

기액계면의 경계층 두께에 관한 연구

최순호[†] · 송치성* · 최현규** · 이정혜*** · 김경근***

A Study on the Boundary Layer Thickness at a Liquid-Vapor Interface

Soon-Ho Choi, Chi-Sung Song, Hyun-Kyu Choi, Jung-Hye Lee, Kyung-Kun Kim

Key Words : Boundary Layer Thickness(경계층두께), Equilibrium State(평형상태), Liquid-Vapor Interface(기액계면), Molecular Dynamics(분자동역학)

Abstract

The boundary layer is a very important characteristic of a liquid-vapor interface since it governs the heat and mass transfer phenomena across an interface. However, the thickness of a boundary layer is generally micro- or nano-sized, which requires highly accurate measurement devices and, consequently, costs the related experiments very high and time-consuming. Due to these size dependent limitations, the experiments related with a nano-scaled size have suffered from the errors and the reliability of the obtained data. This study is performed to grasp the characteristics of a liquid-vapor interface, by using a molecular dynamics method. The simulation results were compared with other studies if possible. Although other studies reported that there existed a temperature discontinuity over an interface when the system was reduced to micro- or nano-sized, we confirmed that there was no such a temperature discontinuity.

기호설명

영문자

fs	: 펨토초 [femto second, 10^{-15} s]
k_B	: 볼츠만상수 [1.3807×10^{-23} J/K]
l	: 최근접 분자간 거리, 두께 [m or Å]
m	: 분자질량 [kg]
N	: 분자개수
ps	: 피코초 [pico second, 10^{-12} s]
R	: 반경 [m or Å]
r	: 분자간거리 [m or Å]
t	: 시간 [s]
T	: 온도 [K]
u	: 속도 [m/s]
V	: 체적 [m^3]
v	: 비체적 [m^3/kg]
v_m	: 분자 1 개당 체적 [m^3/ea]

x : 건도

그리스문자

ϵ	: L-J 포텐셜 우물의 깊이 [J]
σ	: 분자직경 [m or Å]

상첨자

'	: 포화액
"	: 포화증기
*	: 무차원

하첨자

AR	: 아르곤
cut	: 절단거리
des	: 설정치
sat	: 포화상태
sys	: 계

1. 서론

유체의 경계층이론(Boundary Layer Theory)은 고전적인 유체역학분야 뿐만 아니라 열/물질전달의 분야에 있어서도 중요한 연구주제로서 취급되고

[†] 책임저자, 정회원, 한국해양대학교 해사대학
E-mail : choi_s_h@naver.com

TEL : (051)410-4865 FAX : (051)405-5938

* 정회원, 한국기계연구원, 열유체공정그룹

** 학생회원, 한국해양대학교 대학원

*** 정회원, 한국해양대학교 해사대학

있으나, 경계층의 두께가 마이크로미터에서 나노미터 정도에 불과하기 때문에 실험수행이 대단히 어려운 관계로 신뢰성이 있는 실험결과를 구하기가 쉽지 않다. 더욱이 기액계면(Liquid-Vapor Interface)에서의 열/물질전달현상, 혹은 최근에 연구대상으로서 집중적인 조명을 받고 있는 미세유동관(Micro Channel)에서의 유동비등(Flow Boiling)이나 유동응축(Flow Condensation)과 같은 상변화현상(Phase Change Phenomemon)은 관찰대상의 크기가 일반적으로 μm 이하이기 때문에 현상의 측정 자체가 곤란하며, 따라서 측정기법 자체가 연구대상인 경우도 있다. 이와 같이 관찰대상의 크기가 극도로 적은 경우에는 전산모의실험(Computer Simulation)이 훌륭한 대용수단으로서 실제의 실험을 대체할 수 있다. 즉 분자간의 상호작용을 표현하는 포텐셜함수가 적절히 주어지고, 전산모의실험을 수행하기 위한 경계조건들의 설정이 실제 실험하고자 하는 계의 실험조건과 비교하여 동일하고 물리적으로 합당한 범위 내에 있다면 실제의 계를 충분히 그리고 정확히 모사할 수 있다⁽¹⁾.

