

레벨셋 기법을 이용한 전기습윤 현상의 동적 접촉각 문제에 대한 수치해석

박 준 권,^{*1} 강 관 형²

NUMERICAL ANALYSIS OF DYNAMIC CONTACT ANGLE PROBLEMS IN ELECTROWETTING WITH LEVEL SET METHOD

J.K. Park^{*1} and K.H. Kang²

We developed a numerical method to analyze the contact-line problems, incorporating a dynamic contact angle model. We used level set method to capture free surface. The method is applied to the analysis of dynamic behavior of a droplet in DC electrowetting. The result is compared with an experimental data and result of perturbation method.

Key Words : 레벨셋 기법(Level Set Method), 전기수동력학(Electrohydrodynamics), 동적 접촉각(Dynamic Contact Angle), 전기습윤(Electrowetting)

1. 서 론

미세유체역학(Microfluidics)을 이용한 랩온어칩(Lab-On-a-Chip) 구현을 위해 많은 연구들이 진행되고 있다. ‘미세유체역학’이란 마이크로 채널과 같은 매우 작은 스케일에서의 유체 및 입자의 이송이나 정지 혼합, 분리 등과 연관된 유동 현상을 연구하는 분야이다. 미세유체역학은 미소 생화학 분석 장치의 개발과 연계되어 발전되어 왔고, 이러한 장치에서는 다양한 물리 및 생화학적 현상이 동시에 고려되어야 한다. 그러므로 통상 미세유체역학은 유체의 운동량 보존을 포함하여 여러 물리 현상이 동시에 고려되어지는 일종의 다중물리(multi-physics) 현상에 대한 연구 분야로 여겨진다. 한편, 최근 들어 ‘디지털 미세유체역학(digital microfluidics)’이라고 불리는 기술에 대한 연구가 활발히 진행되고 있는데[1,2], 이는 액적 기반의 미세유체기술이 장치 크

기를 증가시키거나 복잡한 장치를 구성할 필요 없이 여러 반응을 병렬적으로 수행할 수 있기 때문이다[3]. 이러한 디지털 미세유체역학 기술에서는 액적의 형상 크기 및 속도의 정확한 제어를 통하여 필요한 액적 거동을 유도하는 것이 중요한 문제이다. 이러한 액적의 거동 제어는 통상 표면 장력 제어를 통해 이루어지며, 전기를 이용하는 전기습윤(electrowetting) 방법이 가장 대표적인 액적 제어 방법이다.

한편, 이러한 전기습윤 현상에 대한 이해의 폭을 넓히기 위해서는 실험과 더불어 국부적인 현상을 자세히 묘사할 수 있고 다양한 변수에 대한 폭넓은 해석이 가능한 이론적 연구 및 수치적 연구가 필요하다. 본 연구실에서는 최근 섭동법(perturbation method)을 이용하여 전기습윤(electrowetting) 현상학의 액적의 동적 거동을 예측할 수 있는 이론적 방법을 개발하였다[4]. 선행된 이론적 연구에서는 접촉각이 속도에 따라 달라지는 현상인 동적 접촉각(dynamic contact angle) 효과가 고려되었으나 섭동법의 한계상 액적의 형상이 반구(hemisphere)에서 크게 벗어나지 않는 조건에 대해서만 적용이 가능하다.

전기습윤 현상을 수치적으로 해석하는 것에는 상당한 어려움이 존재한다. 이것은 전기습윤 문제가 자유 계면 문제

1 포항공과대학교 대학원 기계공학과

2 포항공과대학교 기계공학과

* Corresponding author E-mail : junkeun@postech.ac.kr

해석의 어려움을 고스란히 포함하고 있고, 나아가 삼상접점에 존재하는 특이점을 해소하기 위한 동적 접촉각 모델이 적절히 수치해석에 적용되어야 하는데 이 과정 역시 쉽지 않기 때문이다. 최근 전기습윤 현상에서 액적의 동적 거동을 수치해석적으로 분석하기 위한 노력들이 보고되고는 있지만 적용된 동적 접촉각 모델들은 대부분 기초적인 단계에 머무르고 있다. Cahill 등[5]은 상용 프로그램인 COMSOL Multiphysics™[6]를 사용하여 직류 전기장 하의 전기습윤 현상의 동적 거동을 해석하였는데, COMSOL Multiphysics™의 한 계상 계면의 속도에 관계없이 고정된 접촉값으로 해석하였다. Lee[7]는 COMSOL Multiphysics™를 사용하여 정전 방식 잉크젯 헤드에 사용되는 자유 표면 유동의 정전기력 제어에 관해 해석하였으며, 이 해석에도 역시 고정된 접촉각이 사용되었다. Walker와 Shapiro[8]는 정적 접촉각의 이력현상(hysteresis)을 구현하였고, 동적 접촉각은 advancing 접촉각과 receding 접촉각을 각각 고정된 값을 사용하였다.

