◎ 논 문

나노 채널에서의 표면 거칠기와 경계 습윤의 효과

추연식* · 서인수* · 이상환**†

Effects of Surface Roughness and Interface Wettability in a Nanochannel

Yun-Sik Choo*, In-Soo Seo*, Sang-Hwan Lee**†

Key Words : Molecular Dynamics(분자동역학), Nanochannel(나노채널), interface wettability(경계 습윤), Surface Roughness(표면 거칠기)

ABSTRACT

The nanofluidics is characterized by a large surface-to-volume ratio, so that the surface properties strongly affect the flow resistance. We present here the results showing that the effect of wetting properties and the surface roughness may considerably reduce the friction of fluid past the boundaries. For a simple fluid flowing over hydrophilic and hydrophobic surfaces, the influences of surface roughness are investigated by the nonequilibrium molecular dynamics (NEMD) simulations. The fluid slip at near a solid surface highly depends on the wall-fluid interaction. For hydrophobic surfaces, apparent fluid slips are observed on smooth and rough surfaces. The solid wall is modeled as a rough atomic sinusoidal wall. The effects on the boundary condition of the roughness characteristics are given by the period and amplitude of the sinusoidal wall. It was found that the slip velocity for wetting conditions at interface decreases with increasing effects of surface roughness. The results show the surface rougheness and wettability determines the slip or no-slip boundary conditions. The surface roughness geometry shows significant effects on the boundary conditions at the interface.

1. 서 론

최근에 나노 제작 및 나노 장치의 발달로 인해 마이크로 규모에서의 유체 유동 문제에 대한 관심이 증대되고 있다. 따라서 나노규모 시스템에서 유체를 컨트롤하기 위하여 나노유체특성에 대한 연구가 중요해지고 있다.

나노규모 시스템에서는 단위 부피당 표면적이 매우 크기 때문에 마이크로, 매크로 규모의 유동과는 다른 물리적 특성이 나타난다. 기존의 거시적 규모의 유동은 연속체 가정이 성립하고 이를 바탕으로 Navier-Stokes 방정식을 지배 방정식으로 사용하였다. 그러나 나노유동은 점성손실이 관성효과에 비해 크고 나노 채널 폭이 유체 분자 사이즈와 비길 수 있기 때문에 점착경계조건 성립하지 않는다. 또한 분자간의 거리를 무시할 수 없으며 특성길이가 작아질수록 분자의 희박도가 높아져서 기존의 연속체 가정으로 해석할 수 없다. 따라서 기존의 연속체 이론을 바탕으로 한 해석방법과는 다른 접근방법이 필요하다. 이에 분자동역학 시뮬레이션이 널리 이용되고 있다.[1]

나노유동 해석을 위한 분자 기반 해법의 하나인 분자동역학 시뮬레이션(Molecular Dynamics Simulation, MDS)은 분자들 간의 상호작용으로부터 얻어지는 힘으로 뉴턴의 법칙에 따라 각각의 속도와 위치를 시간에 따라 계산하는 방법이다. 분자동역학 시뮬레이션은 각각의 입자에 대한 물리적 성질이나 미시적인 구조에 대한 정보를 주는 전산모사법이다. 따라서 연속체 가정을 벗어나는 나노유동에 대해 기존의 전산유체역학의 문제점에 대한 대안으로써 많이 이용되고 있다. 분자동역학 시뮬레이션의 경우 분자간의 상호 작용을 계산하여야 하기 때문에 입자 수의 증가에 따라 계산 량이 급격하게 증가한다. 하지만 최근 컴퓨터 기술의 발달로 슈퍼컴퓨팅 기술과 병렬연산을 사용하여 분자동역학 시뮬레이션을 통한 나노유동에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.

나노유동에 대한 선행연구들을 살펴보면 매끄러운 표면에 대한 연구 내용들이 있다. 하지만 나노스케일에서 이런 매끄러운 표면은 실제 발생하지 않는다. 나노제작에 의해서 입자들의 점착력 때문에 나노장치 및 나노채널에는 거친 표면이

* 한양대학교 대학원 기계공학과
** 한양대학교 기계공학과
† 교신저자, E-mail : shlee@hanyang.ac.kr

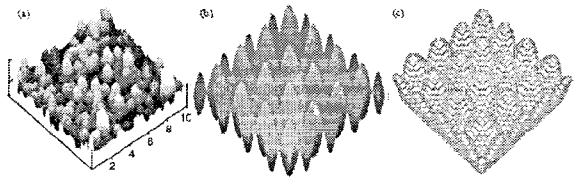

Fig. 1. (a) An actual rough surface imaged by AFM,(26) (b) an ideal rough surface and (c) a simulated rough surface in molecular scale

나타나게 된다. AFM(Atomic Force Microscopy)을 이용하여 표면을 관찰해 보면 Fig. 1(a)에서와 같이 표면에 불규칙하게 나노사이즈의 거친 표면이 나타난다.[2,3]

이러한 표면 거칠기는 표면 습윤과 함께 경계조건을 결정하는데 중요한 요소가 된다. 이에 표면 거칠기와 표면 습윤 효과가 미끄러짐 현상에 미치는 영향에 대해 이론, 실험적 연구가 활발히 진행 중이다.[4-6] 나노유동에서 분자동역학 시뮬레이션을 통한 표면 거칠기를 모델링한 선행 연구 내용을 살펴보면 거친 표면을 요철 형태로 모사하였다.[7,8] 또한 거칠기의 형태를 삼각형, 직사각형, 사인곡선 등으로[9-11] 모사하여 유동 특성을 살펴보았지만 2차원으로 모사하였기 때문에 Fig. 1(a)와 같은 형태의 거친 표면 모델을 모사하기에는 한계가 있었다.

