

LBM 을 이용한 접촉각 변화에 따른 Sliding angle 변화 경향성 분석

김기덕, 변기상, 최세용, 장준경*

MMCS, 부산대학교, 부산광역시 금정구 장전동 부산대학교 과학기술연구동 207호, 609-735

E-mail: kimkiduk91@gmail.com, jkjang@pusan.ac.kr

초록 이번 연구에서는 초발수 재료의 주요 특징 중 하나인 Sliding Angle에 관한 연구이다. 초발수 특성을 지닐수록 낮은 Sliding Angle을 가지고 있다. 하지만 특정 소재에 관해서만 Sliding Angle이 연구가 되어 있고, 접촉각의 변화에 따른 Sliding Angle의 경향성에 관한 연구는 거의 없다. 따라서 이번 실험에서는 접촉각 변화와 기판의 기울기에 따른 액체의 미끄러짐에 대한 특성들을 조사하였다. 그 결과 낮은 접촉각에서도 약간의 미끄러짐이 있음을 관찰할 수 있었다.

서론

연잎 등의 자연 생태계에서 영감을 얻은 초발수 특성은 현대에 와서도 꾸준히 이루어지고 있는 작업이다. 초발수 특성은 구조에 의한 발수 특성 혹은 평평한 평면 재료에서의 표면에 너지에 의해 결정된다는 것이 밝혀졌다.¹⁻¹¹ 일반적으로 초발수 표면은 물방울과 표면이 접촉하여 이루는 각이 150°보다 크며, 표면을 5° 정도 기울이면 물방울이 움직이기 시작한다.^{1, 2, 4-6, 12} 이를 통해 봤을 때, 접촉각(CA)과 Sliding angle(SA)이 초발수성을 설명하는 대표적인 지표이다. 하지만 많은 실험에서 CA와 SA의 관계성을 나타내는 식을 도출해내지 못했다. 따라서 이번 실험에서는 CA에 따른 SA변화 경향성에 집중하여 실험을 해보았다.

이번 실험에서 수행한 전산 모사 방법은 격자 볼츠만 방법(Lattice Boltzmann Modeling, LBM)이다. 이 방법은 유체를 모사하는 분야에 대해서 뛰어난 성능을 보이는 모형화 방법 중 하나이다. 정적 흐름, 상 분리, 증발, 응축, 공동화, 용해 및 열 전달, 부력, 그리고 표면과의 상호작용까지 다양한 유체들의 행동을 모형화

하여 연산할 수 있고, 이 방법을 기반으로 하는 많은 연구가 수행되어 왔다. 고전적 관점으로, 유체를 구성하고 있는 입자의 위치와 운동을 시간에 대해 기술하는 분포 함수를 격자화하여 연산을 수행함으로써, 시간의 흐름에 따른 유체의 움직임을 계산 및 관찰할 수 있다는 것에 장점이 있다.¹³ 이 방법을 이용하여 CA와 기판의 기울기(TD)의 변화에 따른 SA의 변화와 그에 따른 유체들의 특성을 분석해 보고자 한다.

이론 및 계산방법¹³

격자 볼츠만 방법에서는 격자 볼츠만 방정식을 사용한다. 우선 2차원 상에서, 유체 입자의 움직임을 격자화 하여 입자가 움직일 수 있는 모든 방향을 9개로 모델링 한다. 그 다음 각 방향마다 움직일 수 있는 확률 및 그에 따른 속도를 설정하여 기초 연산을 실행한다. 그 다음 각 방향으로 진행되었을 때 발생하는 충돌 및 흐름 방정식을 이용하여 입자의 총체적인 운동을 계산하고, 모델에 맞는 입자 연산식을 적용하여 입자의 속도나 밀도 등을 계산한

다.

