

분자 동역학 시뮬레이션을 이용한 나노 스케일 채널 내에서의 유체 유동 및 열적 특성에 관한 연구

최용석[†] · 김성진^{*}

Study on Fluid Flow and Thermal Characteristics in a Nanoscale Channel Using MD Simulation

Yong Seok Choi and Sung Jin Kim

Key Words : Molecular Dynamics(분자 동역학), Nanoscale Channel(나노 스케일 채널),
Poiseuille Flow(포아제 유동), Nonequilibrium(비평형)

Abstract

To analyze the fluid flow and thermal characteristics in a nanoscale system, the planar Poiseuille flow of a Lennar-Jones liquid through parallel plates formed by fixed atoms is studied using nonequilibrium molecular dynamics simulations. The role of important simulation parameters such as the channel width, the magnitude of external field, the temperatures of the top and bottom plates, and the interaction potential parameter between fluid and wall atoms, which affect flow patterns and heat transfer rate inside the channel, are investigated. Under the various simulation conditions, interesting phenomena deviated from the continuum predictions have found.

기호설명

A	xy 평면의 면적
F	원자에 인가되는 힘
J	열 유속
n	밀도
R	시스템 크기
T	온도
u	유속
x, y, z	직각 좌표
ε	에너지 매개 변수
ϕ	유효 포텐셜
σ	길이 매개 변수

τ 시간 매개 변수
 WF 벽면-유체 사이

1. 서론

최근 미세 공정 기술의 발달로 인해 마이크로 혹은 나노 크기의 시스템에서의 유체 유동 및 열적 특성에 대한 관심이 높아지고 있다. 이 때 나노 스케일에서의 물리적 현상을 기존의 거시적인 접근 방법으로 해석하는 데는 한계가 있기 때문에 대체 수단으로 떠오르는 것이 컴퓨터 시뮬레이션 방법인 분자 동역학 시뮬레이션 기법이다. 본 연구에서는 나노 스케일 채널 내에서의 유체 유동 특성을 알아보기 위해 단순한 유동 형태로 알려진 포아제 유동(Poiseuille flow)을 분자 동역학 시뮬레이션을 사용해 해석하고자 한다. 거시적인 접근 방법인 Navier-Stokes 방정식에 의하면 채널 내의 유체의 점성 계수가 일정하고 벽면에서 No-slip 조건이 성립한다는 가정 하에 각각 2 차 곡선과 4 차 곡선 형태의 유속 및 온도 분포에 대한 해석 해를

[†] 한국과학기술원 기계공학과 대학원
E-mail : cysuk98@kaist.ac.kr
TEL : (042)869-3083 FAX : (042)869-8207

^{*} 한국과학기술원 기계공학과

얻을 수 있다. 그러나 기존의 연구 들에 의하면[1-4] 나노 스케일 채널 내에서는 시뮬레이션 조건에 따라서 유체 유동이 연속체적 거동을 하기도 하고 그렇지 않기도 한다. 실제로 유체를 가두는 평판이 고체 원자들로 구성되어 있기 때문에 유체 원자와 고체 원자 간의 상호 작용에 따라서 유동 특성이 결정되게 된다. 따라서 본 연구에서는 나노 스케일 채널 내의 유체 유동 특성에 영향을 미칠 수 있는 여러 가지 중요한 인자들의 효과에 대해 알아보고 그로부터 유용한 전달 계수(Transport coefficient)인 점성 계수와 열 전도도의 분포를 계산한다. 본문은 다음과 같이 구성되어 있다. 2 장에서는 본 연구에서 해석하는 포아제 유동에 대한 시뮬레이션 조건에 대해 기술하고 3 장에서는 중요한 시뮬레이션 인자들로서 채널의 폭, 외부에서 인가되는 압력장의 크기, 아래 및 위 평판의 온도, 유체 원자와 고체 원자간에 작용하는 힘의 크기 등의 역할에 대한 시뮬레이션 결과들을 차례로 다룬다.

