

나노입자를 포함한 미세액적의 충돌에 대한 수치적 연구[§]

노 상 은* · 손 기 현**

* 서강대학교 기계공학과

Numerical Study of Impact of Microdroplet Containing Nanoparticles

Sangeun Roh* and Gihun Son**

* Dept. of Mechanical Engineering, Sogang Univ.

(Received December 22, 2011 ; Revised March 8, 2012 ; Accepted March 12, 2012)

Key Words: Droplet(액적), Level-Set(레벨셋 방법), Nanoparticle(나노입자), Species Transport Equation(농도장 방정식), Thermal Diffusion(열 확산)

초록: 충돌, 퍼짐 및 수축을 포함한 나노입자 혼합 액적의 거동에 대한 수치모사를 수행하였다. 기체-액체 상경계면은 벽면에서의 접촉각 이력현상을 포함한 레벨셋 방법을 이용하여 해석하였다. 액적 내부의 나노입자 분포를 해석하기 위하여 물질의 열확산을 반영한 농도 방정식을 해석에 포함하였다. 수치해석 결과로부터 나노 입자의 분포는 온도의 불균일 분포에 크게 영향을 받는 것을 확인하였다. 나노입자의 농도 집중도에 의한 표면 장력 및 접촉각변화 효과에 대한 연구를 수행하였다.

Abstract: The impact, spreading and recoil processes of a nanoparticle-laden droplet impacting on a horizontal solid surface are numerically investigated by solving the conservation equations for mass, momentum, energy and mass fraction. The liquid-air interface is tracked using a level-set method that is modified to include the effect of contact angle hysteresis at the wall. The species transport equation including a thermal diffusion term is additionally solved to determine the nanoparticle distribution in the droplet. The effect of nanoparticle concentration and contact angle are also studied.

- 기호설명 -

- D : 액적 반경
- D_l : 물질 확산계수
- h : 격자 간격
- n : 법선방향 단위벡터
- p : 압력
- r : 액적 반지름
- T : 온도
- t : 시간
- u : 속도벡터
- Y : 질량분율

- κ : 상경계면의 곡률
- μ : 점성계수
- ρ : 밀도
- σ : 표면장력
- τ : 반복계산 단계
- ϕ : 액체-기체 상경계면으로부터 거리함수

하첨자

- b : 기저유체
- g, l : 기체, 액체
- o : 초기 조건
- p : 나노입자

그리스문자

- α : 계단함수
- θ : 액적과 벽면의 접촉각

1. 서론

액적-벽면 충돌 현상은 잉크젯 프린팅, 마이크로렌즈 제작, 세라믹 기관 제조, 태양전지의 코팅 등 많은 공학분야에 응용되고 있다. 특히 잉크젯 프린팅을 이용한 마이크로 라인 (또는 박막 등의

§ 이 논문은 대한기계학회 2011년도 추계학술대회 (2011. 11. 2.-4., EXCO) 발표논문임

† Corresponding Author, gihun.sogang.ac.kr

© 2012 The Korean Society of Mechanical Engineers

형상) 제조공정에서는 액적의 충돌 및 퍼짐 현상에 대한 정확한 예측이 잉크젯 응용공정의 설계에 매우 중요하다.

근래에는 잉크젯 프린팅의 다양한 활용법 중에서도, 라인으로 형성될 나노입자를 액적에 포함하여 분사하는 기술이 각광 받고 있다. 특히 일반적으로 알려진 금의 녹는점은 1063°C인 것에 비해, 1~2nm 크기의 금 나노입자는 150~250°C의 녹는점을 갖는 성질⁽¹⁾을 이용하여, 고성능 도선을 제작하기 위한 연구⁽²⁾가 수행되고 있다. 또한 유연전기소자(Flexible Electronics)를 제작하기 위해 기존의 진공증착과 포토 리소그래피 기법 등 실리콘 위주의 집적회로 공정을 탈피, 나노입자를 레이저 소결기술에 이용, 전자인쇄공정에 사용하고자 하는 연구⁽³⁾가 진행되고 있다.

액적-벽면 충돌에서 일어나는 액적의 퍼짐 및 수축 등의 복잡한 현상을 예측하기 위한 수치기법을 개발하려는 연구가 지속적으로 수행되고 있다. Harlow와 Shannon⁽⁴⁾이 MAC (Marker-and-Cell) 기법을 액적충돌의 해석에 적용한 이후 VOF(Volume-of-Fluid) 방법,^(5,6) 유한요소법,^(7,8) Level-Set 방법⁽⁹⁾ 등의 수치기법을 이용하여 액적 거동을 예측한 연구가 보고되고 있다. 하지만 액적-벽면 충돌에 대한 기존 연구의 대부분은 순수 물질로 구성된 액적에 대한 경우이며, 나노입자를 포함한 액적의 충돌거동에 대한 연구는 아직까지 상당히 미흡한 수준이다.