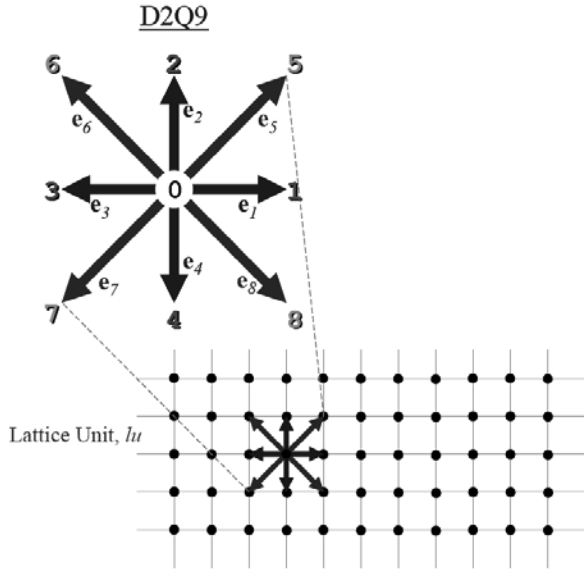


Figure 1. 격자 볼츠만 방법에서의 격자화 방법 및 D2Q9 벡터 설정방법.

이번 실험에서 사용한 연산식은 단일 완화 시간이 포함되어 있는 Bhatnagar-Gross-Krook(BGK) 충돌 연산식을 사용 하였으며 식 (1)과 같다.

$$f_a(\vec{x} + \vec{e}_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(\vec{x}, t) = -\frac{[f_a(\vec{x}, t) - f_a^{eq}(\vec{x}, t)]}{\tau} \quad (1)$$

식 (1)에서 좌항은 모형화 한 유체의 입자가 충돌없이 한 격자에서 다른 격자로 이동하는 형태를 표현하였고, 우항은 입자와 다른 입자가 충돌을 하는 현상을 식으로 표현한 것이다. 여기서 f_a 는 단일 입자가 (\vec{x}, t) 에서 e_a 방향으로의 분포 함수이며, $f_a^{eq}(\vec{x}, t)$ 는 평형분포함수를 나타낸다. D2Q9 시스템에서의 평형분포함수는 밀도 함수와 속도에 의해서만 결정된다.

$$f_a^{eq} = w_a \rho \left[1 + 3 \frac{(\vec{e}_a \cdot \vec{u})}{c^2} + \frac{9(\vec{e}_a \cdot \vec{u})^2}{2c^4} + \frac{3(\vec{u} \cdot \vec{u})}{2c^2} \right] \quad (2)$$

여기서 w_a 값은 $a=0$ 일 때 (정지 입자) $4/9$, $a=1,2,3,4$ 일 때 $1/9$, $a=5,6,7,8$ 일 때 $1/36$ 의 값을 가진다. 그리고 c 는 기본 격자 속도 이다. (단위: lattice unit per time step)

또한 입자들 간에 작용하는 힘 그리고 기판과 작용하는 힘을 계산하기 위하여 아래의 수식을 이용한다.

$$\vec{F}(\vec{x}, t) = -G\psi(\vec{x}, t) \sum_{a=1}^8 w_a \psi(\vec{x} + \vec{e}_a \Delta t, t) \vec{e}_a \quad (3)$$

$$\psi(\rho) = \psi_0 \exp(-\rho_0/\rho) \quad (4)$$

$$\vec{F}_{ads}(\vec{x}, t) = -G_{ads}\psi(\vec{x}, t) \sum_{a=1}^8 w_a s(\vec{x} + \vec{e}_a \Delta t, t) \vec{e}_a \quad (5)$$

식 (3)는 입자간 작용하는 힘을 계산하기 위한 식이고, 여기에서 G 는 분자간 인력을 나타내는 상수이며, 이 값이 양수이면 반발력을, 음수이면 인력을 나타낸다. 이 실험에서는 $G = -120$ 으로 설정하였다. 또한 ψ 함수(식(4))는 입자의 포텐셜 에너지를 표현하는 함수이다. 이 식에서 $\psi_0 = 4, \rho_0 = 200$ 의 값으로 설정하였다. 이를 이용하여 분자간 인력과 함께 서로 상호작용 하는 힘과 에너지 교환 등을 표현함으로써 정확한 움직임을 계산할 수 있다. 식 (5)는 식 (3)와는 다르게 구조물과 유체 입자가 상호작용 하는 힘을 나타낸다. 여기서 s 함수는 스위치 함수이다. 격자가 고체라면 1의 값을 주어 고체와 유체 간의 상호작용 힘을 계산하고, 유체라면 0의 값을 주어 계산을 하지 않는 방식이다. 이 식에서 G_{ads} 의 값의 변화에 따라 액체의 CA를 변화시킬 수 있다.