최근의 분자동역학법(Molecular Dynamics Method)에 기초한 기액계면의 현상에 관한 전산모의에 관한 연구는 1990 년대의 중반기부터 Maruyama et al.에 의해 수행되기 시작하였으나, 이들의 연구는 액적(Liquid Droplet)의 경계면^(2,3) 혹은 고체표면상에 존재하는 액적^(4,5)의 증발과 응축에 관한 것으로서 자유표면을 유지하고 있는 기액계면에 관한 체계적인 연구는 현재까지 드문 실정이다.

본 연구는 기액계면의 자유표면(Free Surface)에서 발생하는 열/물질전달현상의 전반적인 특징을 미시적인 관점(Microscale Viewpoint)에서 파악하기 위한 시도로서, 포화상태에 있는 기액계면의 경계층 두께가 포화온도와 건도에 따라서 어떻게 변화하는지를 알아보기 위해 분자동역학법을 이용하여 수행하였다. 분자간의 운동은 운동방정식의 수치적분이 가장 간단한 오일러법을 이용하였으며, 대상물질로서는 불활성 물질인 아르곤(Argon)을 선택하였는데, 이는 분자간의 상호작용력을 계산할 때에 분자직경의 수배에 불과한 단거리력(Short Range Force)만을 고려해도 충분한 계산상의 이점이 있기 때문이다⁽¹⁾.

2. 계산방법

2.1 계산계의 배치와 온도제어

분자동역학법을 이용한 전산모의실험을 위해 분자들을 배치하여 계산계(Simulation System)를 구성할 때에 유의해야 할 부분은 가능한 한 현실계와 유사하도록 분자를 배치해야 평형상태로의

이행에 필요한 계산시간을 절약할 수 있다는 점이다. 예를 들어, 기체상태가 연구의 대상이라면 분자를 계산계의 전체적에 걸쳐 일정분포로 등간격의 배치를⁽⁶⁾, 액체상태의 경우에는 임의의 불규칙적인 배치나 기체의 경우와 같이 등간격의 규칙적 배치를 하는 것이 일반적이다. 그리고 고체상태의 경우에는 단지 실험으로부터 알려진 인접 분자간의 거리를 사용하는 것으로 충분하다⁽⁷⁻⁹⁾.

하지만, 본 연구와 같이 액체와 기체상태가 공존하는 자유표면(Free Surface)에서의 기액계면이 연구대상이라면 기체, 액체 혹은 고체만의 단상(Single Phase)만을 대상으로 하는 경우와 비교하여 상황이 상당히 복잡하게 된다. 만일 분자를 기체상태의 경우와 같이 전체 계산계 내에 등간격으로 배치하면 분자간의 거리가 너무 멀어져 인력이 매우 약하게 되어 기체상태를 유지하고 만다. 반대로 분자들을 너무 가깝게 배치하면 주위의 분자들로부터의 영향이 매우 강하게 되어 고체상태 혹은 액적(Droplet)의 상태를 유지하거나 강한 반발력의 영향에 의해 계가 쪼개어져 자유표면을 형성시킬 수 없는 경우도 발생한다.

본 연구에서는 기액계면을 유지시키기 위해 분자간 거리는 전산모사를 수행하고자 하는 계의 상태에 대응하는 액체상태의 실제의 분자간 거리를 구해서 Fig. 1 에 보인 것과 같이 분자를 배치하였으며, 수백에서 수천개의 분자를 이용하여 미시영역(Micro System)에 대한 모의실험을 수행할지라도 거시영역(Macro System)에 대해 수행한 것과 동일한 결과를 얻기 위해서 3 차원의 주기경계조건(Periodic Boundary Condition, PBC)을 적용하였다.

