

<학술논문>

DOI <http://dx.doi.org/10.3795/KSME-B.2014.38.6.513>

ISSN 1226-4881(Print)
2288-5234(Online)

친수성/소수성 수평 표면에서의 액적이송 메커니즘

명 현 국*

* 국민대학교 기계시스템공학부

Droplet Transport Mechanism on Horizontal Hydrophilic/Hydrophobic Surfaces

Hyon Kook Myong**

* Dept. of Mechanical Engineering, Kookmin Univ.

(Received February 4, 2014 ; Revised March 27, 2014 ; Accepted April 14, 2014)

Key Words: Droplet Transport Mechanism(액적이송 메커니즘), Hydrophilic/Hydrophobic Surface(친수성/소수성 표면), Wall Adhesion(벽면부착), VOF(Volume of Fluid), Numerical Simulation(수치해석), CFD(전산유체역학)

초록: 유체이송 기술은 최근 마이크로 유체시스템 개발에서 핵심문제로 인식되고 있다. 본 연구에서는 최근 저자가 제안한 외부동력을 사용하지 않고 액적을 이송시킬 수 있는 새로운 개념인 친수성/소수성 수평 표면에서의 액적이송을 자체개발 코드(PowerCFD)를 사용하여 수치해석하였다. 수치해석에 사용된 코드는 보존적인 압력기반 유한체적방법에 기초한 비정렬 셀 중심 방법 및 VOF 방법에 체적포착법인 CICSAM을 채용하고 있다. 액적 내 및 주위의 속도벡터, 압력분포 및 전체운동에너지와 같은 수치해석 결과를 제시하고 이 결과들을 통해 액적이송 메커니즘을 규명하였다.

Abstract: A fluid transport technique is a key issue for the development of microfluidic systems. In this study, the movement of a droplet on horizontal hydrophilic/hydrophobic surfaces, which is a new concept to transport droplets without external power sources that was recently proposed by the author, was simulated using an in-house solution code(PowerCFD). This code employs an unstructured cell-centered method based on a conservative pressure-based finite-volume method with interface capturing method(CICSAM) in a volume of fluid(VOF) scheme for phase interface capturing. The droplet transport mechanism is examined through numerical results that include velocity vectors, pressure contours, and total kinetic energy inside and around the droplet.

1. 서론

현재 마이크로 유체(micro fluidic) 시스템 개발에서 유체이송(fluid transport) 기술은 핵심문제로 인식되고 있다. 이러한 마이크로 스케일 시스템에서는 표면장력이 관성력을 압도하는 주된 힘이 되므로, 표면장력에 의해 구동되는 유체작동(fluidic actuation)에 대한 연구가 많이 수행되고 있다. 특히 표면 습윤성 기울기(surface wettability gradient)는 오랫동안 액적이송을 제어하기 위해

적용되어져 왔으며, 일반적으로 액적조작(droplet manipulation)은 액적 표면 습윤성 기울기를 인공적으로 조작하는 것으로, 현재 열적, 전기적 및 감응원리에 기초한 다양한 메커니즘을 이용하고 있다. 그러나 이러한 메커니즘들은 화학적 상용성, 온도상승, 전기퍼텐셜의 간섭과 같은 근본적인 문제가 수반된다.⁽¹⁾ 따라서, 최근 표면에 거칠기(roughness) 등을 주는 방법과 같이 물리적으로 표면의 미세구조 형상(pattern)을 변화시키든지, 화학적으로 표면에 표면에너지의 기울기(gradient)를 만들어 주는 포토 패터닝(photo patterning) 기술을 이용함으로써 결과적으로 표면 습윤성 기울기를 변화시키는 방법이 제안되어 이에 관한 연

† Corresponding Author, myong@kookmin.ac.kr

구가 활발하게 수행되고 있다.^(1~5) 이러한 표면 습윤성 기울기 차이에 의한 Laplace 압력 구동 메커니즘은 외부 동력을 사용하지 않고, 또한 열적, 전기적, 화학적 문제로부터 야기되는 부작용이 없다는 면에서 마이크로 유체 시스템을 설계하기 위한 적절한 개념을 제공할 수 있다.