이에 본 연구에서는 거친 표면을 3차원 원자의 사인파 곡선으로 모사하였다. 그리고 거친 표면을 가진 채널 내부의 Poiseuille 유동을 비평형 분자동역학(NEMD)을 이용해 수치모사 하였다. 그리고 이를 통해 표면 습윤 효과와 표면 거칠기가 나노채널 내에서의 유동에 미치는 영향을 연구하였다. 그리고 표면 습윤에 따라 친수성 표면과 소수성 표면으로 나누어서 표면의 거칠기에 따른 경계 면의 경계조건에 미치는 효과를 관찰하였다.

2. 수치해석

비평형 분자동역학 시뮬레이션을 사용하여 2개의 평행한 고체 벽면사이에 구속된 단순유체에 대한 Poiseiulle유동 특성을 관찰하였다. 각각의 모든 원자들 사이에 작용하는 퍼텐셜은 식 (1)과 같은 레나드-존스 퍼텐셜을 사용하였다.[12]

$$\Phi(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] - \Phi(r_c), \; r \le r_c \qquad (1)$$
$$= 0 \qquad , \; r \ge r_c$$

레나드-존스 퍼텐셜은 오직 거리에 의해 변하는 함수이고, 식(1)에서 r은 원자 사이의 거리이다. 전형적으로 레나드-존스 퍼텐셜은 근거리 계산 문제로서 거리가 멀어지면서 값이 급격하게 감소하는 형태를 갖는다. 따라서 절단거리(r_c)를 두어 일정 거리 이상 떨어진 원자들에 대한 퍼텐셜을 무시할 수 있으며, 본 연구에서는 그 절단 거리를 2.5σ로 정하였다.[12] $\Phi(r)$은 거리에 따른 퍼텐셜 에너지 값이다. σ,ϵ는 각각 레나드-존스 거리와 에너지 변수이고, 변수의 값은 각각 $\sigma = 0.3405nm$, $\epsilon/k_B = 119.8K$을 사용하였다.[13]

그리고 유체 원자와 고체 원자 모두 동일한 아르곤 원자로 구성하였다. 또한 모든 원자들은 레나드-존스 파라미터와 단위질량을 사용하였으며 모든 단위는 레나드-존스 환산 단위를 사용하였다.[12]

$$\Phi(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - C_{fs}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] - \Phi(r_c) \qquad (2)$$

표면에너지는 고체와 유체 사이의 상호작용하는 힘을 조정하여 조절할 수 있었고, 습윤 효과는 표면 장력의 변화로 조절할 수 있었다. 표면장력은 식(2)에서 변수 C_{fs} (f, s=F, S : fluid, solid phase)를 통해 변화 시킬 수 있었다.

Barrat에[14] 따르면 레나드-존스 퍼텐셜의 계수 C_{fs} 값이 1.0일 때 물방울과 고체의 접촉각(con-tact angle)이 90도이며, 0.5일 때 140도라고 했다.

C_{fs} 계수 값이 1.0일 때는 고체 원자와 유체 원자 사이에서 상대적으로 강한 인력이 작용하게 하므로 수치적으로 친수성 표면을 표현할 수 있다. 그리고 0.5일 때는 상대적으로 약한 인력이 작용하므로 소수성 표면을 표현할 수 있다. 본 연구에서는 벽면의 습윤 조건에 따라 친수성표면과 소수성 표면으로 구분하여서 시뮬레이션 하였다.

나노채널 내에서 표면 거칠기 효과를 모사하기 위해 Fig. 1에서와 같이 사인파 원자의 형태로 평판을 구성하였다. Fig. 1 (a)는 ATM을 사용하여 실제 나노 사이즈에서의 표면의 거칠기를 나타낸 사진이다.[15] (b)는 이러한 거칠기를 균일한 높이로 반복되어 있다고 가정하여 모델링한 표면이다. 본 연구에서는 이상적으로 균일하게 분포되어 있는 표면의 거칠기를 분자들의 격자 구조를 이용하여 모사한 (c)를 사용하여 시뮬레이션 하였다. 각각의 벽은 면심입방구조(Face Centered Cubic, FCC)로 구성하고 Fig. 2에서와 같이 벽 입자들의 위치를 z방향에 따라 사인파 곡선을 따라 배치하였다.

