

〈논 문〉

## 초박막에서의 비정상 열전달

배 철 호\* · 정 모\*

(1995년 5월 20일 접수)

### Transient Heat Transfer in Thin Films

C.H. Bai and M. Chung

**Key Words :** Hyperbolic Heat Conduction(쌍곡선형 열전도), Equation of Phonon Radiative Transport(포논 복사 전달식), Jump Boundary Conditions(도약 경계조건)

#### Abstract

For the analysis of phonon heat transfer within short time and spatial scales, conventional macroscopic heat conduction equations with jump boundary conditions are tried and the results are compared to those of equation of phonon radiative transport (EPRT), which is one of microscopic transport equation. In transient state the macroscopic temperatures show far different behavior from EPRT. In steady state the hyperbolic temperatures with temperature jump at the wall from time relaxation model agrees well with EPRT temperatures. Since EPRT is also an approximate form of microscopic transport equation and there are no experimental results to verify the proposed model in this study, we can not conclude whether the approaching method from this study is valid or not. To the authors' knowledge, there are no experimental results available which can be used to test the validity of these models. Such an experiment, while difficult to conduct, would be invaluable.

#### 기 호 설 명

$D(\omega)$  : 상태밀도 (단위 주파수 당 원자 진동수)  
[ $m^{-3}s$ ]

$f$  : 통계학적분포함수

$I$  : 포논 (phonon) 강도 [ $J/m^2$ ]

$k$  : 열전도계수 [ $W/mK$ ]

$k_B$  : Boltzmann 상수 [ $JK^{-1}$ ]

$L^*$  : 두께 [m]

$L$  : 무차원 두께 =  $vL^*/6\alpha$

$Q$  : 무차원 열유속 =  $aq/vk(T_w - T_0)$

$q$  : 차원 열유속 [ $W/m^2$ ]

$R$  : 격자 불완전 반경

$r_i$  : 가중치 (식 (9))

$T$  : 온도 [K]

$t^*$  : 시간 [s]

$t$  : 무차원 시간 =  $v^2t^*/6\alpha$

$v$  : 속도 [m/s]

$X$  : 식 (18)의 크기 변수

$x^*$  : 거리 [m]

$x$  : 무차원 거리 =  $vx^*/6\alpha$

#### 그리스문자

$\Gamma$  : 상수 (식 (20))

$\Lambda$  : 포논파동길이 (wave length)

$\alpha$  : 열확산 계수 또는 상수 (식 (16))

$\gamma$  : 상수 (식 (19))

$\eta$  : 단위 체적 당의 산란 위치 개수

$\varphi$  : 산란 단면

\*회원, 영남대학교 기계공학과

$\mu$	: cosine 값
$\theta$	: 무차원 온도 $= (T - T_0) / (T_w - T_0)$ 또는 식 (6)의 방위각
$\theta_b$	: Debye 온도
$\sigma_{SB}$	: Stefan-Boltzmann 상수 $[W/m^2K^4]$
$\tau$	: 열 완화 시간 $= a/v^2$
$\omega$	: 주파수
$\omega_D$	: 절단 주파수 $= \theta_D k_B / \hbar$
$\hbar$	: Plank 상수 $/ 2\pi$

### 참자

o	: 초기 또는 평형 상태
w	: 경계
iw	: 가상의 경계

## 1. 서론

열전달에 대한 Fourier의 법칙은 무한히 빠른 열전달 속도를 가정하고 있는데, 일반적으로 실제 현상을 잘 기술하고 있다. 그러나 극저온 상황에서 아주 얇은 영역이나 극히 짧은 시간에서의 온도 변화를 고려할 경우 무한히 빠른 열전달 속도에 대한 가정은 부정확하게 된다. 유한한 열전달 속도를 고려하기 위하여 Fourier 법칙 대신에 다음의 Cattaneo<sup>(1)</sup> 식을 사용한다.

$$q = - \left( k \nabla T + \tau \frac{\partial q}{\partial t^*} \right) \quad (1)$$

여기서  $\tau$ 는 열 완화 시간(thermal relaxation time)으로서 열전달 속도  $v$ 와  $\tau = a/v^2$ 의 관계로 주어진다. Cattaneo의 법칙과 열역학 제1법칙을 합하면 기존의 쌍곡선형 열전도식(conventional hyperbolic heat conduction equation, CHE)이 된다. CHE의 가장 대표적인 특성의 하나는 온도가 파동 형태를 나타내는 것이다. Bai<sup>(2)</sup> 등은 초기에 일정한 온도로 유지되는 얇은 판에서 갑자기 양쪽 경계의 온도를 낮추었을 때의 온도 변화를 고찰하였다. 만약 판의 두께가 열전달 매체의 평균 자유 행정(mean free path)과 비슷한 경우에는 양쪽 경계에서 전파된 파동(wave)이 판의 중간 지점에서 만나 중첩되면서 판 내부의 온도가 경계에서의 온도보다 낮아지게 된다. 경계에서의 온도가 절대온도 0에 가까운 경우, CHE를 사용하여 구한 판 내부의 온도가 절대온도 0 이하로 내려가게 된다. 유한한 열