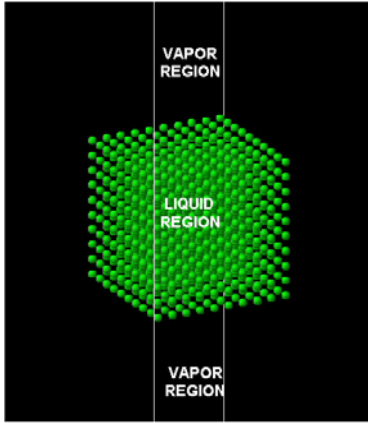
시뮬레이션은 Fig. 1 의 N (입자수), V (체적) 일정한 계에 대해서 반복계산을 위한 시간간격을 $\Delta t=5$ fs 로 하여 100 번의 계산마다 식(1)을 이용하여 계의 온도제어(Temperature Control)를 수행하면서 초기 10 만번의 반복계산(500 ps 에 해당)을 하였다.

$$u = \sqrt{\frac{3k_B \cdot T_{des}}{m}} \quad (1)$$

초기계산 후에는 계를 그대로 방치하는 완화과정(Relaxation Process)을 거쳤으며, 이 완화과정을 통해 계를 완전히 평형상태에 도달시킨 후, 또한번의 500 ps 동안의 계산결과로부터 시간평균(Time Average)을 취하는 방법을 통해 관심의 대상이 되는 계의 특성을 해석하였다. 상기의 Table 1 은 아르곤의 물성 및 시뮬레이션에서 사용한 파라미터들을 정리한 것이다.

Table 1 Properties of Argon and Simulation Parameters

Mass of Argon, m_{AR} (kg)	6.634×10^{-26}
Diameter of Argon Molecule, σ_{AR} (Å)	3.4
Depth of Potential Well, ϵ_{AR} (J)	1.67×10^{-21}
Time Interval, Δt (fs)	5.0
Cut-off Length, R_{cut} (σ_{AR})	3.5
Initial Arrangement of Molecules (x, y, z Directions)	10x10x10
Intermolecular Distance for Initial Arrangement, l (Å)	3.70 @ $T_{sys}=100$ K 3.77 @ $T_{sys}=110$ K

**Fig. 1** Simulation System for a Liquid-Vapor Interface

2.2 인접분자간 거리 및 액막두께의 결정

아르곤의 경우 고체상태에서 실제적으로 면심입방(Face Centered Cubic, FCC)의 결정구조를 이루고 있기 때문에 계산계의 상태에 관계없이 대부분의 연구에서는 FCC 구조로 배치하는 것이 일반적이나⁽⁶⁻⁹⁾, 본 연구에서는 비현실적이기는 하지만 분자배치에 있어 가장 단순한 형태인 한변의 길이가 l 인 정육면체의 중앙에 1 개의 분자를 위치시킨 단순입방구조(Simple Cubic Structure)로 배치하였다. 이는 고체의 경우에는 정확한 전산모사를 위해 분자배치가 실제의 결정구조와 일치하는 배치가 요구되지만 기체나 액체의 경우에는 시뮬레이션 도중에 초기의 배치상태가 깨어져 분자들이 무질서(Random)하게 움직이게 되므로 초기상태와는 전혀 무관한 결과를 제공해주기 때문이다⁽⁶⁾.

분자수 N 인 계산계에 Fig. 1 에 보인 바와 같이 분자를 배치하기 위해서는 우선 계산계의 전체적을 구해야 하며, 2.1 절에서 기술한 바와 같이 가능한 한 실제의 포화상태에 대응하도록 하기 위해

아르곤의 포화상태 물성치⁽¹⁰⁾와 시뮬레이션시 가정한 건도(Quality), x 를 이용하여 다음과 같이 체적을 산정하였다.

$$V_{sys} = N \cdot x \cdot v_m' + N \cdot (1-x) \cdot v_m'' \quad (2)$$

식(2)에서 v_m' 와 v_m'' 는 각각 포화상태의 액체와 증기의 분자 1 개당의 평균체적을 의미하며, 이는 각 상태의 비체적(Specific Volume)과 분자 1 개의 질량으로부터 다음과 같이 구할 수 있다.