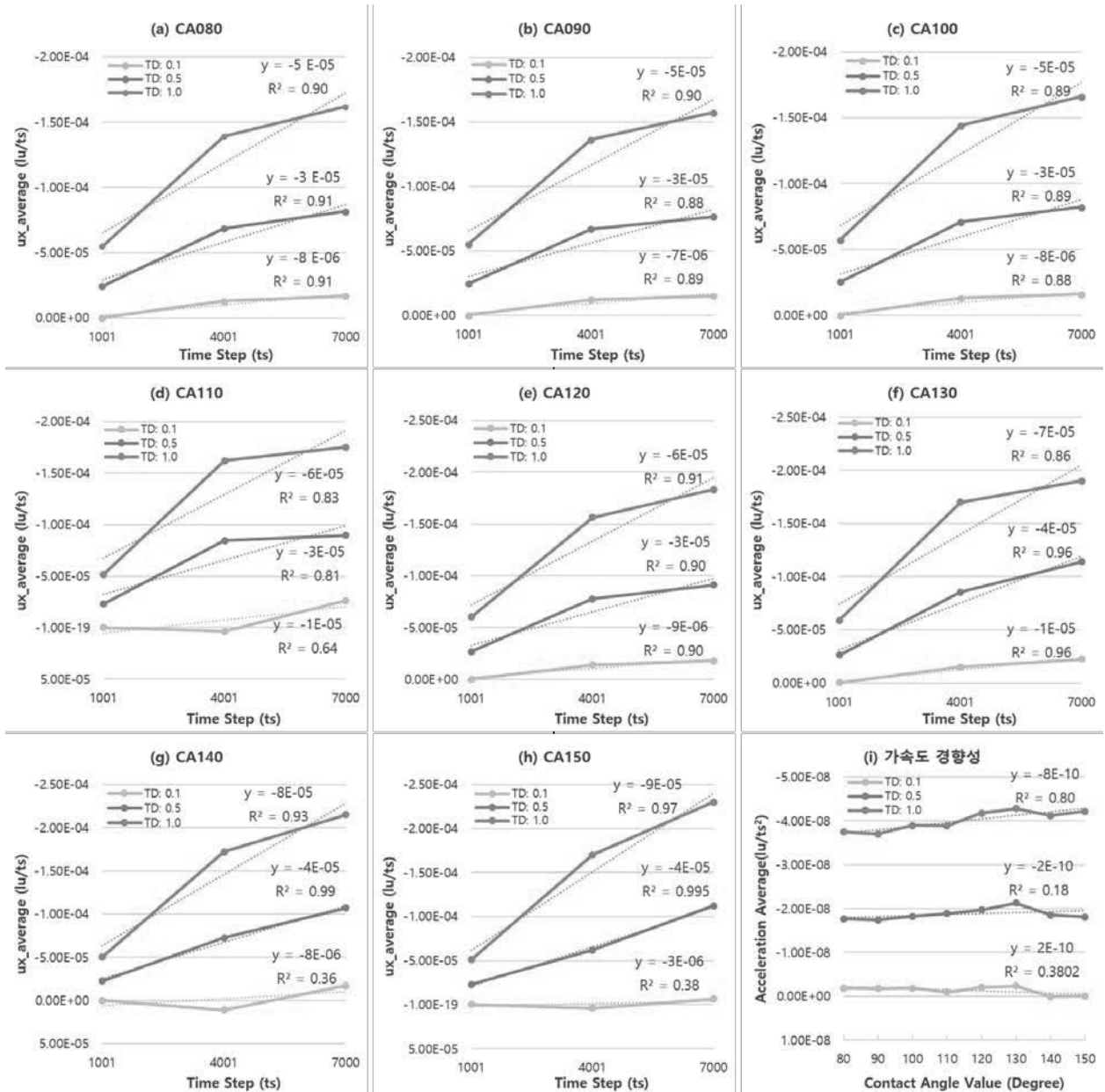


Figure 2. CA와 TD의 변화에 따른 액체의 속도 변화 추이 그래프 [(a)~(h)] 및 CA와 TD의 변화에 따른 평균 가속도 추이 그래프 (i).