본 연구 그룹에서는 유동의 영향이 강하게 나타나는 매우 동적인 접촉선 문제(contact line problem)인 전기습윤 현상을 레벨셋 기법을 기반으로 하여 수치적으로 해석하기 위한 연구를 진행해 오고 있다. 본 논문에서는 현재까지 개발된 내용을 보고하고자 한다 특히 개발된 수치해석 방법을 전기습윤 현상의 액적의 동적 거동 해석에 적용하여 Oh 등[4]의 섭동법을 이용한 해석결과 및 실험결과와 비교한 결과를 보고한다.

2. 동적 접촉각 모델

삼종의 상(phase)이 한 지점에서 만나는 삼상 접촉선(triple contact line)의 경우, 정적인 상태의 접촉각 (θ_s)은 다음 식과 같이 각 계면에서의 표면장력의 균형으로 결정된다(Fig. 1).

$$\cos \theta_s = \frac{\gamma_{GS} - \gamma_{LS}}{\gamma_{LG}} \quad (1)$$

위에서 γ_{GS} , γ_{LS} , γ_{LG} 는 고체와 기체 사이의 표면장력, 액체와 고체 사이의 표면장력, 액체와 기체 사이의 표면장력을 나타낸다. 전기습윤 현상에서는 삼상 접촉선과 인접한 액체와 기체의 계면에 좁은 영역에 집중된 전기력이 가해져 겉보기 접촉각(θ_{eq})을 변화시키며, 겉보기 접촉각은 다음의 Lippmann-Young 식을 따른다[9].

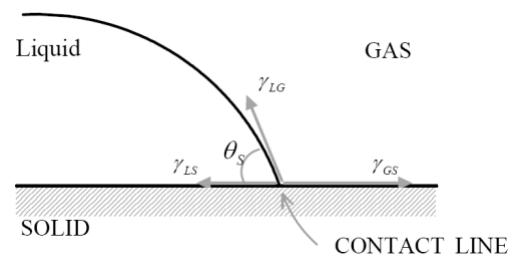


Fig. 1 Force balance at triple contact line

$$\cos \theta_{eq} = \cos \theta_s + \frac{\varepsilon_d V^2}{2d\gamma} \quad (2)$$

위에서 ε_d 와 d 는 절연막의 유전율과 두께이며, V 는 절연막 양단에 가해진 전압이다.

실험적으로 측정된 동적 접촉각은 삼상 접촉선의 이동 속도와 습윤이 일어나는 방향 등에 영향을 받는다고 알려져 있으며[10], Fig. 2 는 속도와 접촉각의 관계를 보여주고 있다. 동적 접촉각에 대한 모델링은 앞서의 논의와 더불어 추가적인 고려가 필요하다. 즉, 삼상 접촉선에는 앞서 논의된 표면장력들과 전기력 외에 추가적인 저항력이 존재하며, 이러한 저항력은 벽면 전단 응력과 삼상 접촉선 부근에서의 유동에 의해 발생하는 유체력 뿐만 아니라 문자 간의 상호 인력들이 복잡하게 관련되어 있다. Chung[11]은 삼상 접촉선에 작용하는 단위 길이당 저항력을 삼상 접촉선의 이동 속도 (V_{TCL})에 비례하는 것으로 표현하였다. 저항 상수 (η)는 삼상 접촉선의 이동과 관련된 유체의 접성이나 문자간의 흡탈착 등에 의해 결정되는 값으로 실험적으로 구해진다. 이러한 저항 상수를 이용하여 동적 접촉각 (θ_d)은 다음 식과 같이 표현된다.

$$\cos \theta_d = \cos \theta_s + \frac{\varepsilon_d V^2}{2d\gamma} - \frac{\eta}{\gamma} V_{TCL} \quad (3)$$

또한 정적인 상태에서 접촉각이 측정 이전의 상태에 영향을 받게 되는 접촉각 이력이 발생하며, 접촉각 모델에 동적 접촉각 외에 이러한 접촉각 이력의 효과가 추가적으로 고려되어야 한다. 본 연구에서는 우선 식 (3)의 동적 접촉각 모델을 사용하였다.

