., 2012, "Numerical Study on Multiphase Flows Induced by Wall Adhesion," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 36, No. 7, pp. 721~730.
- (18) Ubbink, O., 1997, *Numerical Prediction of Two Fluid Systems with Sharp Interface*, PhD Thesis, University of London.