Nicholas⁽¹⁰⁾는 용매와 같은 밀도를 가진 고체입자가 포함된 액적의 충돌에 대한 실험을 수행하였다. 그들은 최대 760 μm 크기의 입자를 이용하여, 입자계의 점도 증가기법을 통해 $Re < 800$ 이하의 범위에서 퍼짐정도가 $Re^{1/4}$ 에 비례하는 것을 확인하였다. Dietzel 등⁽¹¹⁾은 Lagrangian 방법에 실험데이터를 포함한 수치기법을 이용하여 직경 10nm의 gold 나노입자를 질량분율 30% 포함한 95 μm 직경의 toluene 액적에 대한 충돌거동을 연구하였다. 이들은 나노입자 농도에 따른 용매의 점성 증가 효과와, 점성증가가 표면장력의 증가에 미치는 영향을 반영하여 표면장력 실험과 수치해석을 수행하였고, 액적의 벽면 충돌 후 수축과정에서 액적 내부의 순환유동으로 인해 나노입자가 액적의 바닥부분에 집중되는 경향을 보고하였다. Jeong 등⁽¹²⁾은 2차원 모델의 Lagrangian 기법을 이용하여 14 μm 크기의 미세입자를 포함

한 액적에 대한 계산을 수행하였다. 그러나 실제 잉크젯 등에 적용되는 nm 크기의 입자를 포함한 유체의 거동에 대한 연구는 아직까지 부족한 실정이다.

최근 들어, nm 크기의 나노입자를 포함한 유체 시스템에 대한 열전달 특성 및 유체 시스템 내부의 변화를 분석하기 위한 연구가 진행되고 있다. Bourgiorno 등⁽¹³⁾은 나노입자를 포함한 유체 시스템의 유동을 해석하기 위해 나노입자의 분포를 물질전달에 의한 농도장 방정식을 이용하여 분석하는 방법을 제시하였다. 유체-나노입자 혼합물의 밀도, 점도, 비열, 열전도도 등의 물성치를 나노입자 농도를 이용하여 보정하고, 나노입자의 Brownian 운동과 열 확산 효과를 포함하여 나노입자의 분포를 해석하였다. Gharagozloo 등⁽¹⁴⁾은 40nm 크기의 나노입자를 포함한 DI water에 대한 실험 및 수치해석 연구를 수행하여 나노입자의 응집 현상 및 물성치 변화에 대한 연구를 수행하였다. 이들은 40nm 크기의 알루미늄 입자를 포함한 폭 0.5mm의 채널에 온도 구배를 설정하여 나노입자의 농도구배증가는 온도구배의 감소에 비례하는 것을 확인 하였다. Fisher 등⁽¹⁵⁾은 micro channel를 수치 모사하여 나노 입자가 포함되었을 때의 열전달 특성을 비교였다. 그들은 연구에서 내부 온도장과 농도장을 비교, 온도가 낮은 부분에서 입자의 농도가 짙어지는 것을 확인 하였다.

본 연구에서는 나노입자를 포함한 미세액적의 벽면충돌 현상을 해석할 수 있는 수치기법을 개발하였다. 미세라인 형성에서의 액적충돌 거동에 대한 기존의 연구⁽¹⁶⁾에서 개발된 Level-Set(LS) 방법과 나노입자의 분포를 위한 Bourgiorno⁽¹³⁾의 농도장 방정식을 결합하였다. 이 수치기법을 이용하여 초기 액적의 크기, 벽면온도, 나노입자 농도 등에 따른 나노입자의 분포와 액적거동에 대한 영향을 해석하였다.

2. 수치해석 방법

2.1 지배방정식

Fig. 1과 같은 액적-벽면 충돌에서의 액적거동을 축대칭, 비압축성, 층류 조건하에서 해석하였다. 나노입자를 포함하지 않는 경우, 기상-액상 영역에 동시에 적용할 수 있는 질량, 운동량, 에너지 보존 및 거리함수로 정의된 LS 함수(ϕ)의 지배방정식은 다음과 같다.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p - \sigma \kappa \nabla \alpha + \nabla \cdot \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (2)$$

$$\frac{D\phi}{Dt} = 0 \quad (3)$$

여기서,

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \\ \alpha &= 1 \quad \text{if } \phi > 0 \\ &= 0 \quad \text{if } \phi \leq 0 \\ \kappa &= \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \\ \rho &= \rho_g(1-F) + \rho_l F \\ \mu^{-1} &= \mu_g^{-1}(1-F) + \mu_l^{-1} F \end{aligned} \quad (4)$$

위의 식에서 α 는 액상-기상을 구분하는 불연속적인 계단 함수이며, 상경계면의 곡률(κ)은 거리함수로 정의된 연속적인 LS 함수로부터 계산된다. 밀도, 점도, 열전도의 계산에 사용된 F 는 효과적인 물성치 계산을 위하여 다음과 같이 도입하였다.

$$\begin{aligned} F_\phi &= 1 \quad \text{if } H_\phi(\phi_A) = H_\phi(\phi_B) = 1 \\ &= 0 \quad \text{if } H_\phi(\phi_A) = H_\phi(\phi_B) = 0 \\ &= \frac{\max(\phi_A, \phi_B)}{\max(\phi_A, \phi_B) - \min(\phi_A, \phi_B)} \text{ otherwise} \end{aligned} \quad (5)$$

여기서 하첨자 A, B는 계산지점에 근접한 두 격자점을 나타낸다.

상경계면 ($\phi = 0$)은 식 (3)에 의해 결정되지만 α 와 κ 를 정확하게 계산하기 위해서는 LS 함수를 거리함수($|\nabla \phi| = 1$)가 되도록 식 (6)을 사용하여 보정하였다.

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = S(1 - |\nabla \phi|) \quad (6)$$

여기서

$$\begin{aligned} S &= 0 \quad \text{if } |\phi_o| < h/2 \\ &= \frac{\phi_o}{\sqrt{\phi_o^2 + h^2}} \quad \text{otherwise} \end{aligned} \quad (7)$$

ϕ_o 은 식 (3)의 해이며, τ 는 식 (6)의 우변이 상경계면 주위에서 0이 될 때까지 계산하는 반복단계를 의미한다. 식 (6)을 푸는 동안 각 상의 체적이 보존하지 않는 경향이 나타나며, 이를 줄이기 위해 부호 함수를 식 (7)과 같이 수정하였다.