최근 명⁽⁶⁾은 외부동력을 사용하지 않고 표면장력에 의해 구동되는 유체작동에 관한 새로운 개념을 제안하였다. 이 개념은 표면을 친수성과 소수성 표면의 복합표면으로 단순하게 구성하고 액적을 이 경계면에 놓음으로써 유체의 응집력과 부착력 사이의 힘의 불균형 특성을 최대한 이용하는 것으로, 결과적으로 액적 전체 계면 곡률의 심한 비균일 분포로 인해 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형 상태를 야기한 후 평형상태로 변하는 동적과정을 통해서 액적을 이송시키는 것이다. 이 새로운 개념은 동력을 사용하지 않고 액적 안팎에서 발생하는 비평형 Laplace 압력을 이용하는 면에서는 기존의 개념^(1~5)과 유사하나, 기존의 개념이 비평형 Laplace 압력을 표면 습윤성 기울기 차이로 야기하기 때문에 주로 표면과 접하는 계면 부근에서만 비평형 Laplace 압력이 생성되는 이른바 준평형(quasi-equilibrium) 과정인데 반해, 새로운 개념은 유체의 응집력과 부착력 사이의 힘의 불균형 특성을 최대한 이용하기 때문에 액적 전체 계면 안팎에 강한 비평형 Laplace 압력을 생성시킬 수 있다.⁽⁶⁾ 또한 명⁽⁶⁾이 제안한 유체작동을 위한 새로운 액적이송 장치는 단순하게 친수성과 소수성 표면으로 구성된 복합표면을 구성하고 액적을 이 경계면에 놓는 것으로 이 개념을 적용한 마이크로 장치는 제작 면에서도 기존의 방법보다 용이하므로, 이 개념의 가능성이 입증된다면 마이크로 유체 시스템에서의 유체 이송 기술개발에 크게 기여할 것으로 사료된다. 명⁽⁶⁾은 이 새로운 개념을 입증하기 위해 해석대상으로 친수성 표면과 소수성 표면 경계에 중심을 둔 가상적인 반원통형 이차원 액적을 대상으로 액적의 움직임에 대한 수치해석을 통해 액적이송에 대한 새로운 개념 및 성능의 우수성을 입증하였다. 그러나 구체적인 수치해석 방법을 포함하여 액적이송 메커니즘에 대한 상세한 분석은 수행하지 않았다.

본 논문은 친수성/소수성 표면에 놓인 반원통형 액적을 대상으로 수치해석 방법을 포함하여 액적 내 압력분포, 속도분포 및 내부(운동)에너지 변화 등에 관해 보다 상세한 분석을 통해 명⁽⁶⁾이 제

안한 액적이송에 대한 기본적인 메커니즘을 보다 명확히 파악하고자 한다. 이것은 이 새로운 개념에 대한 실험적 및 수치해석적 연구결과가 존재하지 않는 상황에서, 향후 실험 및 수치해석 연구결과와의 비교분석을 위한 연구 자료를 제공하는 면에서 중요하다고 할 수 있다.

2. 수치해석방법

액적이송과 같이 물질경계면(material interface)과 두 유체의 밀도비가 큰 경우 유체 간에 형성되는 경계면을 기준으로 국소 물성 값이 급격하게 변하게 되어 수치해석상에 어려움이 발생한다. 또한 액적이 시간과 함께 형상을 변하며 이동해 가므로 시간에 따른 액적의 질량보존이 중요한 요소로 된다. 이와 함께 액적이송이 표면장력과 벽면부착력에 크게 의존하므로, 표면장력에 의한 힘 및 벽면부착력 경계조건에 대한 적절한 모델이 중요하다. 따라서 액적이송에 대한 적절한 수치해석방법이 필수적으로 요구되며, 본 연구에서는 각 상의 체적이 잘 보존되는 장점을 가진 셀(또는 검사체적)내에 액상의 체적비로 정의된 VOF(Volume Of Fluid) 값 α 를 사용하여 상경계면을 추적하는 경계면 포착법(interface capturing method)인 VOF 방법 중에서 α 를 자유표면의 정확한 위치에 대한 정보가 필요 없는 함수형태로 표현하고 이를 이송하는 방정식을 HR(High Resolution) 도식으로 풀어 경계면의 움직임을 정확하게 포착하는 체적포착법(volume capturing method)^(7~10)을 사용하여 수치해석을 수행하였다.

2.1 지배방정식

유동을 비압축성이라고 가정하면, 기상-액상 모 든 영역에 적용되는 질량보존, 운동량보존 및 VOF 값 α 에 대한 지배방정식은 검사체적 V 및 검사면 벡터 \vec{S} 에 대해 다음과 같이 적분형태로 표현할 수 있다.

$$\int_S \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \vec{v}) dV + \int_S [\rho \vec{v} \otimes \vec{v}] \cdot d\vec{S} = & \quad (2) \\ \int_S \vec{\tau} \cdot d\vec{S} - \int_S p d\vec{S} + \int_V \rho \vec{g} dV & \\ + \int_V \vec{f} dV & \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \alpha dV + \int_S \alpha \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (3)$$