이번 실험에서는 CA와 TD에 따른 SA의 변화 및 가속도를 관측하기 위하여 중력 상수 g 를 설정하고 빗면에서 물체에 작용하는 힘을 설정하였다. LBM시스템의 크기는 $50 \times 50 \text{ lu}^2$ 로 설정하였고, 초기 액체의 크기는 $12 \times 12 \text{ lu}^2$ 로 설정하였다. 또한 액체에 작용하는 외부 힘은 1000ts 이후에 적용하도록 프로그램을 구성하였다. 그 이유는 액체에 작용하는 힘이 중력 밖에 없는 상황에서 준 평형상태에 도달한 다

음 외부 힘을 작용시켜 액체의 안정성을 확보하기 위해서이다. 이후 G_{ads} 와 TD를 변화시키면서 7000ts 동안 계산을 하여 SA와 액체의 거동을 관찰하였다.

결과 및 논의

앞에서 소개한 방법대로 계산을 수행하여 액체의 밀도, 속도, 가속도를 계산한 데이터가 Figure 2에 정리되어 있다. CA가 증가할수록

그리고 TD가 증가할수록 가속도가 올라가는 것을 관찰할 수 있었다. 여기서 음수의 값을 지니는 이유는 데이터를 계산할 때에 음의 방향으로 힘을 주어 2차원 평면 상에서 왼쪽으로 액체가 왼쪽으로 움직이는 것을 의미한다.

일반적으로 친수성 특성을 강하게 가지고 있을 때에는(CA90 이하) Sliding angle이 높을 것이라는 상식과 다르게 이번 계산 결과에서는 0.1도라는 낮은 기울기에서도 CA90도 이하의 액체가 미끄러짐을 관찰할 수 있다. 가속도 추이선을 살펴보았을 때에는 $0.8 \times 10^{-6} (\text{lu}/\text{ts}^2)$ 의 가속도 값을 가진다(Fig 2. (a)). 속도의 변화량으로 본 가속도 추이선은 정확성이 대체로 $R^2=0.90$ 의 값을 가지고 있는 것을 볼 수 있다.

주의 깊게 살펴볼 부분은 CA가 110, 140, 150도에서 4001ts에 보여주는 역수의 속도 값을 보여주는 부분이다(Fig 2. (d), (g), (h)) 계산 시간이 지나면 다시 음의 값으로 돌아 오는 것으로 보아 준 평형상태를 1000ts로 가정하고 계산을 하였다. 4001 ts이후에서는 다른 CA와 유사한 경향성을 보이는 것으로 보아 평형 상태로 움직이려는 경향성이 외부 힘 작용 보다 더 크게 작용하여 역수의 속도 값을 지니는 것으로 보인다.

Figure 2. (i)의 그래프는 가속도를 속도의 변화 추이로 계산한 것이 아닌 액체의 평균속도를 가지고 직접 가속도를 계산하였을 때의 CA의 변화에 따른 경향성을 나타낸 그래프이다. 일반적으로 생각해 본다면 같은 기울기에서 CA가 증가할수록 액체의 가속도 또한 표면에 에너지에 의해 증가해야 할 것으로 예측을 하였다. 그러나 낮은 기울기인 0.1도와 0.5도에서 CA의 증가에 따른 가속도의 증가 경향성은 매우 불안정하다(TD=0.1일때 $R^2=0.38$, TD=0.5일때 $R^2=0.18$). 이는 낮은 각도에서 작용하는 외부 힘의 계산이 상당히 낮은 단위에서 계산이 이루어졌기 때문에 정확한 계산이 되지 않았을 것이라고 추측하였다. 그 이유는 중력 상수의

설정에 있어서 실제 중력을 격자 단위로 변환시키는 작업을 통해 얻은 결과가 불합리 하여 실제 중력을 변환시킨 것이 아니라 시스템 내부에서의 만유인력을 계산하여 적용하였기 때문이다. 이 때문에 중력 상수는 매우 작은 값을 가지게 되었고(5.03×10^{-6}) 이로 인하여 계산상의 부정확성이 나타난 것이라 추측한다. 그리고 TD=1.0에서 가속도의 경향성이 $R^2=0.80$ 의 정확성으로 추측되는 것을 보았을 경우 그 이상의 TD에서도 가속도의 추세가 비교적 정확할 것이라고 생각할 수 있다.