$$v_m' = v' / m \quad (3)$$

$$v_m'' = v'' / m \quad (4)$$

계산계는 Fig. 1 에 보인 것과 같이 직육면체로 설정하였으며, 개개의 분자를 배치하기 위한 최인접 분자간의 거리, l 은 액체상태에서의 분자 1 개가 차지하는 평균체적, v_m' 을 1/3 승함으로써 다음과 같이 구하였다.

$$l = \sqrt[3]{v_m'} \quad (5)$$

한 개의 분자는 식(5)로 주어지는 한변의 길이가 l 인 정육면체의 한가운데에 위치한 걸로 가정하였다. 식(10)에 의한 l 은 2.1 절에서 설명한 바와 같은 이유로 인하여 기체와 액체간의 경계를 이루는 자유표면을 성공적으로 형성시키기 위해서는 매우 중요한데, Fig. 2 는 부적절하게 분자간의 거리를 선정한 경우의 예를 보이는 것이다.

Fig. 2 (a)는 포화온도가 100 K, 그리고 (b)는 140 K 로 설정하고 분자간 거리를 식(5)에 의한 값보다 약 10 % 정도 적게 하여 초기배치한 후, 5000 회의 반복계산, 즉 2.5 ps 의 시간이 경과하였을 때의 계산계의 상태를 보여주는 것으로서 계의 내부에 자유표면이 형성되지 않음을 보여주고 있다. 본 연구에서는 안정된 자유표면의 형성을 위한 인접분자간의 거리를 산정하기 위해 식(5)에 의해 주어지는 l 값의 90 %에서 130 %까지의 다양한 값들에 대해 자유표면의 형성을 조사한 결과, 식(5)의 l 보다 적은 값을 사용하면 2.1 절에 기술한 것과 같은 이유로 인해 Fig. 2 에 보인 것처럼 자유표면은 형성되지 않으나 30 % 정도의 큰 값까지는 Fig. 1 에 보인 중앙부의 액체영역이 초기에 수축되어진 후 안정된 기액계면을 형성함을 확인하였다. 따라서 본 연구의 저자들은 식(5)의 분자간 거리, l 은 포화상태의 기액계면을 형성하고자 하는 경우, 안정된 기액계면을 형성시키기 위한 인접분자간 거리의 최소치에 대한 기준을 제공한다고 판단하고 있다.

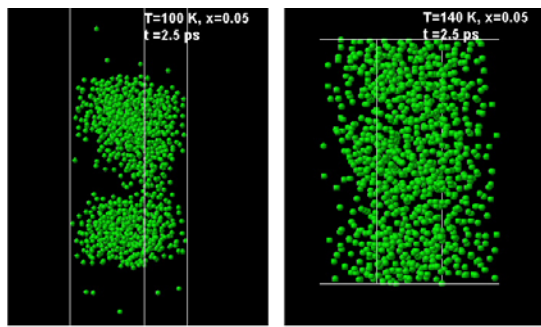
(a) $T_{\text{sat}} = 100 \text{ K}$ (b) $T_{\text{sat}} = 140 \text{ K}$

Fig. 2 The Snapshots in the case of the Improper Intermolecular Distance for a Liquid-Vapor Interface

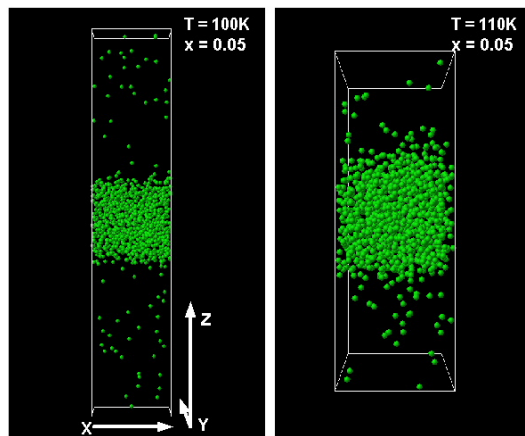
(a) $T_{\text{sat}} = 100 \text{ K}$ (b) $T_{\text{sat}} = 110 \text{ K}$

Fig. 3 The Snapshots of a Liquid-Vapor Interface in the case of the quality, $x=0.05$

본 연구에서는 밀도경계층의 두께를 평가하기 위해서 Fig. 3 에 보인 계산계를 적당히 설정한 두께로 균등히 분할한 후, 분할된 각 슬랩(Slab)에 속하는 분자들을 계수(Counting)하고 슬랩의 체적으로 나누어 수밀도(Number Density)를 계산하였다. 그리고 온도경계층은 각 슬랩에 포함된 분자들의 속도로부터 2.1 절의 식(1)을 사용하여 각 슬랩의 온도를 구하였다.