위 식에서 \vec{v} 는 속도 벡터, t 는 시간, p 는 압력, \vec{g} 는 중력가속도, \vec{f}_{SV} 는 표면장력에 의한 단위 체적당 힘, $\vec{\tau}$ 는 점성응력 텐서를 각각 나타낸다. 그리고 국소 물성 값인 밀도 ρ 와 점성계수 μ 는 다음과 같이 계산한다.

$$\rho = \alpha \rho_1 + (1 - \alpha) \rho_2 \quad (4)$$

$$\mu = \alpha \mu_1 + (1 - \alpha) \mu_2 \quad (5)$$

여기서 아래첨자 1과 2는 다른 종류의 유체를 각각 나타내며, α 는 0과 1 사이의 값을 가진다.

2.2 CSF 모델 및 벽면부착 경계조건

식 (2)에 나타난 표면장력에 의한 단위 체적당 힘 \vec{f}_{SV} 는 일반적으로 동등한 체적력으로 변환하는 Brackbill 등⁽¹¹⁾이 제안한 CSF(Continuum Surface Force) 모델의 형태로 운동량방정식에 삽입된다. 이 항은 표면장력계수 σ 가 일정한 경우 다음과 같이 주어진다.

$$\vec{f}_{SV} = \sigma \kappa \vec{n} \quad (6)$$

위 식에서 κ 는 경계면의 곡률, 그리고 \vec{n} 은 경계면에 수직인 벡터를 나타낸다. 본 연구에서와 같이 VOF 모델을 사용하는 경우, 표면장력에 의한 단위 체적당 힘 \vec{f}_{SV} 는 다음과 같이 나타내어진다.

$$\vec{f}_{SV} = -\sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \nabla \alpha \quad (7)$$

한편, 벽면부착력은 벽면과의 접촉점에서 유체 계면에 작용하는 표면력으로, 벽면부착 경계조건은 계면이 벽면과 접촉하는 접촉점에서의 계면에 수직인 단위벡터이다. Blackbill 등⁽¹¹⁾은 벽면에서 계면에 수직인 단위벡터를 다음 식과 같이 표현하였다.

$$\hat{n} = \vec{n}_w \cos \theta + \vec{n}_t \sin \theta \quad (8)$$

위 식에서 θ 는 유체와 벽사이의 평형 접촉각도, \vec{n}_w 는 벽을 향하는 벽면에 수직인 단위벡터, \vec{n}_t 는 액체를 향하고 계면과 벽사이의 접촉선(contact line)에 수직하고 벽면에 접하는 방향의 단위벡터를 각각 나타낸다. 일례로 $\theta = 90^\circ$ 는 계

면이 벽면에 수직인 것을, $\theta < 90^\circ$ 는 유체가 벽면을 적시는 것을 각각 의미한다. 그런데 식 (8)에서 \vec{n}_w 는 벽면의 면적벡터에 수직인 단위벡터로 직접 구해지나, \vec{n}_t 는 직접 구할 수 없어 일반적으로 벽면에 접한 셀 중심에 위치한 격자점 P 에서의 값으로 근사시킨다.⁽¹²⁾ 본 연구에서는 위 식과 함께 벽면부착 경계조건으로 다음 식을 사용하였다.

$$\vec{n}_w \cdot \nabla \alpha = \vec{n}_w \cdot \vec{n} = \cos \theta \quad (9)$$

참고로 위 식은 계면이 벽면과 접촉하는 접촉점에서의 계면에 수직인 단위벡터를 양적(explicitly)으로 구하는 식 (8)과는 달리 음적(implicitly)으로 구하는 것이나, 향후 동적 접촉각(dynamic contact angle)을 고려할 경우 식 (8)보다 사용이 용이하며, 또한 유한체적법에 기초한 본 연구에서 사용하는 수치해석방법에서는 직접적으로 적용될 수 있는 장점이 있다.

2.3 수치해석방법

수치해석은 Myong and Kim⁽⁷⁾ 및 Myong^(8-10,12)이 개발한 비정렬격자계 및 체적포착법을 채택한 VOF 방법을 사용하는 수치해석방법(PowerCFD 코드)에 비정렬격자계에 적용할 수 있도록 제안된 식 (7) 형태의 표면장력에 대한 CSF 모델 및 식 (8) 또는 식 (9)의 벽면부착 경계조건 모델을 삽입하여 수행하였다. 참고로 PowerCFD 코드는 일반 상용 CFD 코드와 같이 유한체적법에 기초하여 비정렬 셀 중심방법을 채용하고 압력수정방법에 기반을 둔 3차원 유동해석방법^(13,14)에 체적포착법에서 크게 문제가 되는 변형현상과 같은 계면의 비물리적인 변형 및 수치확산 문제를 크게 개선한 것으로 알려진 HR(High Resolution)도식인 CICSAM⁽¹⁵⁾(Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes)을 도입하고 있다.