나노입자를 포함한 액적의 해석에서 나노입자가 액적 내부에만 존재하는 것으로 가정하였다. 액적은 기저액체와 나노입자로 구성되며 나노입자의 질량 확산 유속은 다음과 같이 표현할 수 있다.⁽¹⁰⁾

$$\mathbf{j}_p = -\rho_l D_l \nabla Y_p \quad (8)$$

여기서 Y_p 는 나노입자의 질량분율, D_l 는 물질 확산계수, D_{lT} 는 열 확산계수를 나타내며, 나노입자의 경우 다음과 같이 구할 수 있다.

$$D_l = \frac{k_B T}{3\pi\mu_b d_p} \quad (9)$$

여기서 하첨자 b, p는 액상에서의 기저유체와 나노입자를 나타내며, k_B Boltzman 상수이다.

나노입자의 농도변화 효과를 포함하면 액상 ($\phi > 0$)에서의 나노입자 질량분율, 전체 질량 및 운동량 보존식을 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\rho_l \frac{DY_p}{Dt} = \nabla \cdot \rho_l D_l \nabla Y_p \quad (10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \rho_l D_l Y_p \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_p} \right) \quad (11)$$

나노입자 농도에 따른 액적의 밀도는 나노입자에 용매의 질량분율 함수로 표현하였고, 점도는 나노유체의 물성치 근사식으로 널리 알려진 Einstein식⁽¹⁷⁾을 사용하여 산출하였다.

$$\begin{aligned} \rho_l^{-1} &= \rho_b^{-1}(1 - Y_p) + \rho_p^{-1} Y_p \\ \mu_l &= \mu_b \left(1 + 2.5 \frac{Y_p}{\rho_p} \rho_l \right) \end{aligned} \quad (12)$$

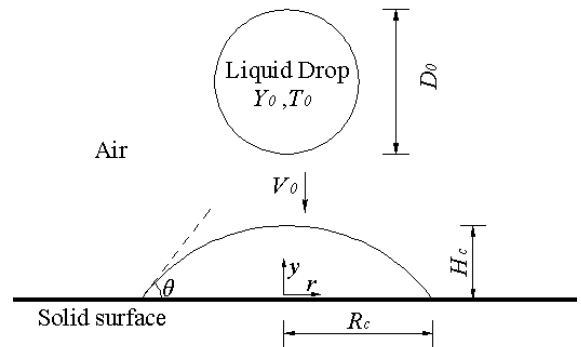


Fig. 1 Schematic of drop impact on a horizontal wall

2.2 경계조건

· 대칭면

$$u = \frac{\partial v}{\partial r} = \frac{\partial Y_p}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} = 0 \quad (13)$$

· 바닥 벽면

$$u = v = 0, \frac{\partial \phi}{\partial y} = \cos \theta$$

$$\frac{\partial Y_p}{\partial y} = -\frac{D_{lT}}{D_l} \frac{\partial \ln T}{\partial y} \quad (14)$$

· 윗면

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial Y_p}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (15)$$

· 상경계면($\phi = 0$)

$$\nabla Y_p \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (16)$$

식 (14)에서 θ 는 Fig. 1과 같이 액체-기체 상경계면이 고체면과 만나서 이루는 접촉각이며, 접촉점의 이동방향에 따라 접촉각이 퍼짐접촉각(θ_a)과 수축접촉각(θ_r) 사이에서 변동하는 접촉각 이력(contact angle hysteresis) 모델⁽¹⁶⁾을 적용하였다. 접촉각 이력 모델에서는 접촉각이 $\theta_r < \theta < \theta_a$ 인 상태에서는 접점이 정지되어 있고 그 범위를 벗어나는 경우에는 접촉점이 θ_a 또는 θ_r 을 유지하면서 이동하는 조건을 사용하였다. 접촉각 이력 모델을 검증하기 위해 3.1 절에 Lim 등⁽¹⁸⁾의 실험 데이터와 비교하였다.

식 (14)와 (16)에서 표현된 나노입자 농도에 대한 조건은 경계면에서 나노입자의 질량확산 유속이 “영” 즉 $\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0$ 을 나타낸다.

2.3 나노입자 포함모델 해석

나노입자를 포함한 액체는 나노입자와 액체분자간 상호작용으로 인해 점도 및 표면장력이 달라질 것으로 예상할 수 있다. 그러나 점도, 표면장력, 접촉각 모델링에 대해서는 아직까지 일반적으로 적용 가능한 정확한 방법이 제시되지 않고 있다. 해석 모델의 불확실성을 최소화하기 위해, 본 연구에서는 Einstein식⁽¹⁷⁾외에도 실험과 수치해석 모델을 비교하여 연구를 수행한 Dietzel⁽¹¹⁾의 논문에 인용된 점성모델과 표면장력 증가 모

델을 사용하여 결과를 비교하였다.