$$\Delta z = A\left[\sin\left(\frac{2\pi x}{P}\right) + \sin\left(\frac{2\pi y}{P}\right)\right] \qquad (3)$$

식(3)에서 A와 P는 각각 사인파 벽의 진폭과 주기를 나타내고 A와 P를 바꾸어 가며 거칠기의 특성을 변화시켰다. 실제 표면 거칠기 효과는 정확 하게 반복되어 있지 않고 랜덤하게 표면에 분포되어있지만 거칠기가 균일하게 반복되어 있다고 가정하여 모사하였고 x, y방향으로 주기 경계 조건을 적용하였다. 형상은 Fig. 2와 같이 사인파 벽의 평균 위치를

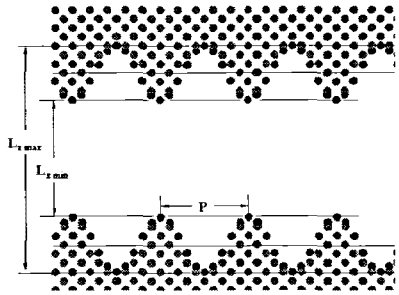

Fig. 2. Geometry of channel flow

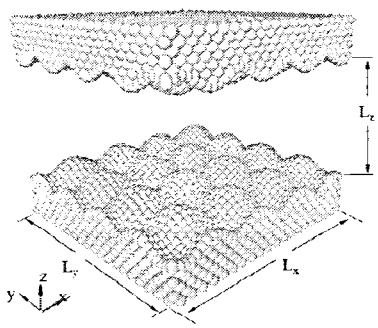

Fig. 3 Schematic of a rough solid wall

기준으로 채널 높이를 정하고 채널의 폭 Lz를 40σ로 정하였다. 채널의 두께 $Lz_{\max}, Lz_{\min}$은 식(4)와 같다.

$$Lz_{\max} = Lz + 2A \qquad (4)$$
$$Lz_{\min} = Lz - 2A$$

채널의 x, y방향의 너비 Lx, Ly는 30σ로 하였다(Fig. 3). 고체 원자는 초기 위치를 고정시키기 위해 고체-고체 사이의 퍼텐셜에 결합 퍼텐셜을 추가하였다.[16]

$$\Phi_{TI} = \frac{1}{2}K(r_i - r_{ei})^2 \qquad (5)$$

여기서 r_{ei}는 분자의 평형 위치이고, 스프링 상수 K는 150 (ϵ/σ^2)으로 설정하였다. Poiseuille 유동은 외부에서 끊임없이 압력 형태의 에너지가 인가되어 시스템이 평형상태에 도달하는 것을 방해한다. 유체에 의해 발생하는 viscous heat을 외부로 발산시키기 위해 고체 분자에 Gaussian thermostat을 사용하여 벽면의 온도를 초기 온도 $T^* = Tk_b/\epsilon = 0.722$로 유지하였다.[17] 유체의 초기 밀도는 0.8로 유지하였고 유체의 평균 밀도는 식(6)과 같이 계산하였다.

$$\rho_{avg} = \frac{N_f}{Lz \times Lx \times Ly} \qquad (6)$$

N_f는 유체 원자의 개수이다.

Table 1 Simulation condition

A	P	N_{solid}	N_{fluid}	N_{total}
1.6σ	7.5σ	10644	28566	39200
	15σ	10480	28720	39200
	30σ	10440	28760	39200
3.2σ	7.5σ	13592	28448	42400
	15σ	13670	28730	42400
	30σ	13640	28760	42400
1.8σ	7.5σ	16965	28635	45600
	15σ	16866	28734	45600
	30σ	16840	28760	45600

식(1)을 이용하여 채널 내부의 유체 분자들의 상호 작용에 의한 퍼텐셜을 계산하고, 식(2)를 통해 유체 분자들과 벽을 구성하는 고체 입자와의 상호작용에 의한 퍼텐셜을 계산하였다. 이 과정에서 계산한 포텐셜을 이용해 힘을 구할 수 있다. 이후 5th order gear 수정 예측법을 사용하여 $\tau^* = \tau(1/\sigma)\sqrt{\epsilon/m} = 0.001$의 시간간격을 이용해 뉴턴의 제2법칙을 수치적분하여 다음 스텝의 위치와 속도를 예측하였다.[12] 초기 유체가 배치된 상태에서 외부에 인가되는 힘없이 100,000번 반복 연산 하여 평형상태를 유지시켰다. 평형 상태를 유지한 후에 각 입자마다 x방향으로 $0.1(\epsilon/\sigma)$의 크기의 힘을 가하여서 유체가 흘러가게 하였다. 100,000번 반복연산 후 정상상태에 도달한 이후에 밀도, 온도, 속도 값들을 통계처리 하여 구하였다. 정상 상태에 도달하기 위해서 최종적으로 1,000,000번 반복연산을 수행하였다.

3. 결 과

나노채널 내부의 Poiseuille 유동에서 표면 습윤과 표면 거칠기 효과에 따른 유동 특성의 변화를 NEMD 시뮬레이션을 통해 조사해보았다.