전달 속도를 고려하기 위하여 Cattaneo 식을 사용할 때, Coleman 등<sup>(3)</sup>은 열전도 식이 열역학 제2법칙을 만족하기 위하여 내부에너지에 비평형(non-equilibrium)항을 포함해야 함을 증명하였다. 비평형 항을 가지는 내부에너지를 사용하면 온도 및 열전달을 해석할 수 있는 수정된 시스템 식을 유도할 수 있는데, Bai<sup>(2)</sup> 등은 새로운 시스템 식을 MHE(modified hyperbolic heat conduction equation)로 명명하였다. Bai<sup>(2)</sup> 등은 아주 간단한 기하학적 형상의 문제에 대하여 CHE의 해석 해(analytical solution)와 MHE의 수치 해석 해를 구하였다. 판의 두께가 열전달 매체의 평균 자유 행정보다 큰 경우에는 CHE 및 MHE의 결과가 서로 잘 일치하였으나 판의 두께가 평균 자유 행정과 비슷하거나 작은 경우에는 큰 온도 차이를 보였다. 그리고 CHE와 MHE에 의하여 판 내부의 온도를 계산했을 때 내부의 온도가 경계에서의 온도보다 낮게되는 음의 과이동(undershoot)이 아주 얇은 판에서 일어났으며, 특히 이러한 현상은 열 파동(thermal wave)이 한쪽 경계로부터 다른 쪽 경계까지 이동하는데 걸리는 시간이 열 완화 시간(thermal relaxation time)과 비슷하거나 짧을 때 발생한다. 그러므로 전기적 부도체(dielectric material)에서 위와 같은 현상이 일어날 수 있는 판의 두께는 열전달 매체체인 포논(phonon)의 평균 자유 행정과 비슷하거나 작아야 하며, 분자 운동 모델(kinetic model)로부터 포논의 평균 자유 행정은  $3a/v$ 로 주어진다. 그러나 이렇게 얇은 판에서는 Cattaneo 법칙의 근간이 되는 연속체 가정이 유효하지 않을 수 있다. 이러한 경우에는 복사 열전달에서 사용하는 방법과 유사하게 도약 경계 조건(jump boundary conditions)을 사용함으로써 연속체 모델을 사용할 수도 있는데, 이것은 경계면에서는 분자 운동(kinetic) 경계 조건을 적용하고 내부에서는 거시적인(macroscopic) 모델을 사용하는 것이다. 기술한 접근 방법의 기본 개념은, 경계 부근에서는 실제의 미시적인(microscopic) 양상이 공간에 대하여 관련된 변수가 급격하게 변하면서 나타나고 내부에서는 좀더 완만한 변화를 보인다는 것이다. 내부의 완만한 변화는 거시적인 식을 이용하더라도 내부의 변화를 적절히 나타낼 수 있으나 고려하는 영역이 극히 작은 경우에는 경계에서 변수의 급격한 변화가 중요하게 된다. 그러므로 적절한 경계 조건의 선택에 의하여 거시적인

식을 아주 좁은 영역에까지 확대하여 사용할 수도 있게 된다. 도약 경계 조건을 사용함으로써 연속체의 거시적인 열전도 식을 평균 자유 행정과 유사한 두께의 영역에 적용하려는 최초의 시도가 Lavine과 Bai<sup>(4)</sup>에 의하여 이루어졌다. 도약 경계 조건을 사용하면 CHE와 MHE의 온도 분포 결과가 도약 경계 조건을 사용하지 않은 경우에 비해 더욱 잘 일치하게 되며 온도의 양/음의 과이동(over/under-shoot) 현상이 사라지게 된다. 그러나 도약 경계 조건의 적용과는 상관없이 쌍곡선형 식의 온도는 포물선형 열전달 식의 온도와 여전히 큰 차이를 보이고 있다.

전기적 부도체에서 전도 열전달은 포논(phonon 또는 lattice vibration)에 의해 일어나는데, 포논의 거동을 나타내는 Boltzmann 식은 비선형 충돌항(non-linear collision term)을 가지고 있으며, 이 항으로 인하여 내부의 거시적인 식과 경계 부근에서의 미시적인 식을 연결하는 점근적으로 일치된(asymptotically consistent) 경계 조건을 유도하기가 어렵게 된다. 그러나 비교적 간단한 형태로 선형화 된 Boltzmann 식의 경우에도 실제로 해를 구하는 것은 쉬운 일이 아니다. Boltzmann 식의 근사식 중 하나인 시간 완화 모델(time relaxation model)은 비선형 충돌 항의 적분 항에 대하여 하나의 완화 시간으로써 서로 다른 완화 시간의 스펙트럼을 대치한 식이다. 이것은 포논이 충돌할 때 평균 자유 행정을 고려하는 일반적인 방법 대신에 충돌 시간 간격을 고려하는 방법이다. 포톤(photon)과 포논이 wave pocket으로 고려될 수 있다는 유사성으로부터 Majumdar<sup>(5)</sup>는 포논의 Boltzmann 식에 대한 시간 완화 모델을 이용하여 EPRT(equation of phonon radiative transport)를 유도하였다.

두께가 열전달 매체의 평균 자유 행정과 유사한 경우, 즉 기존의 거시적 열전달 식의 기본 가정인 연속체 가정이 의심되는 영역에서는 포논의 행동 양식을 고려한 미시적인 식을 사용하여 열전달 문제를 해결해야 하지만, 선형화된 미시적인 식조차 해를 구하기가 쉽지 않다. 이러한 영역에서 비교적 쉽게 공학적인 해를 구하기 위한 방법으로서 본 논문에서는 복사 열전달의 확산 근사 이론과 유사하게 경계에서 도약 경계조건을 적용하고 내부에서는 기존의 거시적인 열전달 식을 사용하여 열전달 문제 해석을 시도한다. 적용 가능한 도약 경계조건으

로서 Lavine과 Bai<sup>(4)</sup>에 의하여 제안된 도약 경계 조건을 간략하게 살펴보고 간단한 모델 문제에 적용한다. 주어진 모델에 대하여 도약 경계조건을 포물선형(parabolic) 및 쌍곡선형 열전도식에 적용하여 해를 구하고 그 결과를 선형으로 근사된 미시적 열전달 식의 하나인 EPRT<sup>(6)</sup>의 결과와 비교함으로써 도약 경계조건의 적용 가능성을 검토한다.

## 2. 모델 문제 및 해석

포논에 의한 열전달 기구가 지배적인 간단한 일차원 형상의 문제를 고찰하기로 한다. 고체 상태 장치(solid state device)에 사용되는 얇은 다이아몬드 박판(type IIa, <sup>13</sup>C 농도 0.07%)을 열전달 해석 적용 모델로 한다. 고려하는 다이아몬드의 물성치는 Table 1에 나타나 있다. 초기에 얇은 판은 일정한 온도  $T_0$ 로 유지되고 있다가 어느 순간  $t^* = 0$ 에서  $x^* = 0$ 의 벽면의 온도를 갑자기  $T_w$ 로 올린다.  $x^* = L^*$ 의 온도는 항상  $T_0$ 로 유지시킨다. 여기에서 상첨자 \*는 실제의 시간 및 거리를 의미하며, 양쪽의 경계는 주어진 온도에서 열적으로 흑체(black wall)라고 가정한다. 일정한 물성치를 가정하고 무차원화된 포물선형 및 쌍곡선형 열전도식과 초기 및 경계 조건은 다음과 같다.

### 포물선형 열전도식

$$6 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^{*2}} \quad (2)$$

Table 1 Physical properties of diamond.