구체적인 수치해석방법은 각 시간스텝마다 먼저 식 (3)을 풀어 VOF 장(field)의 α 값들을 새롭게 구한다. 다음으로, 이 α 값들을 사용하여 식 (4) 및 식 (5)로부터 밀도와 점성계수 값을 계산한다. 마지막으로 비정렬격자계에 적용할 수 있도록 제안된 식 (8) 또는 식 (9)의 벽면부착 경계조건 모델과 함께 식 (7) 형태의 표면장력에 대한 CSF 모델을 사용하여 표면장력에 의한 단위 체적당 힘 \vec{f}_{SV} 를 구한 후, 식 (1)과 식 (2)를 유동

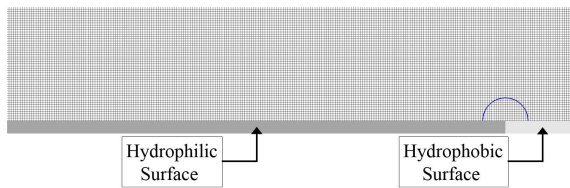


Fig. 1 Calculation domain and grid system with initial droplet shape

해석 코드를 사용하여 풀게 된다.⁽¹²⁾

3. 해석결과 및 고찰

본 절에서는 친수성/소수성 표면에 놓인 반원통형 액적을 대상으로 본 연구에서 제시한 수치해석방법을 사용하여 수치적으로 해석한 결과를 토대로 명⁽⁶⁾이 제안한 액적이송에 대한 기본적인 메커니즘을 보다 명확히 파악하였다.

3.1 해석대상 및 경계조건

해석대상은 명⁽⁶⁾의 논문에서와 같이 친수성 표면과 소수성 표면 경계에 중심을 둔 반경 $R=0.002$ m인 가상적인 반원통형 액적으로, 초기에 표면(벽면)과의 접촉각을 90° 로 한 후, 이 액적이 명기된 접촉각(소수성 표면에서 $\theta=135^\circ$, 친수성 표면에서 $\theta=45^\circ$)을 가진 친수성/소수성 표면에 놓여 시간에 따른 움직임을 파악하는 초기 경계치 문제이다(Fig. 1 참조). 참고로 이 액적은 실제 액적과는 달리 3차원 특성을 반영시키고 있지 않으나, 계산의 편의성과 새로운 개념을 입증하고 기본적인 메커니즘을 파악하기 위한 목적으로 이와 같이 가정하였다. 또한 액적이송 문제에서 영향을 미칠 수 있는 접촉각 히스테리시스(contact angle hysteresis)는 이전 논문⁽⁶⁾에 기술한 바와 같은 이유로 향후 연구과제로 남기고 여기서는 고려하지 않았다.

해석공간은 Fig. 1과 같이 수평방향으로 0.05 m, 수직 방향으로 0.010 m이며, 초기에 반원통형 액적 중심은 $x=0.044$ m에 놓여 있으며, $x > 0.044$ m 표면은 소수성 표면이고 $x < 0.044$ m 표면은 친수성 표면이다. 계산영역의 경계조건은 바닥면만 벽면조건이고, 나머지 경계는 압력경계로 설정하였다. 격자계는 격자민감도 테스트를 거친 후 최종적으로 비정렬 등간격 격자계로 12,500(250×50) 개의 제어체적을 사용하였으며,

등간격 정사각 격자계를 사용하는데 따른 초기 오차를 줄이기 위해, 초기 상태에서의 액적이 차지하는 분율, 즉 VOF 값 α 을 정확히 산정하는 처리를 하였다.⁽⁶⁾ 또한 본 연구에서는 공기 중에 움직이는 실제 물 액적을 상정하여 배경 유체는 공기로 가정하고, 표면장력 계수 σ 는 7.0×10^{-2} N/m을, 시간스텝 $\Delta t=5 \times 10^{-6}$ s를 사용하였다. 참고로 이 경우 대표속도 및 대표길이를 각각 $U=\sqrt{\sigma/(\rho_w R)}$ 및 $L=R$ 로 정의할 때, $Re \approx 375$ 이고 $Fr \approx 1.34$ 이며, 대표속도로 약 50이 되는 0.5 s까지 계산하였다.