2. 시뮬레이션

평판 포아제 유동에 대한 시뮬레이션 형상은 그림 1 과 같다. 채널 내에 작용하는 압력 구배를 간단하게 모사하는 방법으로 유동 방향인 x 방향으로 모든 유체 입자에 동일한 크기의 힘 $n\mathbf{F}_{ext}$ 가 작용한다. 원자 들 간에 작용하는 힘은 다음과 같 같이 정의되는 WCA 포텐셜을 사용하여 구하였다.

$$\phi^{WCA}(r) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + 1; & r < 2^{1/6} \sigma \\ 0 & ; r > 2^{1/6} \sigma \end{cases} \quad (1)$$

벽면 원자는 고체 상태의 아르곤 원자로서 fcc 격자 구조로 제 자리에서 진동만 하고 온도는 일정하게 유지된다. 시뮬레이션 셀은 x, y 방향으로 주기적이다. 운동 방정식은 Leapfrog 방법을 사용하여 $0.001\tau (= 2.16fs)$ 만큼의 시간 간격을 가지고 적분한다. 유체와 벽면 원자는 동일한 아르곤 원자이고 초기 밀도는 0.84 로 주어졌다. 벽면 원자들 간의 상호작용과 벽면 원자와 유체 원자간의 상호작용은 모두 WCA 포텐셜을 사용하였다. 벽면 원자를 초기 위치에 고정시키기 위해 Tethering 포텐셜을 벽면 원자 간에 작용하는 포텐셜에 추가하였다. 포아제 유동에서는 외부에서 끊임없이 압력 형태의 에너지가 인가되므로 시스템이 평형상태에 도달하는 것을 고란시킨다. 유입되는 에너지로 인

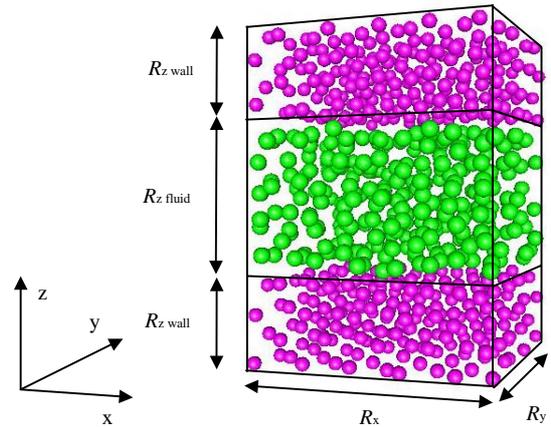


Fig. 1 Simulation geometry for Poiseuille flow

해 유체의 온도가 계속 상승하는 것을 막기 위해 벽면 원자에 Gaussian thermostat 을 부착한다. 나노 스케일 채널 내의 유체 유동에 영향을 미칠 수 있는 중요한 인자들로 채널의 폭, 외부 압력장의 크기, 벽면의 온도, 유체 원자와 벽면 원자 간에 작용하는 힘의 크기 등을 들 수 있다. 본 연구에서는 이 네 가지 인자 들의 영향을 알아 보기 위해 Table 1 에 정리된 것과 같은 조건으로 시뮬레이션을 수행하였다. 수치는 편의상 Lennard-Jones 환산 단위로 표현하였다. Case 1 은 채널의 폭이 $5.0472 (= 1.72nm)$ 로 매우 작은 경우, Case 2 는 외부 압력장의 크기를 $0.05 \sim 0.2 (= 0.24 pN \sim 0.97 pN)$ 으로 변화시킨 경우, Case 3 는 벽면 원자와 유체 원자 사이에 작용하는 힘의 크기를 유체 원자 상호 간에 작용하는 힘의 $0.125 \sim 2.0$ 배로 변화시킨 경우, Case 4 는 위 벽면의 온도가 $1.122 (= 136K)$ 이고 아래 벽면의 온도가 $0.722 (= 87K)$ 인 경우에 해당한다.