Lattice constant, a	$3.57 \times 10^{-10}$ m
Specific heat	517.05 J/kgK
Mass density	3510 kg/m <sup>3</sup>
Debye temperature, $\theta_b$	1860 K
Speed of sound, v	12,288 m/s
Constant A in Eq. (19)	163.94
Stefan-Boltzmann constant, $\sigma_{SB}$	50.47 W/m <sup>2</sup> K <sup>4</sup>
Number density in Eq. (16)	0 $154 \times 10^{26}$ m <sup>-3</sup>
R in Eq. (17)	$1.785 \times 10^{-10}$ m
$\gamma$ in Eq. (19)	1.58

쌍곡선형 열전도식(CHE)

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial x} = -6Q \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

초기조건

$$\theta(x, 0) = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial t}(x, 0) = 0 \quad \text{for CHE} \quad (5a)$$

경계조건

$$\theta(0, t) = 1, \quad \theta(L, t) = 0 \quad (5b)$$

Joshi와 Majumdar<sup>(6)</sup>는 포물선형 및 쌍곡선형 식의 해석 해를 구하였다. 그러나 도약 경계 조건을 적용하지는 않았다.

포논 복사 전달식(Equation of Phonon Radiative Transport)

포톤과 포논은 에너지의 파동 포켓(wave pocket)으로 다루어질 수 있다는 유사성에 착안하여 Majumdar<sup>(5)</sup>는 두 개의 평행한 판 사이에서 포논에 의한 일차원 열전달 현상을 Boltzmann 식의 시간 완화 모델로부터 EPRT를 유도하였다.  $x^*$  방향으로의 포논의 강도(intensity)  $I$ 는 EPRT에서 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I_w}{\partial t^*} + \mu \frac{\partial I_w}{\partial x^*} = \frac{\left( \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_w d\mu \right) - I_w}{v\tau(w, T)} \quad (6)$$

여기서  $\mu = \cos\theta$ 이며  $I_w$ 는 Siegel 및 Howell<sup>(7)</sup>이 정의한 포논의 강도와 유사하게 단위 시간 당, 단위 면적 당, 포논이 전파되는 방향으로의 각도(solid angle) 당, 주파수  $\omega$  주위의 단위 주파수 당의 포논 강도이다.<sup>(8)</sup>

$$I_w(\theta, \varphi, x^*, t^*) = \sum_p v_p(\theta, \varphi) f_w(x^*, t^*) \quad (7)$$

$$\hbar\omega_p D(\omega)$$

여기서  $\hbar\omega$ 는 주파수  $\omega$ 의 포논 에너지의 쿼텀이고,  $f_w$ 는 분포 함수로서 주파수의 함수이며,  $D(\omega)$ 는 상태 밀도이다. 여기서  $\theta$ 는 방위각(azimuth angle)이며 식 (7)에서의 합은 포논의 세 방향 편광성에 대하여 행한다. 위의 미적분식 (6)은 포논의 복사 열전달<sup>(6)</sup>과 상당히 유사하다. EPRT의 미적분식의 수치 해를 얻기 위하여 S-N 구분 종좌법(discrete ordinate) 근사식을 사용하였

다. 본 연구에서는 20개의 점을 사용하였는데 ( $N=20$ ), 식 (6)의 적분 항을  $\mu_i$ 로 나타나는 구적점(quadrature points)과 이에 상응하는 가중치  $r_i$ 를 사용하여 다음과 같이 대체할 수 있다.

$$\int_{-1}^1 I(\mu) d\mu = \sum_{i=1}^{20} r_i I(\mu_i) \quad (8)$$

본 논문에서는 Gauss-Legendre 구적법(quadrature scheme)을 사용하였고,  $\mu_i$ 는 20차 Legendre 다항식의 해가 된다.

$$P_{20}(\mu_i) = 0, \quad 1 \leq i \leq 20 \quad (9)$$

그리고 이에 상응하는 가중치는 다음과 같이 주어진다.

$$r_i = \frac{2}{20 P_{19}(\mu_i) P_{20}'(\mu_i)} \quad (10)$$

포논 열전달을 지배하는 EPRT 식 (6)은 Gauss-Legendre 구적법을 사용하여 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial I_w}{\partial t^*} + \mu \frac{\partial I_w}{\partial x^*} = \frac{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{20} r_i I(\mu_i) - I_w}{v\tau(w, T)} \quad (11)$$

S-N 근사식 (11)을 풀기 위해서 20개의 초기조건이 필요하며 EPRT에 적용된 초기 조건을 구적점  $\mu_i$ 에서 계산하여 다음과 같이 구할 수 있다.

$$I(x^*, w, \mu, 0) = I_w^0(T_0) \quad (12)$$

왼쪽 경계에서 ( $x^*=0$ ) 필요한 10개의 경계 조건은 양의 방향의 구적점에서 전달 경계 조건으로부터 구할 수 있으며, 흑체의 경계 면에 대하여 적용하여 다음의 경계조건을 얻을 수 있다.

$$I(0, w, \mu_i, t) = I_w^0(T_w), \quad \mu_i > 0 \quad (13a)$$

오른쪽 경계에서는 ( $x^*=L^*$ ) 음의 방향 구적점에 대하여 같은 방법으로 필요한 경계조건을 계산할 수 있다.

$$I(L^*, w, \mu_i, t) = I_w^0(T_w), \quad \mu_i < 0 \quad (13b)$$

식 (6)의  $I_w$ 는 모든 주파수에 대하여 다음과 같은 엄격한 평형 조건을 가정함으로써 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$I_w^0(T) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_w d\mu \quad (14)$$

여기서 평형 포논 분포  $I_w^0$ 는 Bose-Einstein 통계

분포를 사용하며, 따라서 온도만의 함수가 되고 결과적으로 위치  $x^*$ 의 함수가 된다. 즉 식 (11)로부터 강도  $I$ 를 시간, 위치, 및 주파수에 대하여 계산하고 식 (14)에 대입하여 모든 주파수 영역에 대하여 적분하여 강도  $I$ 에 상응하는 온도를 구할 수 있다.

식 (11)은 파동식이므로 직접 상류 차분법 (explicit upstream finite difference method)을 적용하여 해를 구하였다. 안정된 수치해석 해를 얻기 위하여 쿠란트 수 (Courant number)를 1보다 작게 취하였으며 ( $\Delta t^* \leq \Delta x^*/(v/|\mu|)$ ), 주파수 구간 ( $0 < w < w_D$ ; cut-off frequency,  $w_D = 2.435 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ )을 29구간으로 나누어 계산하였다.