3.2 수치해석 방법의 유효성

본 수치해석방법의 유효성은 벽면부착에 의하여 야기되는 다상유동현상의 동적거동을 연구한 이전 연구⁽¹²⁾에서 입증되었으므로, 여기서는 해석대상에 대해 시간에 따른 전체 액적의 체적변화 결과를 통해 유효성을 살펴보았다. 본 수치해석 결과는 비교적 성긴 격자를 사용하였음에도 불구하고 시간이 경과해도 초기의 경계가 퍼지거나 하는 현상이 거의 없으며, 약 100,000 시간스텝이 지난 후에도 처음 액적의 전체체적에 대해 0.3%의 매우 작은 오차를 가지면서 질량보존을 잘 만족시켜 주고 있어, 본 수치해석방법의 유효성 및 정확성을 입증해 주고 있다.

또한, 벽면부착 경계조건으로 식 (8)과 식 (9)를 사용하여 계산한 두 해석결과는 전체적으로 미미한 차이만을 나타내고 있음이 확인되었다. 따라서 여기서는 식 (9)의 경계조건을 사용하여 계산된 결과를 제시한다.

3.3 액적 내부 압력분포의 변화

시간에 따른 액적 내부 압력 등고선 결과를 액적의 변화되는 형상 및 움직임과 함께 Fig. 2 및 Fig. 3에 나타냈다. 그림에서 오른쪽 아래 굵은 막대로 표시한 부분이 소수성 표면이고, 나머지 부분이 친수성 표면이며, VOF 값 $\alpha \geq 0.5$ 인 부분을 액적으로 나타냈다. 또한 Fig. 2에 나타낸 압력 등고선은 액적 내부 압력분포의 상세한 형태를 제시할 목적으로 나타낸 것으로, (a)-(f)와 (g)-(n)은 각각 동일한 값에 기초한 것이며, 후자는 전자의 절반 수준 정도의 값이다.