Table 1 Simulation conditions (in reduced unit)

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
System size ($R_x, R_y, R_z \text{ fluid}, R_z \text{ wall}$)	8.4119, 8.4119, 5.0472, 3.3648	6.7296, 6.7296, 11.7767, 3.3648	6.7296, 6.7296, 11.7767, 3.3648	6.7296, 6.7296, 11.7767, 3.3648
Number of atoms (fluid, wall)	300, 400	448, 256	448, 256	448, 256
Wall temperature (top, bottom)	0.722, 0.722	0.722, 0.722	0.722, 0.722	1.122, 0.722
External field F_e	0.2	0.05, 0.1, 0.15, 0.2	0.1	0.0, 0.05, 0.1, 0.15
Wall-fluid atoms interaction parameter	0.5	0.5	0.125, 0.25, 0.5, 1.0, 2.0	0.5

3. 결과 및 토의

3.1 채널 폭의 영향

채널 폭이 유체 원자 직경이 5 배 정도일 때의 시뮬레이션 결과이다. 그림 2 는 채널 내의 밀도 분포이고, 그림 3 은 유속 분포이다. 밀도 분포의 경우 채널 내에 층이 형성된 듯한 모습을 하고 있고 벽면 원자의 영향으로 벽면 근처에서 진동이 가장 크다. 채널 중앙에서는 초기 조건으로 주어졌던 밀도 0.84 에 근사함을 확인할 수 있다. 유속 분포의 경우 포아제 유동에 대한 연속체 이론의 해인 2 차 곡선에서 많이 벗어나는 것을 확인할 수 있다. 이것을 기존의 연구결과[4]에서도 확인할 수 있다. 첫번째 벽면의 위치는 ± 2.9442 이지만 실제 유속 분포는 ± 2.503 에서 0 의 값을 갖는 다는 사실로부터 채널의 유효 폭을 결정할 수 있다.

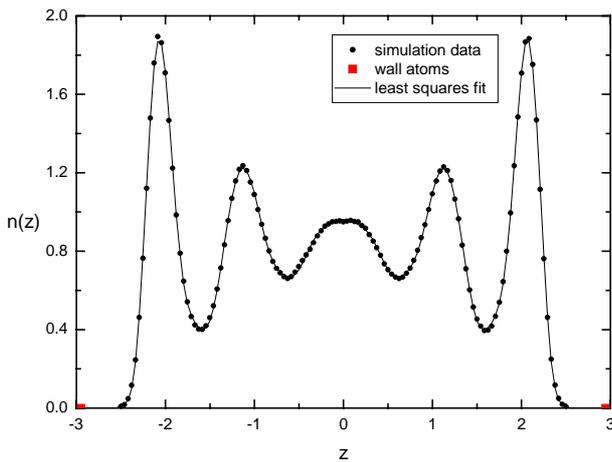


Fig. 2 Number density profiles (Case 1)

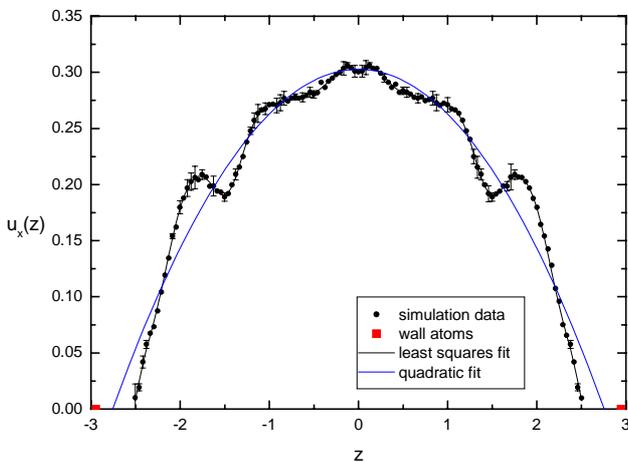


Fig. 3 Streaming velocity profiles (Case 1)