$$\mu_l = \mu_b \left(1 - \frac{1.875 Y_p \rho_l / \rho_p}{0.15}\right)^{-2} \quad (17)$$

$$\sigma_l = \sigma_b \frac{\mu_l}{\mu_b} \quad (18)$$

나노입자를 포함한 액적은 실제 표면장력이 변하기 때문에 액적-기체, 액적-고체면에서 힘의 평형 조건이 달라지면서 퍼짐-수축 과정의 접촉각이 변화하게 된다. Dietzel⁽¹¹⁾의 연구에서는 실험을 통해 나노입자를 액적에 포함할 경우 접촉각의 크기가 증가하는 것을 확인하였고, 접촉각의 data를 수치해석에 반영하여 해석을 수행하였다. 그러나 직접 접촉각의 변화를 예측하기에는 한계가 있으므로 임의로 접촉각을 변화시켜 액적의 거동을 계산할 필요가 있다. Carey⁽¹⁹⁾는 액적의 접촉각을 액체-기체와 고체-기체면 표면장력간의 관계식으로 나타내었다. 본 연구에서는 나노입자의 첨가는 액적의 경계면 에너지와, 고체-기체 접촉각의 변화 효과에 영향을 주지 않는다고 가정하여 다음과 같이 순수한 물로 구성된 액적의 접촉각과 나노입자가 포함된 액적의 관계식을 수립하였다.

$$\frac{(\cos \theta_a + 1)}{(\cos \theta_a + 1)_{ref}} = \left(\frac{\sigma_{lg,ref}}{\sigma_{lg}}\right)^{1/2} \quad (19)$$

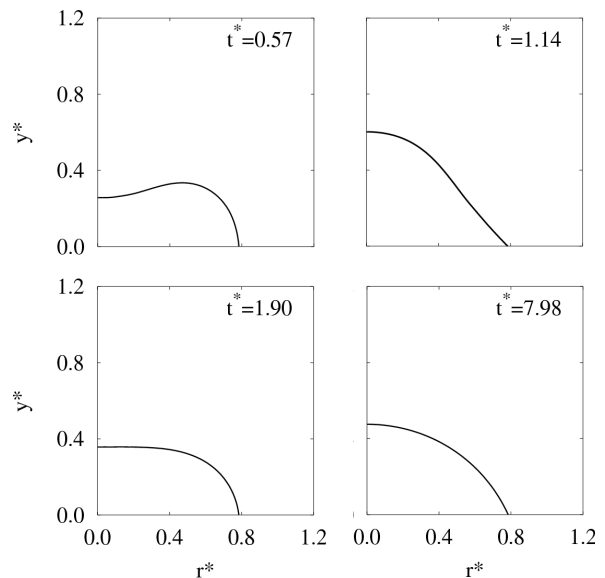


Fig. 2 Deformation of pure water droplet

본 연구에서는 나노입자 첨가가 표면장력 및 접촉각의 변화에 미치는 영향과, 충돌거동의 변화 양상을 확인하기 위하여 위 식을 이용하였다.

3. 계산결과 및 검토

3.1 순수 액적의 거동

우선 나노입자가 포함되지 않은 순수 미세액적의 벽면 충돌현상에 대한 해석을 수행하였다. 참고문헌⁽²⁰⁾에 보고된 액적의 초기 직경(D_0) $48\ \mu\text{m}$, 초기 충돌속도(V_0) 1.9m/s 인 경우에 대해 해석을 수행하였다. Fig. 2는 벽면 충돌 후 시간에 따른 액적의 거동을 나타낸다. 길이와 시간 변수는 액적의 초기조건을 이용하여 다음과 같이 무차원화하였다.

$$r^* = \frac{r}{D_0}, \quad y^* = \frac{y}{D_0}, \quad t^* = \frac{V_0 t}{D_0}$$

작동 유체의 물성치는 충돌 현상에 큰 영향을 미친다. 액적-벽면 충돌 초기에는 관성력에 의해

액적이 벽면을 따라 퍼지는 모습을 볼 수 있다. 액적의 반지름은 액적의 운동량이 표면장력과 점성의 마찰력에 의해 다시 감소하여, 이후 퍼짐과 수축을 반복하다 시간이 지남에 따라 정지되는 모습을 나타낸다. Fig. 3은 시간에 따른 액적의 퍼짐반경($R_c^* = R_c/D_0$)과 중심부($r=0$)에서의 액적의 높이 변화를 Lim 등⁽²⁰⁾의 실험 결과와 비교하여 나타낸 것이다. 해석결과와 실험결과는 대체적으로 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 두 결과의 차이는 초기 충돌 이후의 퍼짐과 수축 시점에서 발생하며, 이는 접촉각 모델과 실제 현상차이에서 기인되는 것으로 추측된다.

3.2 나노입자를 포함한 액적 거동

3.2.1 밀도 증가 효과

나노입자 첨가에 의한 액적의 거동 및 충돌에 따른 나노입자의 농도 변화를 확인하기 위하여 액적 내부의 나노입자 초기 질량분율을 $Y_0 = 0.3$ 로 설정하여 계산을 수행하였다. 나노입자는 물에 비해 약 20배의 밀도를 갖기 때문에 나노입자가 첨가된 액적의 밀도는 크게 증가한다. Fig. 4

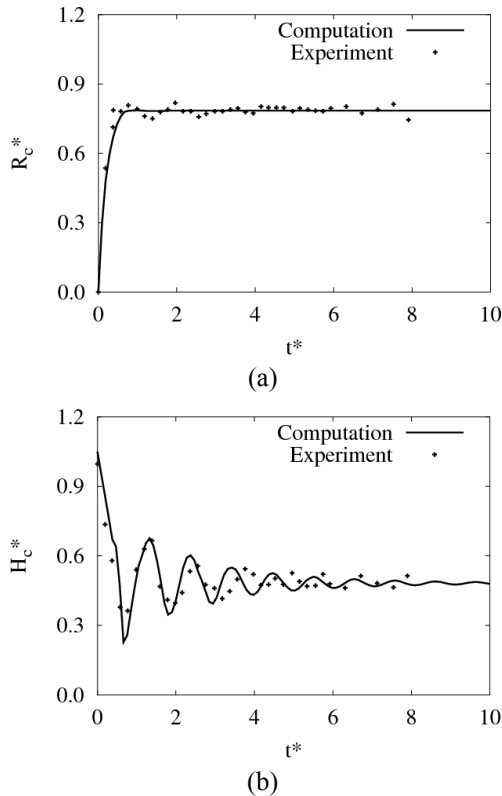


Fig. 3 Comparison of numerical prediction with experimental of pure water: (a) droplet contact diameter and (b) droplet height at $r^*=0$