결과를 보면 액적은 친수성 표면에서는 부착력이 강해 퍼지고, 소수성 표면에서는 응집력이 강

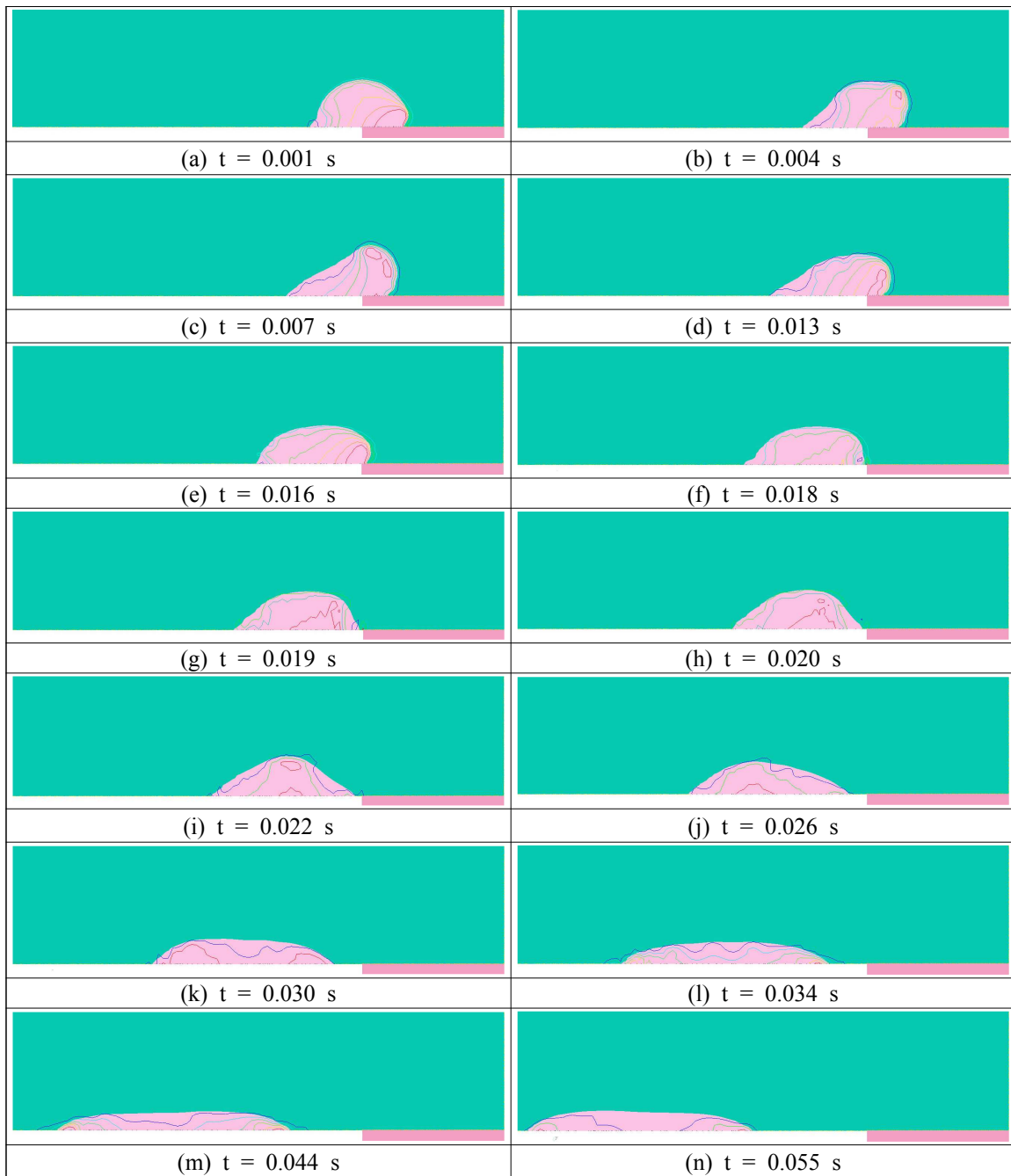


Fig. 2 Time evolution of pressure contours with droplet movement at several times; $Re = 375$, $Fr = 1.34$, density ratio=1000

해 오그라드는 양상을 보이며 다양한 형상변화를 일으키며 변형되면서 왼쪽(친수성 표면쪽)으로 움직인다(Fig. 2(a)-(e)). 이것을 압력분포와 함께 좀 더 자세히 살펴보면, 초기에 소수성 표면의 계면에서 강한 응집력으로 인해 액적은 소수성 표면에서 오그라들며 왼쪽으로 이동하며, 이 영역에서 높은 압력을 발생시키는데 반해, 친수성 표면

의 계면에서는 초기에 강한 부착력에 의해 퍼지면서 왼쪽으로 이동하며, 이 영역에서 약한 부압을 나타내고 있다(Fig. 2(a)). 시간이 진행되며 소수성 표면 위쪽에서 곡률이 점점 커지며 이 영역에서의 압력이 높아져 소수성 표면과의 계면 주위 압력보다 커지고(Fig. 2(b)-(c)), 이 높은 압력이 액적 전반에 걸쳐 작용하며 빠르게 곡률을 완