선형 상관 관계식(Linear constitutive relation)[2,3] 으로부터 밀도, 유속, 온도 분포를 알면 채널 내부의 점성계수와 열 전도도 분포를 구할 수 있다. 연속체 이론에 의하면 채널 내부에서 점성 계수와 열 전도도는 거의 일정한 값을 가져야 하지만 채널 폭이 매우 작고 벽면 효과가 매우 크기 때문에 값이 일정하지 않다.

3.2 외부 압력장의 크기의 영향

다음으로 외부 압력장의 크기를 변화시켰을 때의 결과이다. 표 1 에서 보듯이 Case 2 의 경우 채널 폭이 두 배로 증가 되었다. 그림 4 는 유속 분포이고 그림 5 는 온도 분포이다. 채널 폭을 두 배로 증가 시킴에 따라 유속 분포는 2 차 곡선에 잘 근사하고 있음을 알 수 있다. 즉, 유속 분포의 형태는 채널 폭에 크게 의존한다. 외부에서 인가되는 압력장의 크기가 증가되면 유체의 유속은 증

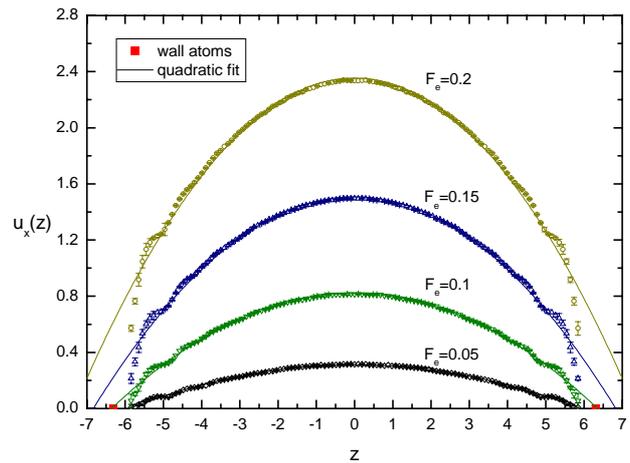


Fig. 4 Streaming velocity profiles variation for different values of external field (Case 2)

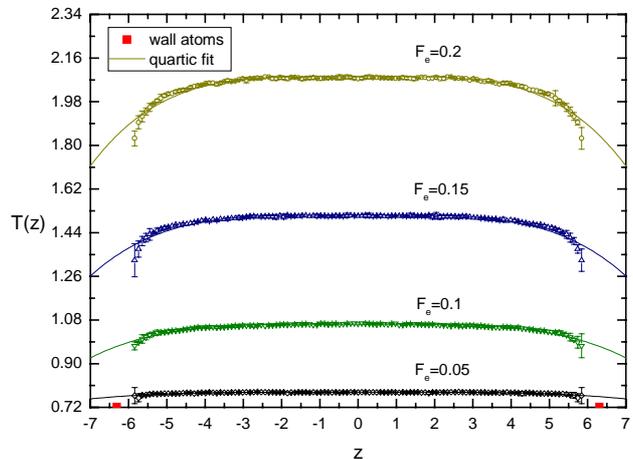


Fig. 5 Temperature profiles variation for different values of external field (Case 2)

가 되면서 동시에 벽면에서의 Slip 현상 또한 심화 됨을 확인할 수 있다. 이러한 현상은 온도 분포에서도 동일하게 발생한다. 온도 분포를 보면 전체적으로는 연속체 이론에 의한 해인 4 차 곡선에 근사 하는 것처럼 보이지만 실제로는 벽면 근처에서 오차가 상당히 크고 외부 압력장이 증가할수록 벽면에서의 온도 Jump 현상이 심화된다. 즉, 유체 원자와 벽면 원자 간의 열 교환이 미처 제대로 이루어지기도 전에 빠른 유속으로 인해 유체 원자 들이 쓸려 내려가는 것이다. 특이한 점은 온도 분포를 다음의 식을 사용해 평균화 하면 외부

$$T_{mean} = \frac{1}{U_{mean} A} \int u_x T dA \quad (2)$$

압력장의 크기에 관계없이 거의 일정한 온도 분포 곡선을 얻을 수 있다.