한편 EPRT 식에 사용된 열 완화 시간  $\tau$ 는 Matthiessen rule<sup>(9)</sup>을 이용하여 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_v} \quad (15)$$

여기서  $\tau_i$ 와  $\tau_v$ 는 불순물과 Umklapp 산란에 대한 완화 시간이다. 불순물 산란에 대한 완화 시간은 다음과 같이 주어진다.

$$\tau_i = \frac{1}{\alpha \varphi \eta v} \quad (16)$$

여기서  $\alpha$ 는 크기 1 정도의 상수이고,  $\eta$ 는 단위 체적당 산란 위치의 개수이며,  $\varphi$ 는 산란 단면적으로서 다음과 같이 정의된다.

$$\varphi = \pi R^2 \left( \frac{X^4}{X^4 + 1} \right) \quad (17)$$

여기서  $R$ 은 격자 불완전 반경 (lattice imperfection radius)이며,  $X$ 는 다음과 같이 정의되는 크기 변수이다.

$$X = \frac{2\pi R}{\Lambda} = \frac{wR}{v} \quad (18)$$

여기서  $\Lambda$ 는 포논의 파동 길이 (wave length)이고  $w$ 는 주파수 (frequency)이다. Umklapp 완화시간,  $\tau_v$ 는 다음과 같이 근사식으로 표현된다.<sup>(10)</sup>

$$\tau_v = A \frac{T}{\theta_{Dw}} \exp\left(\frac{\theta_D}{\gamma T}\right) \quad (19)$$

여기서  $A$ 는 무차원 상수이며  $\gamma$ 는 결정 구조의 효과를 나타내는 변수이다. 상온에서 type IIa 다이아몬드의 열전도계수는  $3,320 \text{ W/mK}$ <sup>(11)</sup>이다. 열전

도계수와 분자 운동 모델 (kinetic model)로부터 구한 평균 자유 행정은  $0.45 \mu\text{m}$ 이다.

### 3. 도약 경계조건

고려하는 영역의 두께가 전달 매체의 평균 자유 행정과 비슷한 크기일 때, 연속체 가정은 유효하지 않을 수 있다. 이러한 경우에는 경계에서의 분자 운동 경계 조건과 내부에서 사용하려는 거시적인 식을 연결해 주는 도약 경계 조건 (Jump Boundary Conditions)을 사용하여 연속체 모델을 확장 사용할 수도 있다. 그러한 접근 방법은 여러 분야에서 찾아볼 수 있으며 그 예로서 희박 기체의 유동 및 온도장 해석과 복사 열전달의 확산 근사식 (diffusion approximation) 등이 있다. 희박 기체의 경우 경계에서 속도의 미끄럼 및 온도의 도약 조건을 적용함으로써 문제를 해석하며, 복사 열전달의 경우 내부에서는 포톤 전달식을 거시적인 확산 근사식으로 근사하여 문제를 풀고 경계에서는 포톤 전달식과 확산 근사식이 점근적으로 일치하도록 방사도 (emissive power)의 도약 조건을 적용한다. 이러한 접근 방법의 기본 개념은, 경계 부근에서는 실제의 미시적인 양상이 공간에 대하여 관련되는 변수 (온도 등)가 급격하게 변하면서 나타나고 내부에서는 좀더 완만한 변화를 보인다는 것이다. 내부의 완만한 변화는 거시적인 식을 이용하더라도 내부의 변화를 적절히 나타낼 수 있으나 고려하는 영역이 극히 작은 경우에는 경계에서 변수의 급격한 변화가 중요하게 된다. 그러므로 적절한 경계 조건의 선택에 의하여 거시적인 식을 아주 좁은 영역에 까지 확대하여 사용할 수도 있게 되는 것이다. 포논 열전달에 대하여 Lavine과 Bai<sup>(4)</sup>는 여러 가지 가능한 경계조건을 고찰하였는데, 확산 및 음향 불일치 이론 (diffuse and acoustic mismatch theory), 시간 완화 모델 (time relaxation model), 그리고 기체 분자 운동 이론 (gas kinetic theory)을 이용하여 적용 가능한 도약 조건을 얻었다. 아래에 Lavine과 Bai<sup>(4)</sup>가 사용한 도약 경계 조건을 선형과 비선형의 두 가지 형태로 구분하여 고찰하였다.

#### 3.1 비선형 형태

음향 불일치 이론과 시간 완화 모델로부터 비선형 도약 경계 조건을 유도할 수 있으며 그 형태는

다음과 같다.

$$q_{iw} = \Gamma \sigma_{SB} (T_w^4 - T_{iw}^4) \quad (20)$$

여기서  $\sigma_{SB}$ 는 포논 Stefan-Boltzmann 상수이고, 경계면에서 실제의 경계 면을 하첨자  $w$ 로 명칭하고 경계 면에 바로 접한 영역 내부의 가상의 경계 면을 하첨자  $iw$ 로 구별하였다(실제 경계와 가상 경계에서의 온도 도약을 고려). 식 (20)에서 상수  $\Gamma$ 는 시간 완화 모델에서는 32/17이며, 확산 불일치 이론에서는 0.5, 그리고 음향 불일치 이론에서는 1.0이다.

### 3.2 선형 형태

포논의 거동은 기체의 거동과 유사한 점이 많으므로 희박 기체에 적용된 분자 운동 모델을 포논 열전달에 적용하여 도약 경계 조건을 유도할 수 있는 방법의 하나로 고려해 볼 수 있다. 경계 면이 흑체인 경우, 경계면에서 온도의 도약은 다음과 같이 온도 구배로 주어진다.

$$T_w - T_{iw} = -\frac{2\alpha}{\nu} \left[ \frac{\partial T}{\partial x^*} \right]_{iw} \quad (21)$$

여기서  $\alpha$ 는 열확산계수이다.