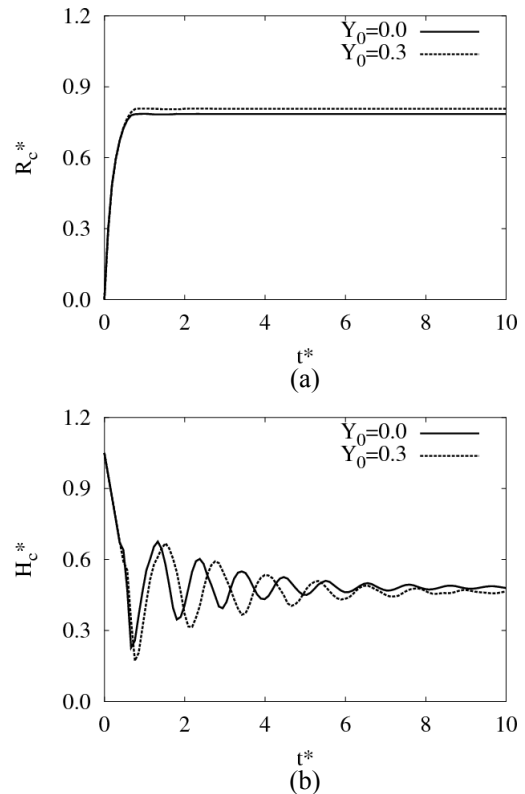


Fig. 4 Effect of mass fraction on droplet with (a) spread radius and (b) height

는 나노입자를 포함한 액적의 충돌 거동을 순수 액적의 충돌거동과 비교하여 나타낸다. 나노입자가 포함되지 않은 경우와 일정 비율로 포함된 각 경우에 대한 Re수는 각각 91.2, 119이고, 최대 퍼짐 반경 R_c^* 는 각각 0.785, 0.807로 계산 되었다. 나노입자를 포함하는 액적은 액적 밀도 증가로 인해 관성력이 증가하기 때문에 액적의 퍼짐이 증가하는 형태로 영향을 준 것으로 보인다.

3.2.2 점성 및 표면장력 효과

앞서 언급 했듯이, 나노입자 첨가가 액적의 물성치 변경에 미치는 영향을 정확히 분석한 연구가 부족하다. 균일한 초기 질량분율 Y_0 를 갖는 액적에 대해 Einstein⁽¹⁷⁾ 식을 이용하여 점도를 예측할 경우 약 6%의 점성 증가 효과가 예상되는데 비해 Dietzel 등⁽¹¹⁾의 논문에서 인용된 식을 사용할 경우 같은 농도에 대해 88%의 점도 증가 효과가 예측된다. 또한 Dietzel 등⁽¹¹⁾의 연구에서는 표면장력 역시 점도의 증가비에 비례하여 증가하는 것으로 나타났다. Fig. 5는 순수한 액적에 대한 충돌 거동과(a)와 나노입자를 포함한 액적에

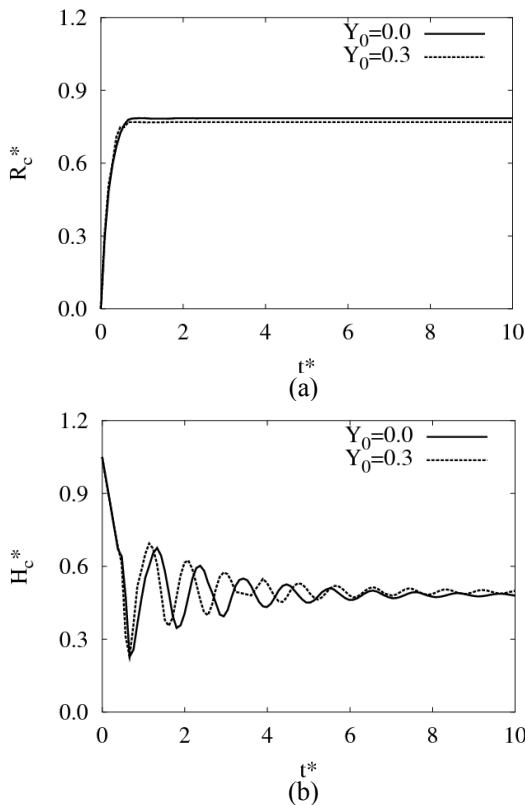


Fig. 5 Droplet deformation predicted from Dietzel et al's model: (a) droplet contact diameter and (b) droplet height at $r^*=0$

대해 Dietzel 등⁽¹¹⁾의 논문에 제시된 점성식과 표면장력 증가식을 반영한 결과(b)를 비교하여 나타낸다. 표면장력 및 점도 증가 효과를 계산에 반영할 경우 Re수는 약 63.1으로 감소하며 액적의 퍼짐을 약 2% 억제하는 것을 확인할 수 있었다. 금 나노입자가 다른 나노입자에 비해 상대적으로 밀도가 크다는 사실에서, 나노입자를 포함한 액적의 퍼짐 현상은 밀도의 증가보다는 표면장력 및 점도의 증가에 더 큰 영향을 받는다는 것을 알 수 있다.