3.3 유체 원자와 벽면 원자 간에 작용하는 힘의 크기의 영향

유체 원자와 벽면 원자 간에 작용하는 힘의 크기는 벽면 근처에서의 유체 유동에 형태에 큰 영향을 미친다. 본 연구에서는 유체 원자 상호간에 작용하는 포텐셜의 크기(Well depth) ϵ 에 대한 배수로 유체 원자와 벽면 원자 간의 포텐셜의 크기 ϵ_{WF} 를 정하였다. 즉, $0.125\epsilon \sim 2.0\epsilon$ 만큼 변화를 주었다. 그림 6 과 그림 7 은 유속과 온도 분포에 대한 시뮬레이션 결과이다. 그림 6 에서 ϵ_{WF} 가 ϵ 의 두 배일 경우 벽면 근처에서 No-slip 조건을 만족하지만 ϵ_{WF} 가 작아질수록 유체 원자들은 벽면에서 미끄러지기 시작한다. 유속 분포는 전체적

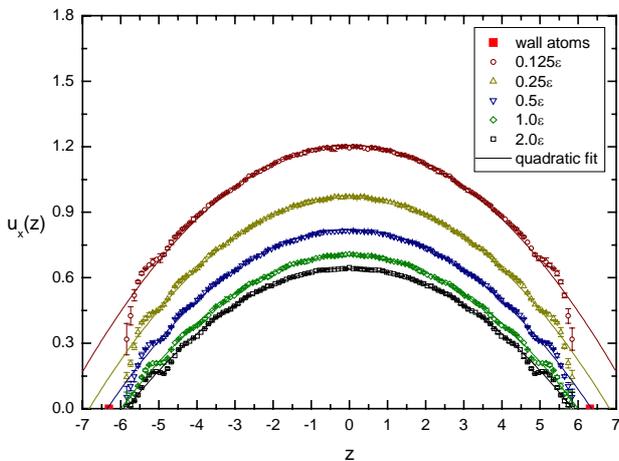


Fig. 6 Streaming velocity profiles variation for different values of wall-fluid interaction potential parameter (Case 3)

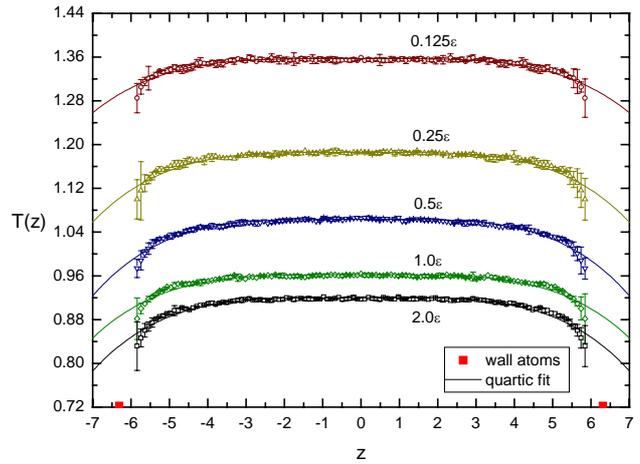


Fig. 7 Temperature profiles variation for different values of wall-fluid interaction potential parameter (Case 3)