습윤 조건은 C_{fs}값을 1.0과 0.5을 사용하여 친수성 표면과 소수성 표면으로 나누어서 살펴보았고 표면 거칠기에 대한 효과는 사인파 곡선의 진폭(A)과 주기(P)로 구분하여 Table 1의 조건으로 시뮬레이션 하였다.

정량적인 결과를 측정하기 위해 채널 사이의 공간을 z방향에 따라 400개의 짧은 구간으로 나누었고, 그 하나의 구간이 가지는 영역(Δz)을 빈(bin)이라 하였다. 이 때 빈 안에 들어온 유체 입자들의 개수를 파악하여 식 (7), (8)과 같이 밀도와, 속도를 통계 처리하여 구하였다.[18] 식 (9)의 국부 온도는 운동에너지를 이용하여 구했다.[19] 식 (9)에서 N_{bin}은 공간 안의 입자들의 개수이다.

$$\rho(r,t)=\sum_i m_i\delta(r-r_i(t))=m_iN_{bin} \tag{7}$$

$$u(r,t)=\frac{\sum_i mv_i(t)\delta(r-r_i(t))}{\sum_i m\delta(r-r_i(t))} \tag{8}$$

$$\overline{T}(z_{bin})=\frac{\left\langle\sum_i m[v_i-u(z,t)][v_i-u(z,t)]\right\rangle}{3N_{bin}} \tag{9}$$

또한, v_i는 입자에 가해진 속도이다.

3.1 고체벽-유체 사이의 습윤의 영향

소수성 표면은 유체-유체 원자들 사이의 결합력이 증가하고 유체-고체 원자 사이의 인력이 약하기 때문에 표면에 접하는 면적이 줄고, 고체-유체 사이의 경계면에 공기층 또는 나노 거품이 존재하게 된다.[20,21]

Fig. 4를 보면 소수성 표면에서 유체 원자와 고체 경계면의 공기층 또는 나노 거품으로 인해 채널에서의 벽면 근처에는 밀도의 크기가 낮은 것을 확인할 수 있었다.

Layering 효과는 나노 스케일에서 단위부피당 표면적이 크기 때문에 벽면에서 발생하는 효과이다.[22] Fig. 4의 매끈한 표면에서 (a),(b)의 밀도 그래프를 비교한 결과 소수성 표면에서 유체가 표면에 접하는 면적이 줄어들기 때문에 벽면 근처에서

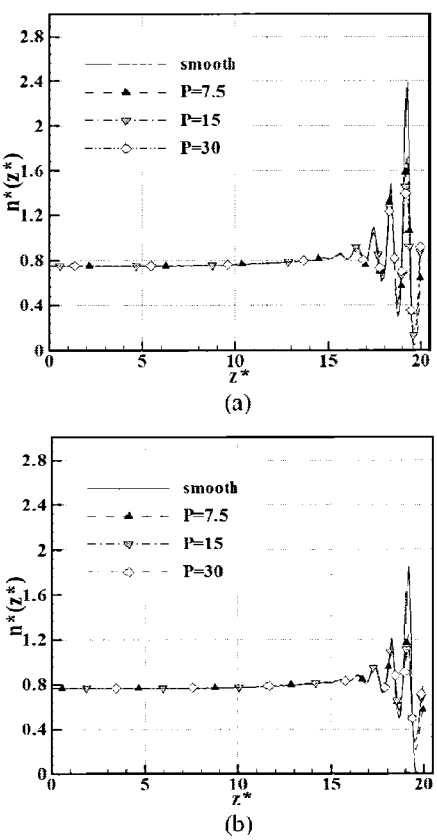

Fig. 4 Number density profiles for A=1.6 (a) Hydrophilic surface (b) Hydrophobic surface

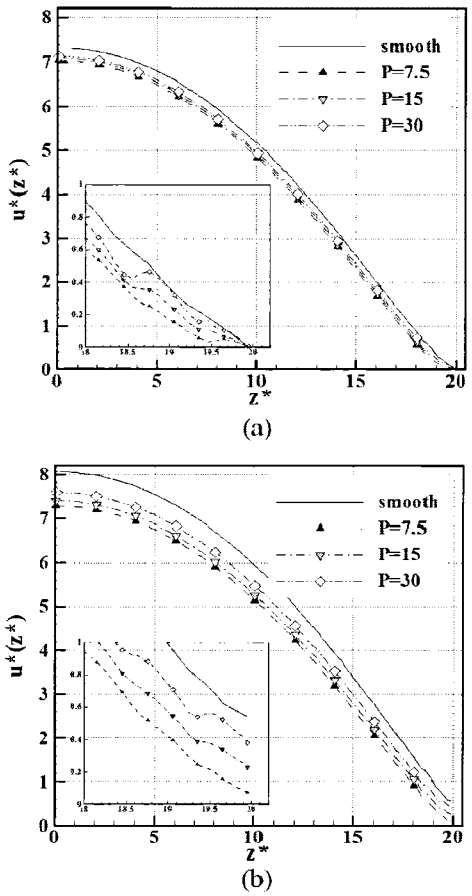

Fig. 5 Streaming velocity profiles for A=1.6 (a) Hydrophilic surface (b) Hydrophobic surface

layering 효과의 진동은 줄어들게 되는 것을 확인하였다.