3.2.3 접촉각 변화 효과

Fig. 6은 점성식과 표면장력 증가식을 반영한 후, 액적의 퍼짐 접촉각(θ_w)의 크기를 식 (19)에서 계산된 값 105° 로 변화시켜 액적의 충돌 거동을 확인한 결과이다. Fig. 7은 액적의 퍼짐 높이와 퍼짐 반경을 비교한 결과이다. 액적의 퍼짐 접촉각이 증가할수록 상경계면-고체면 접점에서 액적이 확장하기 위한 각도에 도달하기 어렵기 때문에 퍼짐반경은 감소하였다. 액적의 퍼짐반경은 약 10% 감소하였고 Fig. 5의 결과보다 더 큰 것을 확인할 수 있었다. 계산에서 이용한 순수한 물과 나노입자를 첨가한 액적의 $Re^{1/4}$ 비율은 0.91으로, 계산으로 얻어진 퍼짐반경의 감소비와 상당히 일치하는 것을 확인하였다. 이는 앞서 언급한 Nicolas⁽¹⁰⁾의 연구와 비슷한 결과임을 알 수 있다. 따라서 퍼짐 접촉각 변화를 반영하여 해석하는 것은 나노액적의 충돌 거동을 정확하게 예

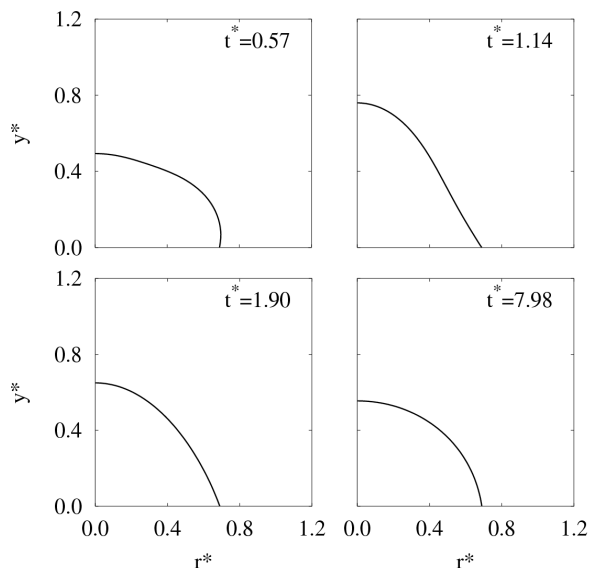


Fig. 6 Droplet deformation based modified contact adhesion angle

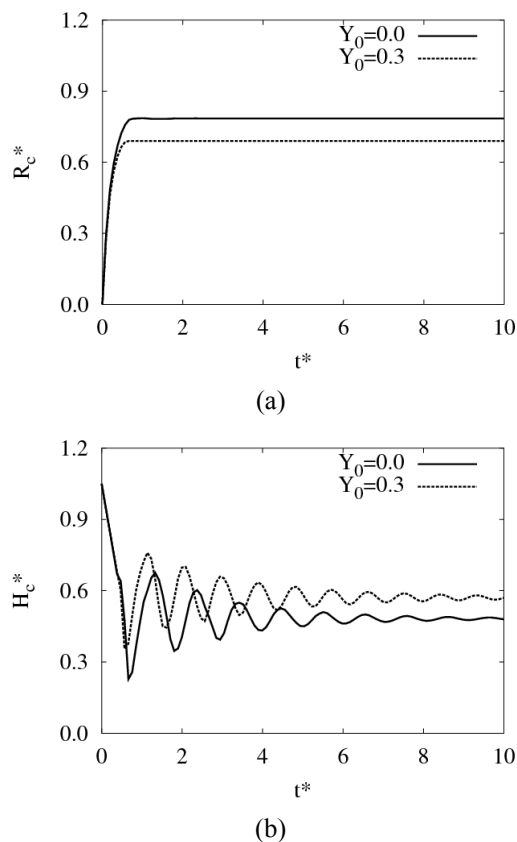


Fig. 7 Effect of modified contact angle on droplet deformation: (a) droplet contact diameter and (b) droplet height at $r^*=0$

측하기 위하여 중요하다는 것을 알 수 있다.

3.3 나노입자 초기 분포에 따른 액적 거동

잉크젯이나 마이크로 제조 공정 등에서는 용매 내부의 나노입자를 일정하게 유지하는 것이 중요하다. 그러나 침전이나 여러 가지 원인 등에 의해서 실제 내부의 나노입자를 균일하게 혼합하는 것은 불가능에 가깝다고 할 수 있다. 액적에 포함된 나노입자의 분포가 균일하지 않을 경우, 확산 현상에 의해 농도분포는 점차 균일화된다. 그러나 나노입자의 확산계수는 매우 작은 편이기 때문에, 액적 내부의 나노입자가 균일하게 퍼지는 데에는 적지 않은 시간이 소모되는 것을 예상할 수 있다. 따라서 불균일한 농도의 나노입자를 포함하는 액적의 거동을 예측하는 것은 실제 제조 공정에 있어서 반드시 필요한 과정이다.