으로는 2 차 곡선을 유지하고 있지만 벽면 근처의 유동은 ϵ_{WF} 의 크기에 따른 영향이 큰 것으로 나타났다. 따라서 유동의 안정성은 적당한 크기의 ϵ_{WF} 로 결정됨을 알 수 있다. 그림 7 에서 보듯이 벽면에서의 온도 Jump 는 여전히 존재하고 ϵ_{WF} 가 작을수록 그 경향은 커지고 있다. 즉, 벽면 원자와 유체 원자 간에 작용하는 힘의 크기가 매우 작은 관계로 유체 원자 들이 벽면 원자와 열교환을 충분히 이루지 못하는 것이다. 본 연구에서는 벽면 원자도 고체 상태의 아르곤으로 정하였기 때문에 유체 원자와 작용하는 포텐셜을 Lennard-Jones type 으로 계산하였지만 벽면 원자가 유체 원자와 다른 종류일 경우 포텐셜 선정에 주의 기울여야 한다. 유속 분포와 온도 분포 모두 연속체 이론의 해와 매우 잘 근사한다.

3.4 벽면 온도의 영향

마지막으로 유체 원자를 둘러싸는 아래 벽면과 위 벽면의 온도가 서로 다른 경우에 대한 시뮬레이션 결과이다. 그림 8 은 온도 분포의 계산 결과이다. 유속 분포는 그림 4 와 매우 유사하다. 위 벽면이 아래 벽면보다 온도가 높은 경우 아래 벽면 쪽으로 열전달이 일어나고 이것은 인가되는 외부 압력장이 0 일 때의 온도 분포로부터 유추할 수 있다. 벽면 근처에서의 온도 Jump 현상은 여전히 존재하고 특이한 점은 압력장이 0 일 때 벽면 근처에서의 온도 분포 변화율이 채널 내부에서보다 매우 크다는 것이다. 즉, 이것으로 인해 채널 내부의 유효 온도 구배를 계산할 때 약간 크게 계산하게 되는 경향이 있을 수 있고 이를 방지하기

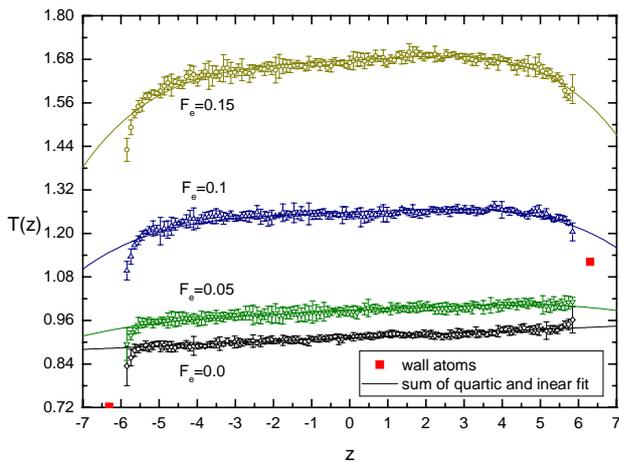


Fig. 8 Temperature profiles variation for different wall temperature (Case 4)

위해 벽면 근처에서의 온도 변화를 무시하고 직선 형태로 온도 분포를 Fitting 하였다. 연속체 이론으로부터 온도 분포에 대한 해석해를 구하면 $T(z) = a_0 + a_1z + a_4z^4$ 의 형태가 되는데 그림 8 을 보면 벽면 근처를 제외하고는 전체적으로 이 형태를 유지함을 알 수 있다. 외부에서 인가되는 압력장의 크기에 따라 채널 내부의 온도는 벽면 원자의 온도보다 낮거나 혹은 높은 모습을 한다. 즉, 점성 소산(Viscous dissipation)에 의한 열 발생량은 외부 압력장이 적어도 0.05 보다 커야 열 전도에 의한 열 발생량보다 커진다. 아래, 위 벽면의 온도가 다름에도 불구하고 벽면 근처에서의 온도 Jump 현상 때문에 그림 9 에서 보듯이 채널 내부에서의 열 유속의 분포가 거의 대칭적인 모습을 하고 있다. 이것은 유체 원자와 벽면 원자 간의 열 교환이 매우 비효율적이기 때문이기도 하다. 물론 온도 분포가 비대칭적이기 때문에 이로부터