Fig. 4 는 상술한 방법으로 구한 $T=100 \text{ K}$, $x=0.05$ 인 경우, 슬랩의 두께를 1 \AA 으로 하여 구한 밀도경계층과 온도경계층을 보이는 것으로서 비교를 위하여 실제의 실험치로부터⁽¹⁰⁾ 계산한 수밀도를 함께 보이고 있다. 중앙의 실선부는 밀도경계층을, 그리고 점선부는 온도경계층을 나타내고 있으며, 슬랩의 두께에 따른 밀도분포와 온도분포의 변화를 파악하기 위해 1 \AA 외에 2 \AA 및 4 \AA 의 두께에

대해서도 계산하였으나 그래프의 변동폭을 감소시키는 효과 외에는 어떤 본질적인 변화도 없음을 확인하였다. 밀도경계층의 경우, 증기영역의 수밀도는 계산계의 포화온도에 대응하는 포화증기의 실험치와 일치하며, 액체영역은 약 3 % 정도의 오차를 가짐을 확인하였다. 그러나 계를 구성하고 있는 분자수가 거시적인 관점에서 연속체 가정의 여부조차 의심스러운 정도인 단지 1000 개 밖에 되지 않음을 고려한다면 본 연구결과는 매우 만족할 만한 수준의 재현성(Reproducibility)을 제공한다고 할 수 있다.

Fig. 4 에서 특히 주목해야 할 부분이 있는데, 이는 온도분포를 나타내기 위해 “*”표시와 “**”표시의 2 가지를 사용했다는 점이다. “*”표시의 온도분포는 계산구간 동안에 걸쳐서 매 순간마다 계산되는 Fig. 3 의 분자분포로부터 각 슬랩에 속한 분자들을 계수하고, 이들의 운동에너지를 온도로 환산한 시간평균으로부터 구한 것이다. 이는 미소계(Microscale System)의 경우에는 포화상태라 할지라도 기액계면에는 온도경계층이 존재함을 의미하며, 이와 같은 포화상태하에서 증기와 액체사이의 온도차는 거시적인 관점에서의 실험을 고려하는 한 인정하기 힘든 상황임에 틀림없다. Z. Y. Guo, D. X. Xiong 등도 분자동역학법에 의한 액적과 액막에 대한 연구를 수행하였으며, 결과로서 얻은 Fig. 4 와 유사한 밀도 및 온도분포로부터 전체계가 포화상태일지라도 미소계의 경우라면 온도경계층이 존재한다고 주장하였다⁽¹¹⁾. 하지만 본 연구의 저자들은 이는 분자동역학법으로 얻은 분자들의 위치 및 속도에 관한 값들로부터 각 슬랩의 온도를 계산할 시 슬랩내에 분자가 존재하지 않는 경우를 고려하지 않음에 의해 나타나는 계산상의 오류라고 판단하고 있다. 즉 분자동역학법은 수천개의 분자들을 대상으로 수행하는 것이 일반적이며, 특히 본 연구와 같이 기액계면을 연구대상으로 하는 경우 많은 분자들이 존재하는 액체영역 혹은 계면영역과는 달리 증기영역에 속하는 슬랩에는 분자가 존재하지 않는 순간들이 있으며, 온도는 분자의 운동에너지로부터 평가되기 때문에 분자가 없다는 것은 그 순간에 있어 온도를 정의할 수 없음을 의미한다. 따라서 온도분포의 적절한 평가를 위해서는 평형상태에 도달한 이후의 시뮬레이션 시간에서 분자가 존재하지 않는 경우의 시간들을 시간평균시에 제외해야만 하며, Fig. 4 의 “**”으로 표현한 온도분포가 이를 나타내는 것이다. “**”의 온도분포는 분자가 존재하지 않는 시간을 고려하여 재계산하면 각 슬랩의 온도분포는 증기영역의 경우에