초기 반지름 r_0 의 크기를 갖는 액적에 대하여 $1/2$ 부피의 갖는 액적의 반지름 r' 을 기준으로 하여 r' 이내에 나노입자를 집중 배치하는 경우를

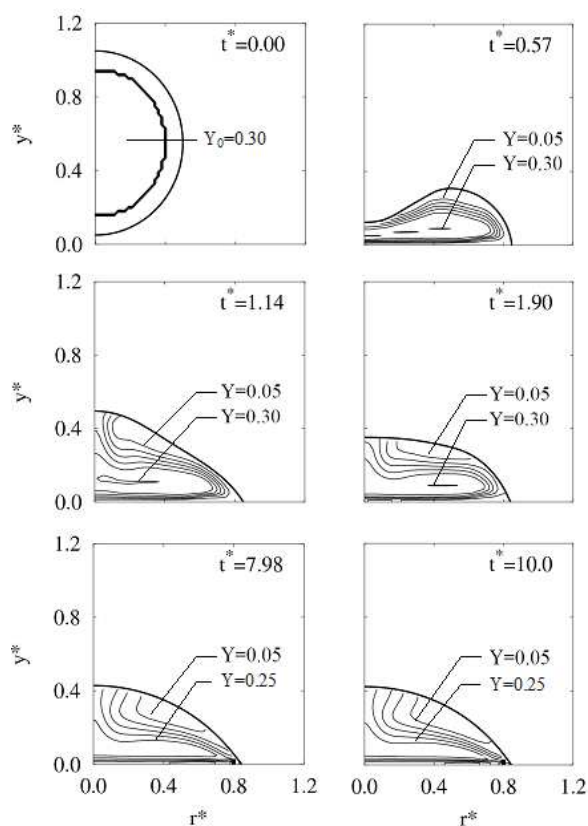


Fig. 8 Droplet deformation and nanoparticle distribution for $Y_0=0.3$ $\theta_a=140^\circ$ with non-uniform nanoparticle distribution

수치해석 하였다. Fig. 8은 시간에 따른 액적의 거동과 나노입자의 분포를 나타낸다. 나노입자 초기 질량분율은 $Y_0 = 0.3$ 이고 시간에 따른 농도 분포를 0.05 간격으로 나타내었다. 액적 충돌 후 농도가 낮은 상경계면과 바닥면 방향으로 확산 현상이 진행되는 것을 확인할 수 있지만, 완전한 균일화가 진행되지 않아 바닥면에서는 입자가 미처 확산되지 못하여 농도가 낮은 부분이 남아 있는 것을 볼 수 있다. 반면에 액적의 중심부에서는 충돌 직후 변위가 급격하게 낮아진 후 회복되는 과정에서 나노입자의 확산을 유도하는 것을 확인할 수 있다. 따라서 나노입자를 특정 위치에 부착시키기 위해서는 초기 농도분포 설정이 중요한 것을 알 수 있다. Fig. 2, 6과 8을 통해 액적의 거동을 비교 했을 때, 나노 입자가 액적의 중간부분에만 포함된 경우의 거동은 나노입자가 포함되지 않은 경우와 유사하게 나타나는 것을 확인할 수 있다. 그 이유는 충돌단계에서 상경계면과 바닥면 부분에는 나노입자가 미처 확산되지

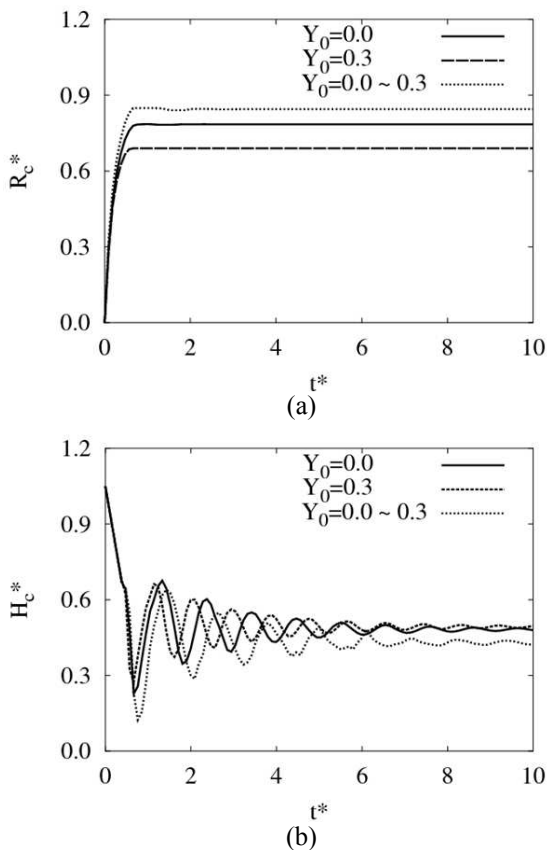


Fig. 9 Effect of nonparticle distribution on droplet deformation: (a) droplet contact diameter and (b) droplet height at $r^*=0$

못했기 때문에 접촉각 및 표면장력 증가가 반영되지 않았다는 점에서 찾을 수 있다. Fig. 9는 액적 거동을 최대 퍼짐반경과 중심부 높이에 대해 나타낸 것이다. 액적의 퍼짐 현상은 나노입자가 부분 집중된 경우가 가장 큰 경우인 것을 확인할 수 있다. 나노 입자가 부분 집중된 경우 앞에서 언급한 것처럼 표면 장력 및 접촉각 변화로 인한 효과는 없지만, 액적의 평균 밀도는 증가하기 때문에 퍼짐의 정도가 보다 큰 것을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 LS 방법을 기반으로 하여 농도 방정식을 고려하는 알고리즘을 추가한 수치기법을 개발하고, 나노입자를 포함한 액적의 충돌거동을 해석하였다. 농도 방정식은 나노입자의 물질 확산과 열확산 조건을 반영하였고, 기존에 보고된 실험식을 이용하여 나노입자의 농도에 따라