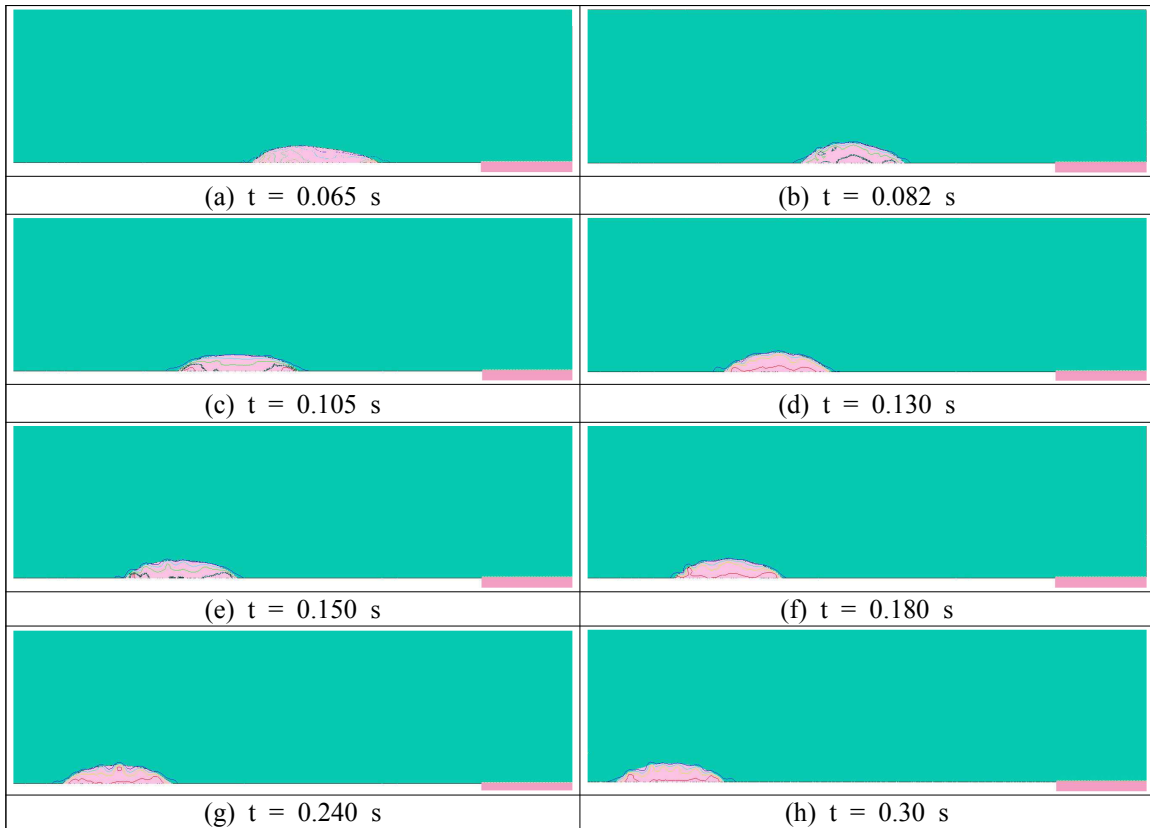


Fig. 3 Time evolution of pressure contours with droplet movement at several times; $Re = 375$, $Fr = 1.34$, density ratio=1000

화시키면서 다시 높은 압력이 소수성 표면과의 계면 부근으로 이동한다(Fig. 2(d)-(e)). 반면 친수성 표면 위쪽의 곡률은 상대적으로 작아 결과적으로 표면장력이 약해 소수성 표면 위쪽에서의 비평형 상태로 인한 변화에 비해 형상변화가 상대적으로 느리게 진행되다가(Fig. 2(b)-(c)), 곡률로 인한 액적의 심한 형상 불균일을 수정하기 위해 액적 전반에 대한 형상변화를 수반하게 되면서 액적은 국부적으로 높은 압력을 발생시키는 소수성 표면과의 계면 부근을 제외하고는 어느 정도 불룩하며 매끄러운 형상이 만들어지고 있다(Fig. 2(d)-(e)). 이러한 과정은 액적의 소수성 표면과의 계면이 소수성 표면을 벗어나는 시간까지 진행되며 이 경우 왼쪽으로의 액적이동은 상대적으로 작아짐을 알 수 있다. 이것은 액적이 소수성 표면을 벗어날 때까지 소수성 표면상에서는 응집력에 의한 힘이, 반대로 친수성 표면에서는 부착력에 의한 힘이 상대적으로 강하며 이 두 힘이 서로 시너지 효과를 내며 결합하여 액적 내부(운동) 에너지를 증가시키면서(Fig. 4 참조), 액적 전체에

강한 비평형 상태를 만들고 있음을 의미한다. 따라서 이 결과는 액적이 표면과 만나는 계면에서의 강한 비평형상태로 인해 소수성 표면에서는 계면이 액적 안쪽으로 파고들고 친수성 표면에서는 계면이 액적 바깥쪽으로 퍼져 나가려고 할 것이므로, 결과적으로 액적 계면에서 곡률의 심한 비균일 분포를 만들게 되어 이것이 액적 전체에 강한 비평형 상태를 만들고 액적 내부(운동)에너지를 증가시키면서 액적이 친수성 표면 쪽으로 이동할 것이라는 명⁽⁶⁾의 액적이송에 대한 개념을 명확히 입증해 주고 있다.

액적의 오른쪽 표면과의 계면이 소수성 표면을 벗어나면, Fig. 2(f)에서 보는 바와 같이 액적의 오른쪽 표면과의 계면은 친수성/소수성 경계면에서 고정되기 위해 표면과의 계면 바깥 부근에서 높은 압력이 나타나고 계면 안쪽 액적 내부에 부압이 동시에 나타나는 강한 압력 차이가 발생하고 액적 내 곡률이 큰 영역의 비교적 높은 압력과 상호작용하며 곡률을 완화시키고 있다. 또한 곡률이 빠르게 완화되면서 액적내 최고압력은 급격히