Lavine과 Bai<sup>(4)</sup>는 위의 도약 경계 조건을 적용하여 CHE 및 MHE의 수치 해석 해를 구하였다. 고려하는 영역의 두께가 평균 자유 행정과 비슷한 경우에도 도약 경계 조건을 적용하면 CHE 및 MHE의 결과가 거의 일치하였으며, 도약 조건을 적용하지 않았을 때 CHE에서 관찰할 수 있었던 온도의 음/양의 과이동 현상이 사라졌다. 본 논문에서는 CHE(도약 경계조건을 적용할 경우 CHE 및 MHE의 결과가 같으므로)에 대하여 선형 및 비선형 도약 경계 조건을 적용하여 해를 구하고 그 결과를 EPRT의 결과와 비교함으로써 아주 얇은 영역에서 도약 경계조건과 거시적인 열전달 식을 이용하여 열전달 문제를 해석할 수 있는지를 검토한다.

## 4. 결과 및 토의

일정한 두께를 가지는 판의 한쪽 경계에서 갑자기 온도를 올렸을 때 일어나는 내부에서의 온도 변화를 1) 도약 경계 조건을 사용하지 않은 포물선형 열전도식(그림에서 Fourier로 명칭), 2) 도약 경계

조건을 사용하지 않은 쌍곡선형 열전도식(그림에서 hyperbolic으로 명칭), 3) 선형 및 비선형 도약 경계 조건을 사용하는 쌍곡선형 열전도식(그림에서 rarefied gas model 및 time relaxation model로 명칭) 및 4) EPRT를 이용하여 살펴보았다. 도약 경계 조건을 사용하지 않은 포물선형 및 쌍곡선형 열전도식에 대해서는 해석 해를 구하였으며, 도약 경계 조건을 적용한 쌍곡선형 열전도식은 전산 압축성 유체 분야에서 개발되어 사용되고 있는 Total Variation Diminishing(TVD) 수치해석법을 사용하였다(자세한 내용은 Bai와 Lavine<sup>(4)</sup> 참조). EPRT는 S-N 구분좌법(discrete ordinate approximation)과 직접 상류 차분법을 이용하여 수치해석 해를 구하였다.

초기에 300K로 유지되는 두께 0.09  $\mu\text{m}$ , 0.9  $\mu\text{m}$ , 및 9  $\mu\text{m}$ (각각 무차원 두께 0.1, 1.0, 10에 상응)의 얇은 다이아몬드 판을 모델로 하였는데, 본 연구에서 고찰하는 다이아몬드의 판 두께는 고체 상태 장치에서 상업적으로 흔히 사용되는 두께이다.  $x=0$ 의 경계에서 갑자기 벽면의 온도를 0.1 K 올리는 모델 문제를 고려한다.

Fig. 1은 무차원 시간 0.01, 0.1, 및 정상 상태에서 두께 0.09  $\mu\text{m}$ 의 다이아몬드 박판(무차원 두께 0.1) 내부의 온도 분포를 나타낸다. 고려하는 박판의 두께는 다이아몬드의 평균 자유 거리보다 작은 값이다. 포물선형 열전도식, 도약 경계 조건을 사용 또는 사용하지 않았을 때의 쌍곡선형 열전도식 및 EPRT의 결과를 같은 그림에 함께 나타내었다. 모든 그림에서 시간 및 거리는 무차원 변수이다. 무차원 시간 0.01(Fig. 1(a))에서 쌍곡선형 온도는 파동 특성을 나타내는 반면에(거리 0.01까지 경계조건의 영향을 받음), 포물선 및 EPRT의 온도는 매우 소산된(dissipative) 양상을 보이고 있다. 쌍곡선형 열전도식의 경우 온도 분포는 도약 경계 조건의 적용 유무에 관계없이 매우 유사한 경향을 보이지만, 온도 값은 경계에서 온도 도약으로 인하여 서로 큰 차이를 보이고 있다. EPRT의 경우 쌍곡선형 열전도식과 유사하게 경계에서의 온도 도약 현상을 발견할 수 있다. 그러나 EPRT 식이 파동 식임에도 불구하고 내부에서 쌍곡선형 열전도식의 온도보다 훨씬 소산된 결과를 보이고 있다. Fourier 식의 온도분포는 내부에서 상당히 소산된 양상을 나타내고 경계에서 온도의 변화가 빠른 속도로 영역 내부까지 영향을 미치고 있다. 무차원

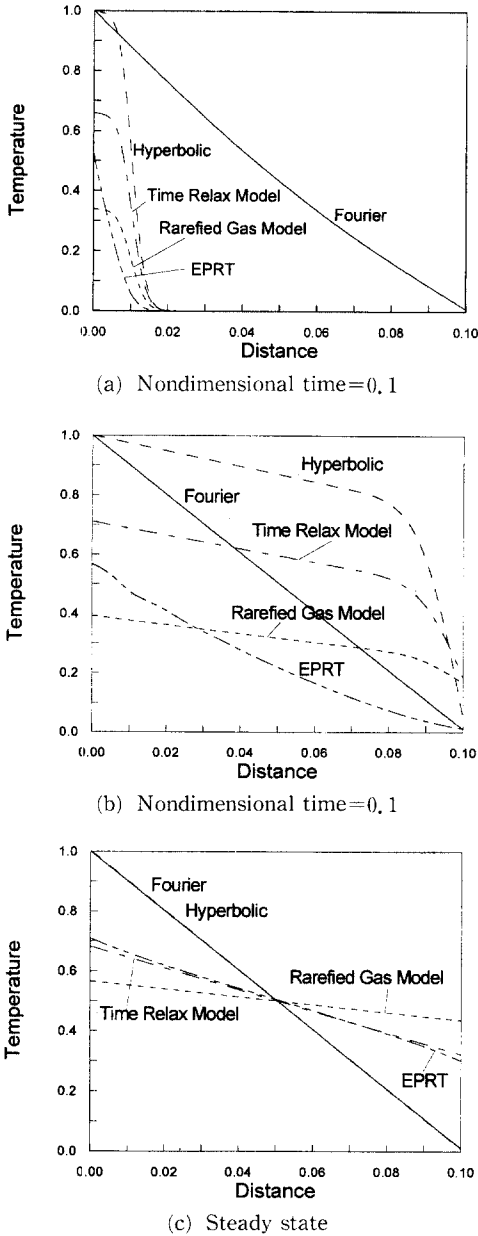


Fig. 1 Nondimensional temperature distribution for  $L=0.1$  at nondimensional time of 0.01, 0.1, and steady state.