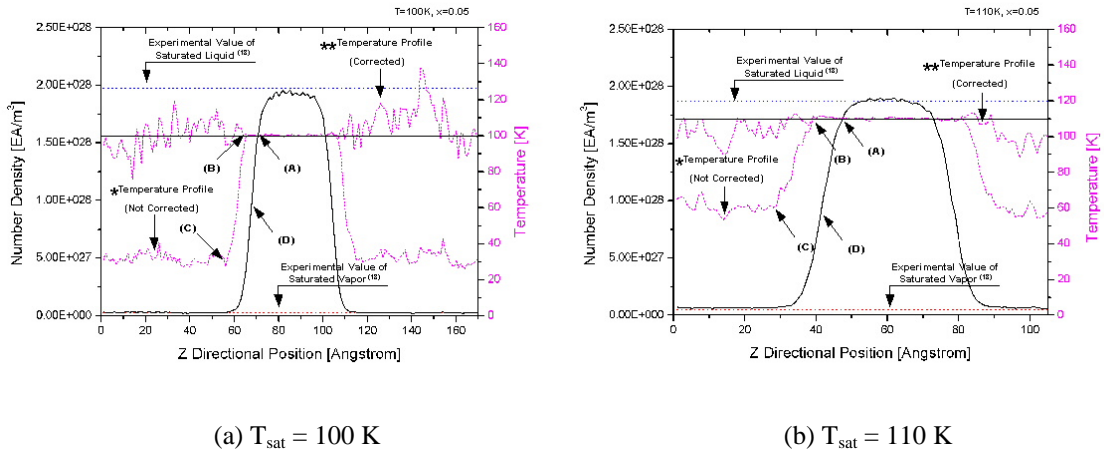


Fig. 4 The Snapshots of a Liquid-Vapor Interface in the case of the quality, $x=0.05$

는 매우 적은 수의 분자가 존재하는 관계로 액체 영역에 비해 포화온도를 중심으로 하여 매우 심한 온도변동을 보이고는 있으나, 증기영역, 계면영역 및 액체영역 구분없이 포화온도를 유지함을 보이고 있다. 이로부터 Z. Y. Guo, D. X. Xiong 등⁽¹¹⁾에 의한 포화상태에서도 미소계의 경우에는 온도경계층이 존재한다는 주장은 받아들이기 어렵다. 하지만 이들 “*”, “**” 표시의 온도분포는 다음과 같이 기액경계면의 두께에 관한 일차적인 정보를 제공해준다고 할 수 있다.

물리적인 직관에 의하면, 기액계면은 열역학적인 물성치가 액체의 값에서 증기의 값으로 연속적으로 변화하는 영역일 것으로 추정되나, 물성이 연속적으로 변화하기 시작하는 지점을 어디로 정의할 것인가의 극히 애매모호한 부분이 있으며, 이에 대한 명확한 정의가 필요하다. S. H. Park^(12,13) 등은 Fig. 4 에 보인 것과 같은 계산계에 대해서 액막의 두께를 정의하기 위해 그래프상에 (D)로 표시한 증기의 수밀도와 액체의 수밀도와의 산술평균과 동일한 값을 가지는 지점을 기준으로 정하였으며, 적어도 액막과외에 대한 최소두께에 대한 기준으로서는 전혀 무리가 없다. 그러나 (D)점은 명백히 천이영역에 해당하므로 실제의 경계층 두께를 측정하기 위한 기준으로서는 적절치 않으며, 따라서 본 연구에서는 그래프상의 (A)점을 기준으로 하였다. “*”의 온도분포와 “**”의 온도분포가 겹치는 (A)점과 (B)점 사이의 영역은 밀도가 액체보다는 적고 증기보다는 높으나 항상 분자가 존재하는 부분으로서 물성이 증기의 값보다는 액체에 가까운 영역이라 할 수 있으며, (C)점부터는 물성이 완전히 증기와 같아지기 시작한다고 할 수 있다. Fig. 5 은 Fig. 4 의 포화온도가 100 K 인 경우의