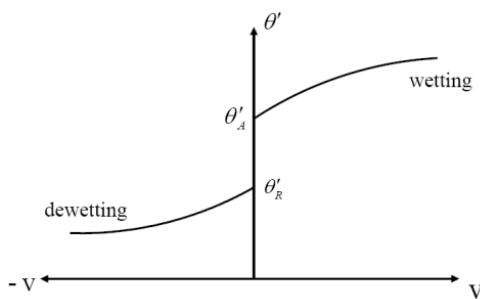


Fig. 2 Dependence of dynamic contact angle on velocity

3. 수치해석 방법

레벨셋 기법은 무차원 레벨셋 함수(ϕ)의 등고선을 추적하여 유체의 계면을 모사하는 방법이다. 본 연구에서는 Olsson 등[12]의 conservative level set method를 사용하여 레벨셋 함수를 이송(advection)하고 (식 (4)) 초기화(re-initialization)하였다 (식 (5)).

$$\phi_t + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = 0 \quad (4)$$

$$\phi_t + \nabla \cdot \left(\phi(1-\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} - \varepsilon \nabla \phi \right) = 0 \quad (5)$$

위에서 ε 은 초기화 관련 변수이며, 계면 두께의 절반에 해당한다. 유체 유동을 풀기 위하여 공개된 프로그램(open source)인 OpenFOAM[13]을 사용하였으며, OpenFOAM에 레벨셋 및 동적 접촉각 모델을 추가하였다.

고체 벽면과 접하는 유체에 일반적인 유체유동의 경계조건인 접착(no-slip) 조건을 적용하면 고체 벽면과 접하는 계면이 움직이지 않는다. 따라서 Fig. 3과 같이 미끄럼(slip) 조건을 적용하여 고체 벽면과 접하는 계면이 움직일 수 있도록 하였다[5-6].

좌표는 2차원 축대칭 좌표를 도입하였으며, 계산 영역은 가로, 세로 길이가 각각 4 mm이며, 80×80의 등간격 격자로 이산화되었다. 5 μL의 액적을 정적 접촉각 116°로 초기화한 후 (Fig. 4(a)), 액적과 전극 사이에 전압 120V를 인가하고서 평형상태에 도달할 때 (Fig. 4(b))까지 30 ms 동안의 액적의 동적 거동을 해석하였다.

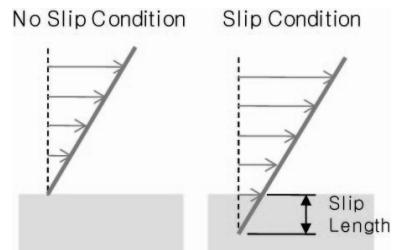


Fig. 3 Comparison of the no-slip boundary condition and the slip boundary condition

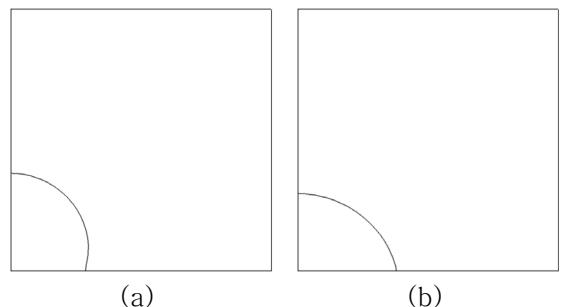


Fig. 4 Numerical simulation of DC electrowetting: (a) initial shape; (b) final shape

4. 결 과

액적이 바닥면과 접하는 영역의 반지름(R_b)을 식 (6)과 같이 R^* 로 무차원화하고, R^* 의 시간에 따른 변화를 Fig. 5에 도시하였다.

$$R^* = \frac{R_b - R_{b,i}}{R_{b,f} - R_{b,i}} \quad (6)$$

위에서 $R_{b,i}$ 와 $R_{b,f}$ 는 각각 R_b 의 초기값과 최종값에 해당한다. 본 연구의 수치해석을 통한 결과를 Oh 등[4]의 섭동법을 통한 결과 및 실험결과와 비교하였다 (Fig. 5). 수치해석 결과는 섭동법의 결과에 비해 감쇠(damping) 효과가 다소 크게 나타났다. 이 원인과 관련하여 현재 보다 정밀한 원인 파악을 수행하고 있다. 다만, 선행 이론 연구[4]에서의 섭동법과 달리 본 수치해석에서는 벽면의 전단응력 효과가 일부 고려되었기 때문에 일 수도 있을 것으로 추측된다. 수치해석 결과와 섭동법의 결과 모두 전압 인가 후 30 ms까지 전동이 지속되