결론

기존에 연구되었던 논문의 특정한 초발수 특성을 나타내는 물질들에 대한 연구였다면, 본 연구는 다른 특성들을 배제하고 오로지 액체와 기판 간의 표면 에너지 관계만을 통하여 SA의 특성을 보고자 하였다. 친수성 특성을 가지는 액체는 낮은 각도에서는 잘 미끄러지지 않을 것이라는 예상을 하였으나, TD=0.1에서도 액체가 미끄러지는 것을 관찰하였다. 또한 낮은 CA와 TD에서 기존에 알고 있던 SA의 경향성 대로 나오지 않는 것을 확인하였다. 이는 LBM 방식이 실제 단위를 환산하여 입력하는 것이 아니라, 이 방법의 특성상 설정되는 변수들의 설정이 비율로서 설정되기 때문이라고 판단하였다. 그럼에도 높은 CA에서와 TD=1.0에서는 예측했던 결과의 경향성을 관찰하였다. 따라서 상수들의 상관관계를 재정립한다면 낮은 TD에서도 유의미한 데이터를 얻을 수 있을 것이다.

감사의 글

본 논문은 2016년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단 첨단 사이언스·교육 허브 개발 사업의 지원을 받아 수행된 연구임(NRF-2011-0020576).

참고문헌

- (1) Choi, S.; Suh, K. Y.; Lee, H. H. A Geometry Controllable Approach for the Fabrication of Biomimetic Hierarchical Structure and its Superhydrophobicity with Near-Zero Sliding Angle. *Nanotechnology* **2008**, *19*, 275305.
- (2) Kim, D.; Hwang, W.; Park, H.; Lee, K. Superhydrophobic Nanostructures Based on Porous Alumina. *Current applied physics* **2008**, *8*, 770-773.
- (3) Ma, M.; Hill, R. M. Superhydrophobic Surfaces. *Current opinion in colloid & interface science* **2006**, *11*, 193-202.
- (4) Suzuki, S.; Nakajima, A.; Kameshima, Y.; Okada, K. Elongation and Contraction of Water Droplet during Sliding on the Silicon Surface Treated by Fluoroalkylsilane. *Surf. Sci.* **2004**, *557*, L163-L168.
- (5) Wang, Y.; Wang, W.; Zhong, L.; Wang, J.; Jiang, Q.; Guo, X. Super-Hydrophobic Surface on Pure Magnesium Substrate by Wet Chemical Method. *Appl. Surf. Sci.* **2010**, *256*, 3837-3840.
- (6) Kako, T.; Nakajima, A.; Irie, H.; Kato, Z.; Uematsu, K.; Watanabe, T.; Hashimoto, K. Adhesion and Sliding of Wet Snow on a Super-Hydrophobic Surface with Hydrophilic Channels. *J. Mater. Sci.* **2004**, *39*, 547-555.
- (7) Miwa, M.; Nakajima, A.; Fujishima, A.; Hashimoto, K.; Watanabe, T. Effects of the Surface Roughness on Sliding Angles of Water Droplets on Superhydrophobic Surfaces. *Langmuir* **2000**, *16*, 5754-5760.
- (8) Bhushan, B.; Nosonovsky, M.; Jung, Y. C. Towards Optimization of Patterned Superhydrophobic Surfaces. *J. R. Soc. Interface* **2007**, *4*, 643-648.
- (9) Feng, L.; Li, S.; Li, Y.; Li, H.; Zhang, L.; Zhai, J.; Song, Y.; Liu, B.; Jiang, L.; Zhu, D. Superhydrophobic Surfaces: From Natural to Artificial. *Adv Mater* **2002**, *14*, 1857-1860.
- (10) McHale, G.; Shirtcliffe, N.; Newton, M. Contact-Angle Hysteresis on Super-Hydrophobic Surfaces. *Langmuir* **2004**, *20*, 10146-10149.
- (11) Yoshimitsu, Z.; Nakajima, A.; Watanabe, T.; Hashimoto, K. Effects of Surface Structure on the Hydrophobicity and Sliding Behavior of Water Droplets. *Langmuir* **2002**, *18*, 5818-5822.
- (12) Lai, Y.; Tang, Y.; Gong, J.; Gong, D.; Chi, L.; Lin, C.; Chen, Z. Transparent Superhydrophobic/Superhydrophilic TiO₂-Based Coatings for Self-Cleaning and Anti-Fogging. *Journal of Materials Chemistry* **2012**, *22*, 7420-7426.
- (13) Thorne, D. T.; Michael, C. Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers. *2nd.ed.* **2006**.