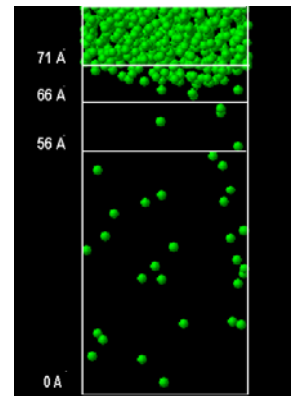


Fig. 5 Molecular Configuration at a Liquid-Vapor Interface

(A), (B), (C)에 해당하는 각 부분의 예를 보이는 것으로서 (A)점의 위치는 자유표면에 해당함을 확인할 수 있다. 본 연구에서는 (A)에서 (C)까지를 경계층의 두께로서 간주하였으나, Fig. 4 에서 알 수 있는 바와 같이 Fig. 5 의 자유표면에서 액체영역의 일부까지도 계속해서 밀도가 연속적으로 변화하기 때문에 경계층은 이보다 두꺼울 것으로 예측하고 있다.

본 연구에서는 포화온도와 건도에 따른 경계층의 두께변화를 파악하기 위해 $T_{sat}=100$ K, 110 K 의 두 경우에 대해 $x=0.05$ 부터 $x=0.40$ 까지 건도를 5% 씩 증가시키면서 계산을 수행하였으며, 그 결과 경계층의 실제적인 두께는 건도와는 관계없이 일정하게 유지되나, 계의 온도에는 영향을 받는다는 것을 확인하였다. 즉 포화온도가 증가할수록 경계층은 두꺼워지며, 이는 기존의 연구와 일치하는 결과이다^(12,13). 그러나 포화온도가 증가하면 일반적으로 포화액의 밀도는 감소하고 포화증기의

밀도는 증가하므로 이는 증기상태와 액체상태에서의 평균적인 분자간 거리가 포화온도에 따라 변화함을 의미하며, 따라서 경계층의 두께를 평가하는 경우 이의 영향을 배제하기 위한 수단이 필요하다. 이를 위해 본 연구에서는 포화온도에 대응하는 포화액의 평균적인 분자간의 거리와 계산된 경계층 두께와의 비로서 정의한 무차원 두께로서 평가하였으며, 포화온도에 따른 분자간 평균적인 거리의 변화를 고려하더라도 경계층의 두께는 포화온도에 따라 증가함을 알 수 있다.

4. 결론

(1) 전산모의실험에서 포화상태에서의 기액계면의 자유표면을 형성시키기 위해서는 초기의 분자 배치에 있어 분자간 거리와 본 연구에서는 취급하지 않았으나 액막의 두께는 매우 중요한 인자이며, 특히 분자간 거리를 부적절하게 선택하는 경우 자유표면은 형성되지 않는다. 적절한 분자간 거리는 포화상태의 실험치를 이용하여 식(10)으로부터 구할 수 있으며, 이는 최소치에 대한 기준을 제공한다. 즉 식(10)에 의해 구해진 값보다 적은 값을 사용하여 분자들을 배치하면 자유표면의 형성은 매우 어려우나, 적어도 130 % 정도의 큰 값까지는 무난히 자유표면이 형성되어짐을 확인하였다.

(2) 기존의 연구⁽¹¹⁾에서는 계의 크기가 나노미터 정도인 미소계의 경우 포화상태일지라도 증기영역과 액체영역의 온도는 동일하지 않으며, 온도경계층이 존재한다고 보고하였으나 이는 온도분포를 평가할 때 발생하는 계산상의 오류이며, 시간평균시에 수밀도가 낮은 영역에서 분자가 존재하지 않는 시간을 제외한다면 온도분포는 증기영역과 액체영역에서 동일한 포화온도를 나타내므로 포화상태인 경우에는 미소계라고 해서 특별히 온도경계가 발생한다고 할 수 없다.