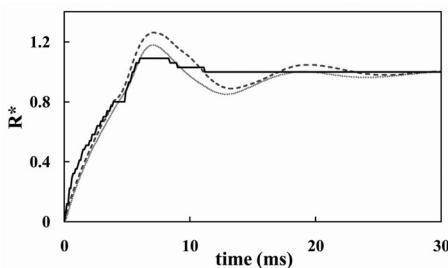


Fig. 5 Comparison of the base radius of drop between numerical method, perturbation method, and experiment. Red-dotted line, blue-dashed line, and black-solid line correspond to the results of numerical method, perturbation method, and experiment, respectively

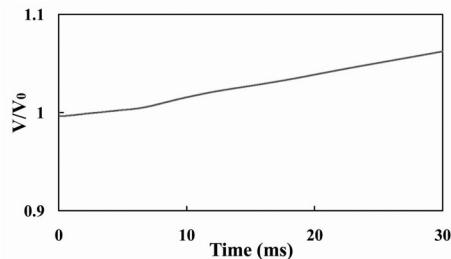


Fig. 6 Change of drop volume during the calculation

는데 반해, 실험은 약 10 ms 후에 계면의 움직임이 멈춘다. 추후에 동적 접촉각 모델에 정적 접촉각의 이력현상의 효과를 추가하면 실험결과와 보다 유사한 결과를 얻을 수 있을 것으로 판단된다. 액적의 부피는 계산과정 동안 6.6% 증가하였다 (Fig. 6). 이는 벽면과 계면이 접하는 곳에서 레벨셋 함수를 초기화하는 과정에서 생긴 문제인 것으로 추정되며 현재 수정 중이다.

5. 결 론

삼상 접촉선의 마찰력이 고려된 동적 접촉각 모델을 적용한 수치해석 프로그램을 개발하였다. 자유계면을 추적하기 위하여 레벨셋 기법을 사용하였으며, 직류 전기장 하에서의 전기습윤 현상의 동적 거동을 해석하였다. 상기 수치해석 결과를 섭동법을 이용한 기존 연구결과 및 실험결과와 비교하였다. 수치해석 결과는 섭동법의 결과에 비해 액적 진동의 감쇠 효과가 다소 크게 나타나며, 실험결과에 비해서는 액적의 진동이 보다 긴 시간 동안 지속된다.

후 기

본 연구는 교육과학기술부/한국과학재단의 지원으로 수행되었다 (R0A-2007-000-20098-0, R01-2006-000-10657-0, and ROA-2008-000-20045-0).

참고문헌

- [1] 2000, Pollack, M.G. et al., "Electrowetting-based Actuation of Liquid Droplets for Microfluidic Applications," *Appl. Phys. Lett.*, Vol.77, p.1725.
- [2] 2003, Cho, S.K. et al., "Creating, Transporting, Cutting, and Merging Liquid Droplets by Electrowetting-based Actuation for Digital Microfluidic Circuits," *J. Microelectromech. Syst.*, Vol.12, p.70.
- [3] 2006, Moon, H. et al., "An Integrated Digital Microfluidic Chip for Multiplexed Proteomic Sample Preparation and Analysis by MALDI-MS," *LabChip*, Vol.6, p.1213.
- [4] 2009, Oh, J.M. et al., "Analysis of Electrowetting-Driven Spreading of a Drop in Air," (Submitted).
- [5] 2008, Cahill, B.P. et al., "A Dynamic Electrowetting Simulation Using the Level-set Method," *Proc. of the COMSOL Conference*.
- [6] COMSOL Multiphysics, www.comsol.com.
- [7] 2007, Lee, Y.-S., "Numerical Simulation of Electrostatically-driven Free Surface Flows," *KSME*, p.1856.
- [8] 2006, Walker, S.W. and Shapiro, B., "Modeling the Fluid Dynamics of Electrowetting on Dielectric (EWOD)," *J. Microelectromech. Syst.*, Vol.15, p.986.
- [9] 2002, Kang, K.H., "How Electrostatic Fields Change Contact Angle in Electrowetting," *Langmuir*, Vol.18, p.10318.
- [10] 2006, Blake, T.D., "The Physics of Moving Wetting Lines," *J. Colloid Interface Sci.*, Vol.299, p.1.
- [11] 2006, Chung, W.Y., "Dynamics of Electrowetting of a Liquid-liquid Interface in a Cylindrical Tube," *POSTECH, M.S. thesis*.
- [12] 2007, Olsson, E. et al., "A Conservative Level Set Method for Two Phase Flow II," *J. Comput. Phys.*, Vol.225, p.785.
- [13] OpenFOAM, www.openfoam.co.uk.