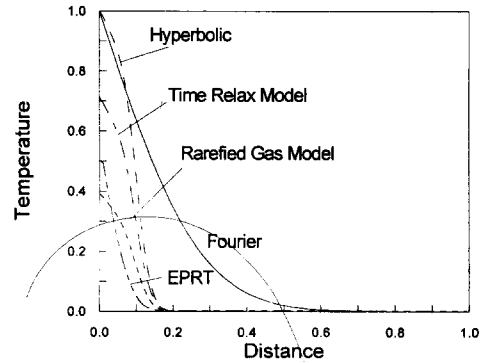
시간이 0.1일 때 온도 분포를 Fig.1(b)에 나타내었다. 무차원 시간 0.1은 파동이 무차원 두께 0.1의 영역을 지나는데 걸리는 시간에 상당한다. Fourier의 온도는 이미 정상상태에 도달해 있다. 도약 경계 조건을 사용하는 쌍곡선형 온도는 여전히 경계에서 온도의 급격한 변화를 보이고 있으며

EPRT 결과 역시 경계에서 온도의 도약 현상을 보이고 있으나 온도 도약은 상당히 다른 값을 나타내고 있고 EPRT의 결과는 내부에서 상당히 소산된 양상을 나타내고 있다. 오른쪽 경계에서( $x=0.1$ ) EPRT의 경우 온도의 도약이 미미한 반면 온도 도약 경계조건을 적용한 경우 약 0.2 정도의 온도 도약을 관찰할 수 있다. 정상상태에서(Fig.1(c)) 포물선형 온도와 도약 경계 조건을 사용하지 않은 쌍곡선형 열전도식의 온도는 선형 온도 분포를 보이고 서로 일치하고 있다. 그러나 EPRT 및 도약 경계 조건을 사용한 쌍곡선형의 결과는 정상상태에서도 벽면에서의 온도 도약을 보이고 있으며 그 크기는 time relaxation model 및 EPRT의 경우 무차원 온도 0.3 정도이고 rarefied gas model의 경우 약 0.4이다. 정상 상태에서 이와 같이 온도의 도약 현상이 존재하는 것은 Klitsner 등<sup>(12)</sup>이 Monte Carlo 모사 방법을 이용하여 구한 해에서도 발견할 수 있다. 정상상태에 도달하는 무차원 시간을 온도 변화가 0.05%이내인 경우에 해당하는 시간으로 하였을 때, Fourier 식, hyperbolic, rarefied gas model, time relaxation model 및 EPRT의 경우 각각 0.07, 7.0, 3.0, 2.0 및 5.0이다. Fourier 식에 비해 EPRT 및 쌍곡선형의 경우 정상상태에 도달하는데 더 많은 시간이 걸리는 것은 파동이 유한한 속도로 전파하기 때문이다. 도약 경계 조건을 적용하지 않은 쌍곡선형 온도의 경우 계속해서 경계에서 파동이 반사되므로 EPRT나 도약 경계 조건을 적용한 식보다 정상상태에 도달하는 시간이 많이 걸린다. EPRT의 경우 내부에서 상당히 소산된 형태의 온도 분포를 보임에도 불구하고 도약 경계 조건을 적용한 식보다 정상상태에 도달하는데 많은 시간이 걸렸다. 이러한 현상은 무차원 시간 0.1에서 도약 경계 조건을 적용한 쌍곡선형 온도는 오른쪽 경계에서 확인한 온도 도약을 보이는 반면 EPRT의 경우 온도 도약이 아직 미미하다는 사실로부터도 EPRT의 온도 확립이 느리다는 것을 알 수 있다.

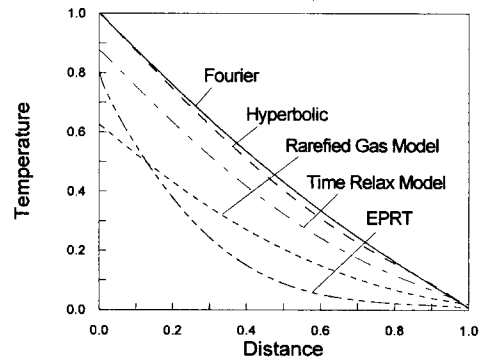
Fig.2는 두께  $0.9 \mu\text{m}$ 의 다이아몬드 박판 내부의 온도 분포를 무차원 시간 0.1, 1.0, 및 정상 상태에서 나타낸다. 고려하는 박판의 두께는 무차원 두께 1이며 다이아몬드에서 포논의 평균 자유 행정에 상당한다. 온도 분포는 정성적으로 Fig.1과 상당히 유사한 분포를 나타내고 있다. 무차원 시간이 0.1일 때(Fig.2 (a)) EPRT 온도는 벽면에서 온도

의 도약 현상을 보이고 있으며, 도약 온도 값은 희박 기체 모델과 시간 완화 모델로부터 구한 값의 중간 정도를 나타내고 있다. Fourier 온도분포는 두께  $0.1 \mu\text{m}$ 에서와 마찬가지로 다른 식들에 비해 빠르게 확립되어가고 있음을 알 수 있다. 무차원 시간이 1일 때 (Fig. 2 (b)), 포물선형 온도는 이미 정상상태에 도달해 있다. 도약 경계 조건을 적용하지 않은 쌍곡선형 온도 역시 빠른 속도로 정상상태에 도달하고 있는데, 이것은 도약 조건을 적용하지 않은 쌍곡선형의 경우 여전히 벽면에서 파동이 반사되어 내부로 전달되긴 하지만 두께  $0.09 \mu\text{m}$ 인 경우에 비해 내부에서 어느 정도 소산되기 때문이다. 반면에 EPRT 및 도약 조건을 적용한 경우 벽면에서 온도의 도약을 관찰할 수 있지만 서로 다른 값을 나타내고 있으며 Fig. 1에서와 마찬가지로 EPRT의 온도 확립이 상대적으로 느림을 알 수 있다. EPRT의 경우 특히 오른쪽 경계에서의 온도 도약이 상당히 느린 속도로 나타나고 있다. 정상상태에서 (Fig. 2 (c)) 도약 경계 조건을 사용하지 않은 쌍곡선형 온도와 포물선형 온도는 서로 일치하고 있다. EPRT 및 도약 경계 조건을 적용한 쌍곡선형 온도는 정상상태에서도 경계에서 온도의 도약을 나타내고 있으며, 특히 EPRT의 결과와 시간 완화 모델을 적용한 쌍곡선형 결과는 비교적 잘 일치하고 있다. Fig. 1에서와 마찬가지로 rarefied gas model을 적용한 온도는 다른 식들에 비해 경계에서 큰 온도 도약을 나타내고 있다. EPRT 및 time relaxation model을 적용한 온도는 약 0.07 정도의 온도 도약을 정상상태에서 보이고 있다. 정상상태 도달시간은 Fourier 식, hyperbolic, rarefied gas model, time relaxation model 및 EPRT의 경우 각각 7, 9, 28, 22 및 32이었다. Fig. 1에서와 마찬가지로 EPRT의 경우 정상상태에 도달하는 시간이 가장 많이 걸렸으며 이것은 내부의 소산적인 온도 분포로 인하여 오른쪽 경계에서의 온도 도약 확립이 느리기 때문으로 생각된다.