표면에 대한 유체의 습윤성이 미끄러짐을 발생시키는데 중요한 요소가 된다. Fig. 5의 매끈한 표면에서 (a),(b)의 속도 분포를 비교한 결과를 보면 친수성 표면일 때 유체-고체 원자 사이의 강한 인력이 작용하여 표면에서 점착 경계조건을 유지하게 되는 반면 소수성표면일 때 경계 면에서 미끄러짐 현상이 일어남을 알 수 있다. 그래프에서 y축에 평행한 점선은 벽면을 의미하고 검은색 실선이 매끈한 표면에서의 결과 값이다.

평균속도는 소수성 표면이 친수성 표면보다 더 크게 나타났고 포물선 모양을 유지하였다. 이러한 것은 친수성 경계면에서 유동 저항이 더 크기 때문일 것이다.

Fig. 6의 매끈한 표면의 온도 그래프에서 온도 점프 현상이 발생하는 것을 관측할 수 있다. 유체 원자와 고체 원자 사이의 경계 면에서의 마찰에 의해 발생하는 열 때문에 벽면 근처에서 온도가 갑자기 증가하는 피크와 온도 미끄러짐이 나타난다.

소수성 표면일 때 온도의 미끄러짐이 더 증가하고 속도 그래프에서 최고 속도의 크기가 더 큰 것과 같이 온도 분포에서도 소수성 표면이 친수성 표면의 온도보다 더 높게 된다.

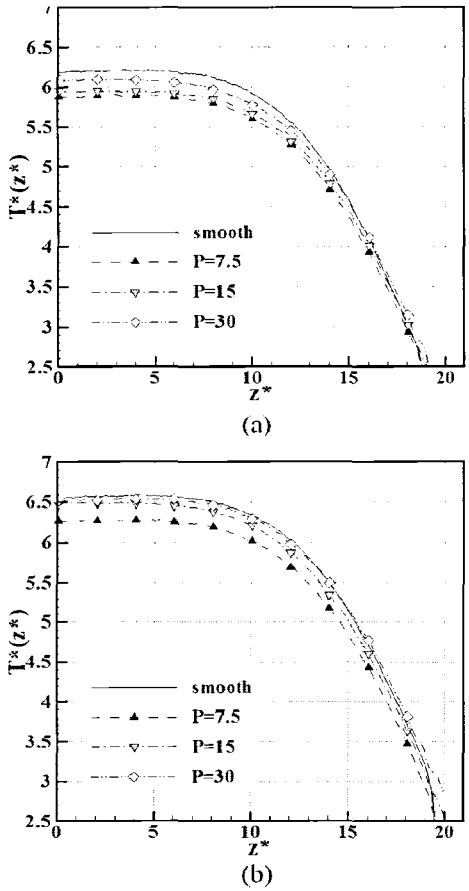

Fig. 6 Local temperature profiles for A=1.6
(a) Hydrophilic surface (b) Hydrophobic surface

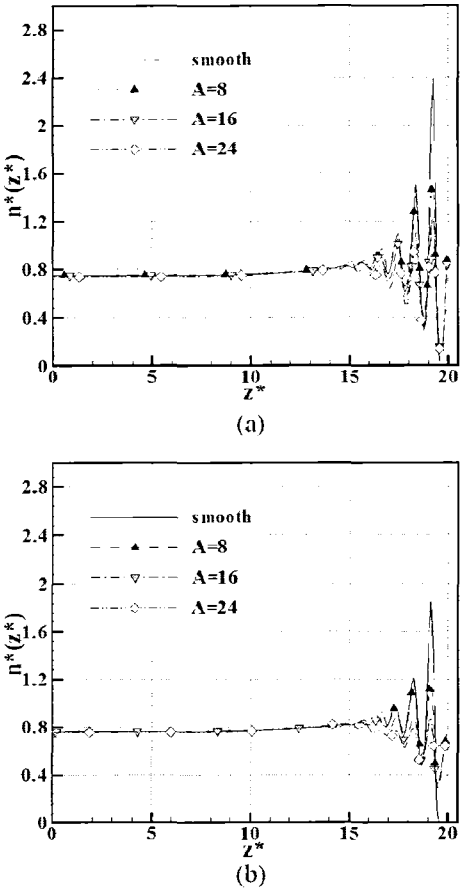

Fig. 7 Number density profiles for P=15
(a) Hydrophilic surface (b) Hydrophobic surface

3.2 표면 거칠기의 주기(P)에 따른 영향

표면 거칠기의 주기에 따른 영향을 보기 위해서 사인파 곡선의 진폭은 고정시키고 주기를 변화시키면서 유동 특성을 비교해보았다. 사인파 곡선의 진폭은 1.6σ으로 고정하고 주기를 30σ, 15σ, 7.5σ로 변화시켰다. 채널 너비의 비율로 나타내면 각각 1, 0.5, 0.25에 해당 된다.