액적의 밀도와 점도, 표면장력 등의 물성치가 변화하도록 하였다. 순수한 액적의 충돌에 대한 계산 결과는 참고 문헌의 실험 결과와 잘 일치하는 것을 확인하였다. 나노입자를 포함한 액적의 거동을 해석하기 위해서 표면장력과 접촉각의 변화 경향을 참조하였고 나노입자 첨가로 인한 표면장력 증가 및 퍼짐 접촉각의 증가는 액적의 퍼짐 반경을 감소시키는데 영향을 주는 것을 확인하였다. 액적 내부의 나노입자가 불균일하게 분포한 경우의 거동을 확인하기 위해 액적의 일정 부분에만 나노입자를 집중시켜 수치해석을 수행하였다. 연구 결과로부터 나노입자가 불균일하게 분포할 경우 액적의 질량은 증가하는 반면에 표면장력효과 및 접촉각 증가 효과가 나타나지 않아 액적의 거동에 영향을 줄 수 있다는 것을 확인할 수 있었다. 특히 액적의 바닥면에 나노입자를 접촉을 지연시켜야 할 경우, 나노입자의 확산 속도가 충분히 낮아 나노입자를 불균일하게 분포시키는 것이 효과가 있음을 알 수 있다.

후 기

이 논문은 2009년도 교육과학기술부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받은 ‘다중현상 CFD 연구센터(ERC)’의 과제로 수행된 연구임(No.20090083510).

참고문헌

- (1) Buffat, P. A. and Borel, J. P., 1976, "Size Effect on the Melting Temperature of Gold Particles," *Phys. Rev. A*, Vol. 13 No. 6, pp. 2297~2298.
- (2) Han, S., Lim, T., Chung, J., Kim, D. and Moon, J., 2006, "Sintering and Nanosecond Laser Ablation of Silver Nanoparticle Film," *Proceedings of the KSME Spring Annual Meeting*, 2120~2126.
- (3) Ko, S. H., 2011, "Status of Research on Selective Laser Sintering of Nanomaterials for Flexible Electronics Fabrication," *Trans. of the KSME B*, Vol. 35, No. 5, pp. 533~538.
- (4) Harlow, F. H. and Shannon, J. P., 1967, "The Splash of a Liquid Droplet," *J. Appl. Phys.*, Vol. 38 pp. 3855~3866.
- (5) Trapaga, G. and Szekely, J., 1991, "Mathematical Modeling of the Isothermal Impinging of Liquid Droplets in Spray Processes," *Metall. Trans. B*, Vol.

- 22, pp. 901~914.
- (6) Hirt, C. W. and Nichols, B. D., 1981, "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries," *J. Comput. Phys.*, Vol. 39, pp. 201~225.
- (7) Fukai, J., Shiiba, Y., Yamamoto, T., Miyatake, O., Poulikakos, D., Megaridis, C. M. and Zhao, Z., 1995, "Wetting Effects on the Spreading of a Liquid Droplet Colliding with a Flat Surface," *Phys. Fluids.*, Vol. 7, pp. 236~247.
- (8) Fukai, J., Shiiba, Y. and Miyatake, O., 1997, "Theoretical Study of Droplet Impingement on a Solid Surface Below the Leidenfrost Temperature," *Int. J. Heat Mass Transfer.*, Vol. 40, pp. 2490~2492.
- (9) Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S., 1994, "A Level Set Approach for Computing Solution to Incompressible Two-Phase Flow," *J. Comput. Phys.*, Vol. 114, pp. 146~159.
- (10) Nicolas, M. 2005, "Spreading of a Drop of Neutrally Buoyant Suspension," *J. Fluid. Mech.*, Vol. 545, pp. 271~280.
- (11) Dietzel, M., Bieri, N. R. and Poulikakos, D. 2008, "Dropwise Deposition and Wetting of Nanoparticle Suspensions," *I. J. Heat and Fluid Flow.*, Vol. 29, pp. 250~262.
- (12) Jeong, H. J., Hwang, W. R., and Kim, C. Y., 2010, "Numerical Simulations of Capillary Spreading of Particle-Laden Droplet on a Solid Surface," *J. Materials Processing Technology*, Vol. 210, pp. 297~305.
- (13) Buongiorno, J. 2006, "Convective Transport in Nanofluids," *ASME*, Vol. 128, pp. 240~250.
- (14) Gharagozloo, P. E. and Goodson. K. E., 2011, "Temperature-Dependent Aggregation and Diffusion in Nanofluids," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 54, pp.797~806.
- (15) Fischer, M., Juric, D. and Poulikakos, D. 2010, "Large Convective Heat Transfer Enhancement in Microchannels with a Train of Coflowing Immiscible or Colloidal Droplets," *Int. J. Heat Transfer*, Vol. 132, pp.112402-1~112402-10.
- (16) Lee, W. and Son, G., 2001, "Numerical Study of Droplet Impact and Coalescence in a Microline Patterning Process," *Comput. Fluids* Vol. 42, pp. 26~33.
- (17) Einstein, A. 1906, "Eine Neue Bestimmung der Molekuldimenstioen," *Annalen der Physik, Leipzig*, Vol. 19, pp. 289~306.
- (18) Lim, T., Han, S., Chung, J., Chung, J, T. and Ko, S., 2009, "Expermental Study on Spreading and Evaporation of Inkjet Printed Pico-liter Droplet on a Heated Substrate," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 52, pp. 431~441.
- (19) Carey, V. P., 2001, *Liquid-Vapor Phase-Change Phenomena*, Taylor&Flancys Group, Newyork, pp. 73~106.