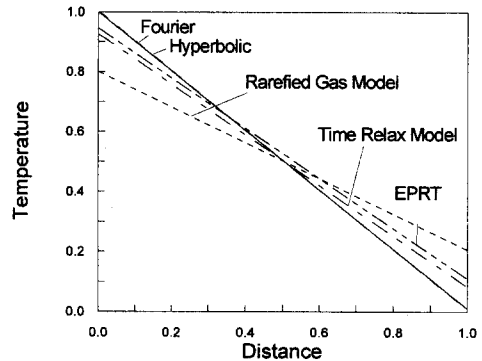
Fig. 3은 무차원 시간 10.0, 100.0, 및 정상 상태에서 다이아몬드 판의 두께가  $9.0 \mu\text{m}$ 일 때의 온도 분포를 나타낸다. 판의 두께가 열전달 매체의 평균 자유 거리보다 큰 경우이며 온도 분포는 Fig. 1 및 2와 상당히 다른 모습을 나타내고 있다. 모든 온도 분포는 내부에서 상당히 소산된 형태를 보이고 있다. 비록 판의 두께가 열전달 매체의 평균 자유 거리보다 큰 경우에도 EPRT 및 도약 경계 조



(a) Nondimensional time=0, 1



(b) Nondimensional time=0, 1

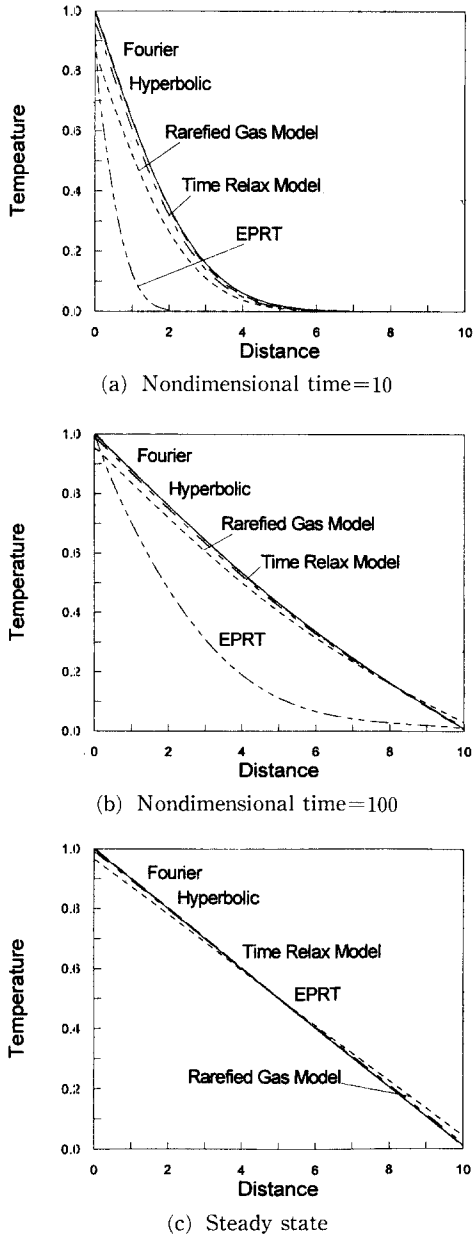


(c) Steady state

Fig. 2 Nondimensional temperature distribution for  $L=1$  at nondimensional time of 0.1, 1.0, and steady state.

건을 적용한 쌍곡선형 열전도식에서 미약하긴 하지만 초기에 온도의 도약 현상을 볼 수가 있다. 특히 EPRT 온도가 가장 소산된 양상을 나타내고 있으며 온도 확립에 많은 시간이 소요된다는 것을 알 수 있다. 각각의 식들로부터 구한 온도 차이는 고려하는 영역이 두꺼워질수록 줄어드는 것을 알 수





**Fig. 3** Nondimensional temperature distribution for  $L=10$  at nondimensional time of 1.0, 10.0, and steady state.

있다. 정상 상태에서는 거의 모든 온도가 서로 잘 일치하고 있으며, 희박 기체 모델을 사용한 쌍곡선형 온도도의 경우 약간의 온도 도약을 보이고 있다. 정상상태에 도달하는 시간은 Fourier 식, hyperbolic, rarefied gas model, time relaxation model 및 EPRT의 경우 각각 700, 900, 900, 900 및

1,400이었다. 판의 두께가 열전달 매체의 평균 자유 거리보다 상당히 큰 경우 EPRT를 제외한 모든 식들이 상당히 유사한 온도 발달을 나타내고 있는데, EPRT의 경우 내부에서 지나치게 소산적인 온도 분포로 인하여 상대적으로 온도 확립에 많은 시간이 소요되고 있다.

## 5. 결 론

두께가 열전달 매체의 평균 자유 행정과 유사한 영역과 아주 작은 시간에서 포논에 의한 열전달을 해석하기 위하여 여러 가지 형태의 식을 적용하였다. 이러한 영역에서는 포물선형 및 쌍곡선형 열전도식의 기본 가정인 연속체 가정에 의심이 가기 때문에 기존의 거시적인 식을 사용하여 온도 분포를 구하는 데에는 문제가 있을 수 있다. 이런 경우 미시적인 전달식을 사용하여 해를 구할 수 있으나, 일반적으로 공학자들은 이러한 미시적 전달식에 익숙지 못하며 또한 아주 간단한 조건에서조차 미시적인 전달식의 해는 쉽게 구할 수 없는 단점이 있다. 따라서 본 연구에서는 이러한 영역에서 기존의 거시적인 포물선형 또는 쌍곡선형 식에 적절한 경계조건을 도입하여 열전달 문제를 해석하기 위한 시도를 하였다. 복사 열전달에서 사용되는 확산 근사식 방법과 희박 기체의 해석에 적용되는 방법 등과 유사하게 벽면에서 온도 도약 경계 조건을 유도하고 기존의 거시적인 포물선형 열전도식과 쌍곡선형 열전도식에 적용하여 해를 구하였다. 미시적인 식으로 Boltzmann 전달식에 시간 완화 모델을 적용하여 근사한 EPRT를 사용하였으며, 온도 도약 경계 조건을 적용한 거시적인 식의 결과를 EPRT의 결과와 비교하였다.