Fig. 4의 밀도 분포를 살펴보면 습윤 조건에 상관없이 layering 효과가 줄어드는 것을 확인하였다. 특히 유체 원자와 고체 원자 사이의 경계 면에서의 밀도 크기는 주기가 작아질수록 작아졌다. 주기가 작아질수록 표면 거칠기가 증가하고 표면 구조 형태 때문에 고체 원자와 유체 원자 사이의 경계 면에는 유체 원자들의 접근이 쉽지 않게 되기 때문이다.

Fig. 5의 속도 그래프를 살펴보면 표면 거칠기가 변하여도 속도 분포는 2차원 포물선 형태를 유지하지만 주기가 줄어들수록 최대 속도의 크기가 작아진다. 특히 친수성 표면에서는 주기에 상관없이 점착 경계조건을 유지하지만 소수성 표면에서 유체와 고체 경계 면에서 주기가 짧을수록 미끄러짐이 감소하게 된다. 즉 표면 거칠기의 효과가 미끄러짐 경계조건에 영향을 미침을 나타낸다. 이러한 현상은 Fig. 7과 같이 표면 거칠기의 효과가 커질수록 유체 원자에 대한 벽면 고체 원자의 항력 저항이 더 커지므로 표면 효과가 더욱 크게 나타난다. 유체 원자의 진로가 방해되고 또한 벽면의 고체 원자와 접하는 접촉면이 더욱 크게 되어서 마찰력이 더 크게 된다. 따라서 유체 원자가 더욱 많은 고체 원자와 상호 작용하는 힘을 받게 되므로 미끄러짐이 감소하게 된다. 또한 소수성 표면일 때 거칠기 사이로 유체 원자가 정체되어 있으므로 유체 원자가 친수성 표면일 때 벽면의 고체 원자와 같은 역할을 하게 된다. 즉 친수성 표면일 때의 고체와 유체사이의 작용하는 강항 인력의 크기만큼 거친 표면 사이에 있는 유체 원자가 벽면의 고체 원자처럼 다른 유체 원자와의 인장력이 커지기 때문에 사인파 곡선의 주기가 짧아질수록 벽면에서의 미끄러짐이 줄어들게 된다. 표면 거칠기의 효과는 사인파 곡선의 주기가 줄어들수록 더욱 커지는 것을 알 수 있다.

Fig. 6의 온도 분포를 살펴보면 사인파 곡선의 주기가 짧아질수록 온도 점프 현상이 줄어드는 것을 확인하였다. 유체-고체 원자 사이의 인력이 더욱 커질수록 전도를 통해 유체의 viscous heat을 벽면으로 전달하여 제거할 수 있게 되기 때문이다.

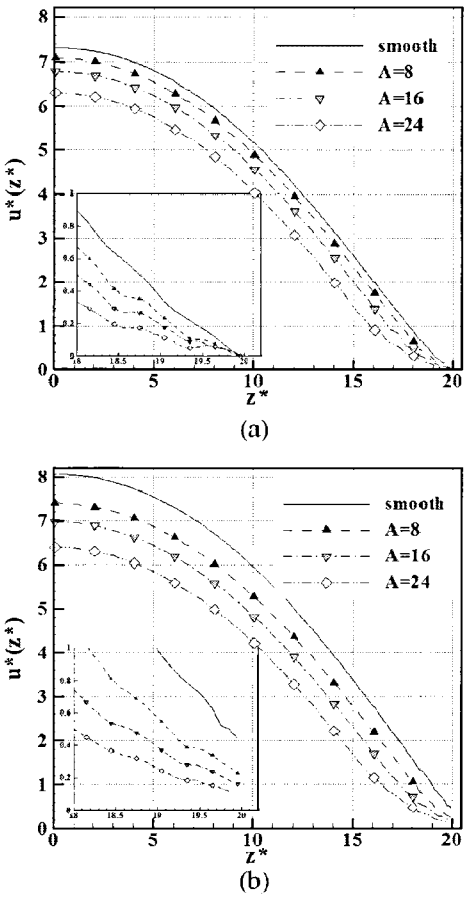

Fig. 8 Streaming velocity profiles for P=15
(a) Hydrophilic surface (b) Hydrophobic surface