(3) 계가 적어도 특정온도의 포화상태에 있을 경우 경계층의 두께는 건도에 관계없이 일정하다.

(4) 경계층의 두께는 포화온도에 의해 민감한 영향을 받으며, 포화온도에 따른 포화액의 평균적인 분자간 거리를 고려하더라도 포화온도가 높을수록 두꺼워진다.

(5) 경계층의 두께를 평가하기 위해서는 경계층이 시작되는 부분의 정의를 명확히 할 필요가 있으며, 특히 액체영역에서 경계층이 시작되는 부분을 지정하는 것이 매우 중요하다. 하지만 현재까지 이에 대한 명확한 연구결과는 보고된 적이 없으며, 최소한 본 연구의 결과로부터 자유표면이 시작되는 위치는 Fig. 4에 보인 2개의 온도분포로

부터 명확히 지정할 수 있다.

참고문헌

- (1) D. Frenkel and B. Smit, 1996, *Understanding Molecular Simulation—From Algorithms to Applications*, Academic Press, New York, pp. 1~6.
- (2) S. Maruyama, S. Matsumoto and A. Ogita, 1994, "Surface Phenomena of Molecular Clusters by Molecular Dynamics Method", *Thermal Sci. & Eng.*, Vol. 2, No. 1, pp. 77~84.
- (3) S. Maruyama, 1994, "Simulation of Liquid-Vapor Inter-face by Molecular Dynamics—To Understand the Microscopic Mechanism of Evaporation and Condensation", *J. of JSME*, Vol. 97, No. 907, pp. 484~486.
- (4) S. Maruyama, T. Kurashige, S. Matsumoto, Y. Yamaguchi and T. Kimura, 1998, "Liquid Droplet in Contact with a Solid Surface", *Micro. Thermophys. Eng.*, Vol. 2, No. 1, pp. 49~62.
- (5) T. Kimura and S. Maruyama, 2002, "Molecular Dynamics Simulation of Heterogeneous Nucleation of a Liquid Droplet on a Solid Surface", *Micro. Thermophys. Eng.*, Vol. 6, No. 1, pp. 3~13.
- (6) Soon-Ho Choi, 2004, "A Study on the Velocity Distribution of Gas Molecules by the Molecular Dynamics Method", *J. of KOSME*, Vol. 28, No. 3, pp. 441~450.
- (7) S. H. Choi, S. Maruyama, K. K. Kim and J. H. Lee, 2003, "Evaluation of a Phonon Mean Free Path in Solid Thin Films by the Classical Molecular Dynamics", *J. of Kor. Phys. Soc.*, Vol. 43, No. 5, pp. 747~753.
- (8) S. H. Choi, S. Maruyama, K. K. Kim and J. H. Lee, 2004, "Feasibility Study of a New Model for the Thermal Boundary Resistance at Thin Film Interface", *J. of Kor. Phys. Soc.*, Vol. 44, No. 2, pp. 317~325.
- (9) S. H. Choi and S. Maruyama, 2004, "Variations in the Thermal Conductivity of Insulating Thin Films with Temperature and Pressure", *J. of Kor. Phys. Soc.*, in press.
- (10) JSME, 1983, "JSME Databook: Thermophysical Properties of Fluids", Tokyo, pp. 63~93.
- (11) Z. Y. Guo, D. X. Xiong, C. Yang, M. Chen and Z. X. Li, 2000, "Continuous Liquid-Vapor Phase Transient in Microspace", *Int. J. of Thermal Sciences*, Vol. 39, pp. 481~489.
- (12) J. I. Lee, S. H. Park, O. Y. Kwon, Y. K. Choi and J. S. Lee, 2002, "Characterization of Thin Liquid Films Using Molecular Dynamics Simulation", *KSME Int. J.*, Vol. 16, No. 11, pp. 1477~1484.
- (13) J. G. Weng, S. H. Park, J. R. Lukes and C. L. Tien, 2000, "Molecular Dynamics Investigation of Thickness Effect on Liquid Films", *J. of Chem. Phys.*, Vol. 113, No. 14, pp. 5917~5923.