판의 두께가 포논의 평균 자유 행정과 유사하거나 작은 경우 기존의 거시적인 온도는 경계에서 도약 조건을 적용한 쌍곡선형의 온도 및 EPRT와 상당히 다른 양상을 나타내었다. 포물선형 온도를 제외한 모든 식들은 파동 특성을 나타내었다. 특히 판의 두께가 평균 자유 행정보다 작은 경우 비정상 상태의 온도는 모든 식에서 현저하게 달랐으며, 정상상태에서도 경계에서 여전히 존재하는 온도의 도약 현상을 기존의 거시적인 식은 나타내지 못하였다. 경계에서 온도 도약을 적용한 쌍곡선형 온도 역시 EPRT와 비정상 상태에서 많은 차이를 나타냈으며 EPRT는 다른 식들에 비해 내부에서 훨씬

소산적이었고 정상상태에 도달하는 데 많은 시간이 걸렸다. 정상상태에서 time relaxation model의 도약 경계 조건을 적용한 쌍곡선형의 온도와 EPRT의 결과가 상당히 유사하였다. 판의 두께가 포논의 평균 자유 행정과 유사한 경우에도 그 양상은 비슷하였으며 정상 상태에서도 크지는 않지만 경계에서의 온도 도약을 나타내고 있다. 이 영역에서도 EPRT는 상당히 소산적인 양상을 보였으며 온도 확립이 느리게 나타났다. 판의 두께가 상당히 두꺼워지면서 EPRT를 제외한 모든 식들은 상당히 유사한 온도 특성을 나타내었다. 그러나 EPRT는 온도 발달이 앞서서와 마찬가지로 상당히 느리게 진행되고 정상상태에 도달하는데 많은 시간이 걸렸다. 정상상태에서 모든 식들의 결과는 거의 일치하였다.

고려하는 영역의 두께가 열전달 매체의 평균 자유 거리와 유사한 경우 기존의 거시적인 식을 사용하여 열전달 해석을 하기 위하여 경계에서 온도 도약 조건을 적용하였으나 그 결과는 미시적인 전달 식의 하나인 EPRT와 많은 차이를 보이고 있다. 정상 상태의 경우 time relaxation model을 적용한 쌍곡선형의 온도와 EPRT는 유사한 양상과 값을 나타내지만 비정상 상태에서는 경계에서 온도 도약의 정도나 내부에서의 온도 분포는 많이 달랐다. 그러나 미시적인 식으로 사용한 EPRT 역시 열전달 매체의 평균 자유 행정에 상응하는 아주 좁은 영역에서는 열 완화 시간이 경계 부근에서 경계의 존재로 인하여 영향을 받기 때문에(Ziman<sup>(9)</sup>) 경계 부근에서 적용할 때 문제가 있을 수 있음을 유의하여야 한다. 즉 EPRT를 미시적인 식으로 하여 거시적인 식의 결과와 비교를 하였으나 EPRT 역시 근사된 식이므로 본 연구에서와 같은 영역에서 반드시 옳은 식이라고 할 수는 없다. 이상의 결과로부터 비정상 상태 열전도 문제를 해석하기 위하여 도약 경계 조건을 적용한 쌍곡선형 열전도식을 사용할 수 있는지 결론적으로 말할 수는 없다. 저자가 아는 한, 본 연구에서 언급한 모델을 검증할 수 있는 실험이 아직까지 없었으며 실험이 상당히 어렵기는 하지만 그러한 실험은 이 분야의 연구에 더없이 귀중한 자료를 제공할 것이다.

## 후 기

이 논문은 한국과학재단 핵심 전문 연구 지원에

의하여 연구되었으며 관계자 여러분께 감사드립니다(941-1000-057-2).

## 참고문헌

- (1) Cattaneo, C., 1948, "Sulla Conduzione del Calore," *Atti. Sem. Mat. Fis. Univ. Modena*, 3, pp. 83~101
- (2) Bai, C and Lavine, A. S., 1995 "On Hyperbolic Heat Conduction and the Second Law of Thermodynamics," *Journal of Heat Transfer*, Vol. 117, pp. 256~263
- (3) Coleman, B. D., Fabrizio, M., and Owen, D. R., 1982, "On the Thermodynamics of Second Sound in Dielectric Crystals," *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 80, pp. 132~158
- (4) Lavine, A. S. and Bai, C., 1994, "Hyperbolic Heat Conduction in Thin Domains," *Thermal Science and Engineering*, Vol. 2, No. 1, pp. 185~190.
- (5) Majumdar, A., 1991, "Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Films," *Thin Film Heat Transfer*, HTD-Vol. 184, pp. 33~42
- (6) Joshi, A. A. and Majumdar, A., 1993, "Transient Ballistic and Diffusive Phonon Heat Transport in Thin Films," *Journal of Applied Physics*, Vol. 74, No. 1, pp. 31~39
- (7) Siegel, R., and Howell, J. R., 1981, *Thermal Radiation Heat Transfer*, McGraw-Hill Book Company
- (8) zisik, M. N., 1973, *Radiative Transfer and Interactions with Conduction and Convection*, John Wiley & Sons, New York
- (9) Ziman, J. M., 1960, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, London
- (10) Klemens, P. G., 1958, "Thermal Conductivity and Lattice Vibrational Modes," *Solid State Physics*, Vol. 7, pp. 720~729
- (11) Anthony, T. R., Banholzer, W. F., Fleischer, J. F., Wei, L., Kuo, P. K., Thomas, R. L. and Pryor, R. W., 1990, "Thermal Diffusivity of Isotopically Enriched <sup>12</sup>C Diamond," *Physical Review B*, Vol. 42, pp. 1104~1111
- (12) Klitsner, T., VanCleve, J. E., Fisher, H. E. and

Pohl, R. O., 1988, "Phonon Radiative Heat Transfer and Surface Scattering," *Physical Review B*, Vol. 38, pp. 7576~7594