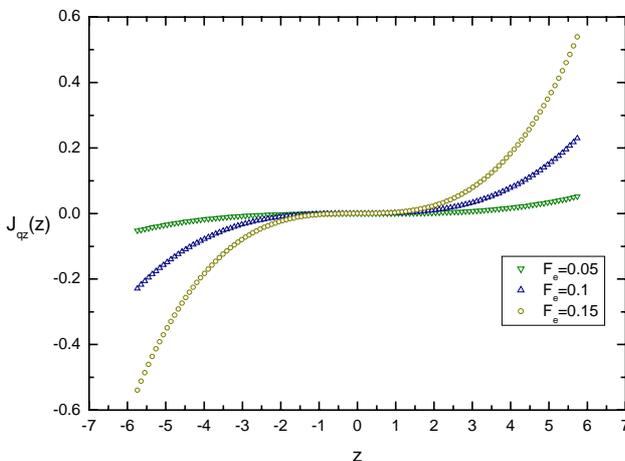


Fig. 9 Heat flux profiles variation for different values of external field (Case 4)

계산되어지는 열 전도도의 분포는 아래, 위 벽면에 대해 매우 다른 값을 가지고 있다.

4. 결론

본 연구에서는 비평형 분자 동역학 시뮬레이션을 이용하여 압력 구배가 존재하는 나노 스케일 채널 내에서의 유체 유동 및 열적 특성을 제시하였다. 채널 내의 유동 특성에 영향을 미치는 중요한 변수 들 중 채널의 폭, 외부에서 인가되는 압력장의 크기, 유체 원자와 벽면 원자 간에 작용하는 포텐셜의 크기, 벽면의 온도 등의 효과에 대해 알아 보았다. 특히 계산된 유속 및 온도 분포로부터 일정하지 않는 전달 계수를 계산할 수 있다. 위의 네 가지 인자 들의 영향을 정리하면 다음과 같다.

- (1) 채널 폭이 유체 원자 직경이 5 배 정도인 경우 연속체 이론인 Navier-Stokes 방정식의 해에서 벗어나는 현상이 일어나고 이것은 밀도, 유속 분포로부터 확인할 수 있다.
- (2) 외부에서 인가되는 압력장의 크기가 커질수록 유속 및 온도 분포의 벽면에서의 불연속성이 심화된다.
- (3) 유체 원자와 벽면 원자 사이에 작용하는 힘의 크기에 따라 벽면 근처에서의 유체의 거동이 결정된다.
- (4) 상, 하부 벽면의 온도가 서로 다른 경우에도 벽면 근처에서의 온도 Jump 현상은 매우 두드러져 양 벽면으로의 열 유속 분포는 대칭적이다.

후 기

본 연구는 21 세기 프론티어 연구개발사업인 나노메카트로닉스 기술개발사업단의 연구비 지원에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) J. Koplik, J.R. Banavar, and J.F. Willemsen, 1989, "Molecular dynamics of fluid flow at solid surfaces," Phys. Fluids A, Vol. 1, No. 5, pp. 781-794.
- (2) B.D. Todd, D.J. Evans, and P.J. Davis, 1995, "Pressure tensor for inhomogeneous fluids," Phys. Rev. E, Vol. 52, No. 2, pp. 1627-1638.
- (3) B.D. Todd, P.J. Davis, and D.J. Evans, 1995, "Heat flux vector in highly inhomogeneous nonequilibrium fluids," Phys. Rev. E, Vol. 51, No. 5, pp. 4362-4368.
- (4) K.P. Travis and K.E. Gubbins, 2000, "Poiseuille flow of Lennard-Jones fluids in narrow slit pores," J. Chem. Phys., Vol. 112, No. 4, pp. 1984-1994.