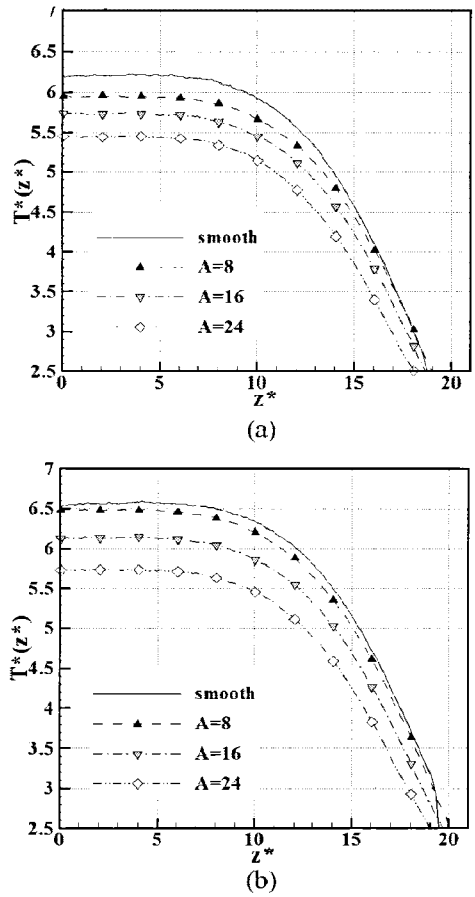

Fig. 9 Local temperature profiles for P=15
(a) Hydrophilic surface (b) Hydrophobic surface

3.3 표면 거칠기 진폭(A)에 따른 영향

표면 거칠기 진폭에 따른 영향을 보기 위해서 사인파 곡선의 주기는 15σ로 고정시키고 진폭 A를 1.6σ,3.2σ, 4.8σ로 변화시키면서 유동 특성을 살펴보았다. 진폭 높이와 채널 높이의 비를 각각 0.08, 0.16, 0.25로 하여 모사하였다. 사인파 곡선의 진폭이 커질수록 표면 거칠기의 높이가 커지므로 영향력이 증가하게 된다.

Fig. 7의 밀도 그래프를 살펴보면 진폭을 변화시킬 때 표면 습윤 조건에 상관없이 layering 효과가 줄어드는 것을 확인 할 수 있었다. 진폭이 커질수록 유체 원자와 고체 원자 사이의 경계 면에서 밀도가 줄어들게 된다. 표면 거칠기의 형상 때문에 매끈한 표면에서처럼 많은 유체 원자들이 접근할 수 없기 때문이다.

사인파 진폭이 커질수록 접촉 표면적이 넓어지고 유체 원자가 벽면의 고체원자에 작용하는 인력이 커지기 때문에 유동 저항이 증가한다. Fig. 8의 속도 분포에서 친수성 표면일 때는 점착 경계조건을 유지하지만 소수성 표면에서 발생되던 미끄러짐 현상이 감소하게 된다. 이러한 미끄러짐 경계조건은 주기를 짧게 할 때보다 진폭을 크게 할수록 표면 거칠기의 효과가 더욱 증대되어 더 많이 감소하는 것을 알 수 있었다.

Fig. 9의 온도 분포를 살펴보면 속도 그래프에서 소수성 표면일 때 최대 속도의 크기가 더 크듯이 벽면에서의 온도 점프 현상도 친수성 표면일 때보다 더욱 크게 나타났다. 또한 표면 거칠기의 진폭이 커질수록 속도가 줄어들고 미끄러짐 현상이 감소하는 것과 함께 온도 역시 감소하였다.

4. 결 론

비평형 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 나노 채널 내부의 Poiseuille 유동을 시뮬레이션 하였고 표면 습윤과, 표면 거칠기가 경계조건과 나노 유동에서 어떠한 영향을 미치는지에 대해서 연구하였다. 표면 습윤 효과를 조사하기 위해 친수성 표면과 소수성 표면의 조건을 적용시켜 살펴보았고 표면 거칠기 효과를 모델링 하기위해 원자 단위의 3차원 사인파로 모사하여 사인파 주기와 진폭에 대하여 시뮬레이션 하였다.

유체와 고체 경계 면에서의 현상은 표면 습윤에 의해 크게 영향을 받는다. 소수성 표면에서는 친수성 표면에서 보다 유동 저항이 더 작게 나타났고 고체와 유체 사이에 상호작용하는 인력이 약해지기 때문에 미끄럼 현상이 나타나는 것을 확

인하였고 고체와 유체 사이의 경계 면에 나노 거품, 공기층이 존재하는 것을 확인하였다.

유체와 고체 경계 면에서의 경계조건은 표면 거칠기에 크게 의존한다. 사인파의 진폭과 주기 값을 변화시켜 시뮬레이션을 수행한 결과 진폭이 커질수록, 주기가 짧아질수록 표면의 거칠기 효과가 증대한다. 표면의 거칠기 효과가 커질수록 유동의 항력 저항을 더 크게 만들고 또한 거친 표면의 돌기 사이에 유체 원자들이 더욱 정체하게 되어서 다른 유체 원자들과의 상호작용하는 인력이 커지게 되어 경계 면에서의 미끄러짐이 감소하게 된다. 그리고 주기가 짧아지는 것보다 진폭이 커질수록 표면 거칠기 효과가 크게 나타났다.

유동의 경계조건 및 유동 특성은 거친 표면의 나노 구조와 유체와 고체 경계 면에서의 표면의 습윤 조건에 영향을 받는다는 것을 수치적 시뮬레이션을 통해 알아보았다.

참고문헌

(1) Gad-el-Hak, 2002, "Flow physics in MEMS", The MEMS Handbook, Boca Raton, FL:CRC Press.

(2) Yingxi Zhu and Steve Granick, 2002, "Limits of the hydrodynamic no-slip boundary condition", Phys. Rev. Lett., Vol.88, pp. 106102.

(3) H.L. Zhao, C. Zhou, Y.X. Cai, and F.C. Zhang, 2008, "Nanostructure analysis of graded oxidation coated glass prepared by APCVD on-lin", Materials Letter, Vol.62, pp. 140~142.

(4) Chiara Neto, Drew R Evans, Elmar Bonaccurso, Hans-Jurgen Butt, and Vincent S J Craig, 2005, "Boundary slip in Newtonian liquids : a review of experimental studies", Rep. Prog. Phys. Vol.68, pp. 2859~2897.

(5) Jonathan S. Ellis and Michael Thompson, 2004, "Slip and coupling phenomena at the liquid-solid interface", Phys. Chem. Chem. Phys., Vol.6, pp. 4928~4938.

(6) Steve Granick, yincxi Zhu, and HyunJung Lee, 2003, "Slippery questions about complex fluids flowing past solids", Nature Materials, Vol.2, pp. 221~227.

(7) S. C. Yang, 2006, "Effects of surface roughness and interface wettability on nanoscale flow in a nanochannel", Microfluid nanofluid, Vol. 2, pp. 501~511.

(8) Cecile Cottin-Bizonne, Jean-Louis Barrat, Lyderic Bocquet and Elisabeth Charlaix, 2003, "Low-fricition flows of liquid at nanopatterned interfaces", Nat. Mater.t, Vol. 2, pp. 237~240.

(9) A. Jabbarzadeh, J.D. Atkinson, and R.I. Tanner, 2000, "Effect of the wall roughness on slip and rheological properties of hexadecane in molecular dynamics simulation of Couette shear flow between two sinusoidal walls", Phys. Rev. E, Vol.61, pp. 690~699.

(10) Bing-Yang Cao, Min Chen, and Zeng-Yuan Guo, 2006, "Effect of surface roughness on gas flow in microchannels by molecular dynamics simulation", Int. J. Eng. Sci., Vol.44, pp. 927~937.

(11) Gan Mo and Franz Rosenberger, 1990, "Molecular-dynamics simulation of flow in a two-dimensional channel with atomically rough walls", Phys. Rev. A, Vol.42, pp. 4688~4692.

(12) M.P. Allen, D.J. Tildesley, 1987, "Computer simulation of liquids",Oxford University Press.

(13) Norio Ohtomo, Yukio Tanaka, 1987, "Liquid Argon : Molecular Dynamics Calculations for the dynamic properties", J. Phys. Soc. Jap., Vol.56, pp. 2801~2813.

(14) Jean-Louis Barrat and Lyderic Bocquet, 1999, "Large slip effect at a nonwetting fluid-solid interface", Phys. Rev. Lett., Vol. 82, No. 23, pp. 4671~4674.

(15) Elmar Bonaccurso, Hans-Jurgen Butt, and Vincent S.J. Craig, 2003, "Surface Roughness and Hydrodynamic Boundary Slip of a Newtonian Fluid in a Completely Wetting System", Phys. Rev. Lett., Vol.90, pp. 144501.

(16) J.G. Powles, S. Murad, and P.V. Ravi, 1992, "A new model for permable micropores", Chem. Phys. Lett., Vol.188, pp. 21~24.

(17) Denis J. Evans, William G. Hoover, Bruce H. Failor, Bill Moran, and Anthony J.C. Ladd, 1983, "Nonequilibrium molecular dynamics via Gauss's principle of least constraint", Phys. Rev. A, Vol.28, pp. 1016~1021.

(18) Martin W. Tysanner and Alejandro L. Garcia, 2004, "Measurement bias of fluid velocity in molecular simulations", J. Comp. Phys., Vol.196, pp. 173~183.

(19) B.D. Todd and Denis J. Evans, 1997, "Temperature profile for Poiscuille flow", Phys. Rev. E, Vol.55, pp. 2800~2807.

(20) Roland Steitz, Thomas Gutberlet, Thomas Hauss, Beate Klosgen, Rumen Krastev, Sebastian Schemmel, Adam C. Simonsen, and Gerhard H. Findenegg, 2003, "nanobubbles and Their Precursor Layer at the Interface of Water Against a Hydrophobic Substrate", Langmuir, Vol.19, pp. 2409~2418.

(21) James W.G. Tyrrell and Phil Attard, 2001, "Images of nanobubbles on Hydrophobic Surfaces and Their Interactions", Phys. Rev. Lett., Vol.87, pp. 176104.

(22) S. Iarlori, P. Carnevali, F. Ercolessi, and E. Tosatti, 1989, "Dynamics of a Liquid-Metal Surface", Europhys. Lett., 10, pp. 329~334.