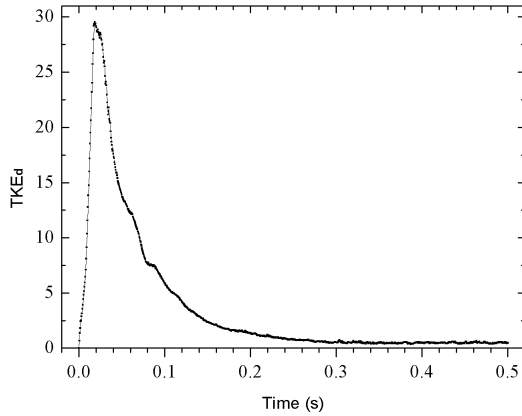


Fig. 4 Time sequence of total kinetic energy inside droplet

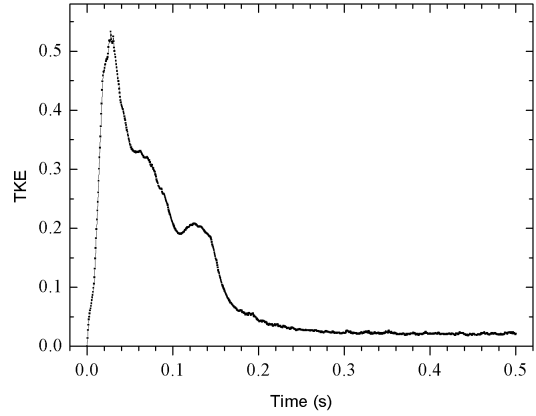


Fig. 5 Time sequence of turbulent kinetic energy over calculation domain

낮아지고 최고압력 영역이 오른쪽 영역으로부터 액적 중심으로 이동하면서 산형태의 액적을 형성한다(Fig. 2(g)-(i)). 이후 다시 액적 중앙 산형태의 높은 곡률로 인한 액적의 형상변화를 수정하면서 최고압력 영역이 액적 내 친수성 표면 부근에서 왼쪽으로 이동하다 액적 양쪽 표면과의 계면에서 작용하는 부착력 우세로 인해 양쪽 표면과의 계면 부근 영역으로 옮겨가면서 액적은 웨이브 형태로 진동하면서 전체적으로 넓게 퍼지는 형상을 가지는 것을 알 수 있다(Fig. 2(j)-(n)). 이것은 명⁶⁾이 기술한 바와 같이 이 과정에서 액적이 전체적으로 친수성 표면의 특성을 가지게 되어 액적 오른쪽 표면과의 계면에서 다시 오른쪽으로 작용하려고 하나, 소수성 표면으로 인해 정지되며 이로 인해 결과적으로 왼쪽으로 미는 반작용 힘이 작용되어 이것이 왼쪽 벽면과의 계면에서의 부착력에 의한 왼쪽으로의 움직임을 가속화시키며 액적은 전체적으로 넓게 퍼지는 신장된 형상을 가지는 것으로 설명할 수 있다.

마지막으로 Fig. 3의 결과는 액적이 과도하게 신장된 상태로까지 진행한 후(Fig. 2(n)), 시간과 함께 높은 압력 영역이 중심부로 이동하면서 평형상태보다 표면과의 접촉면적이 작은 수축된(볼록한) 형상으로 회귀하였다가, 다시 양쪽 표면과의 계면 부근 영역으로 옮겨가면서 액적이 다시 넓게 퍼지는 신장된 형상을 가지는 현상을 반복하며 점차 느려지기는 하나 평형상태에 도달할 때까지 왼쪽으로 움직여 가는 것을 확인할 수 있다. 또한 Fig. 2(i)-(n) 및 Fig. 3의 압력 등고선 형태는 이 과정에서의 액적이송 구동 메커니즘이 잘 알려진 원형 액적표면이 변형되었을 때 액적

표면에 그것의 평형상태 주위로 진동시키는 모세관파(capillary wave)가 야기된다는 것과 유사하게 비평형 액적 표면에서 발생하는 모세관파로 설명할 수 있다는 명⁶⁾의 가설을 입증해 주고 있다고 사료된다.

3.4 전체 운동에너지의 변화

시간전개에 따른 다음 식으로 정의되는 액적 내부 및 계산영역 전체에 대한 단위체적당 전체 운동에너지(total kinetic energy)의 변화를 Fig. 4 및 Fig. 5에 각각 나타냈다.

$$TKE_d = \frac{1}{V_d} \int_{V_d} \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} dV \tag{10}$$

$$TKE = \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} dV \tag{11}$$

위 식들에서 V_d 및 V 는 각각 액적($\alpha \geq 0.5$ 인 부분)의 체적 및 계산영역 전체의 체적을 나타낸다.

먼저, 액적 내부의 전체 운동에너지 TKE_d 는 Fig. 4에서 보는 바와 같이 약 0.019s에서 최댓값을 가진 후 약 0.023s까지 서서히 감소하다 급격히 단조 감쇄되어 감을 알 수 있다. 이것을 Fig. 2의 결과와 함께 고려하면 전술한 바와 같이 액적이 소수성 표면을 벗어날 때까지 소수성 표면에서의 응집력과 친수성 표면에서의 부착력에 의한 상대적으로 강한 두 힘이 서로 시너지 효과를 내며 결합하여 액적 내부(운동)에너지를 증가시키면서 액적 전체에 강한 비평형 상태를 만들고 있음을 명확히 제시하고 있다. 또한 액적이 소수성 표면을 완전히 벗어나 약 0.023s까지 운동에너지

가 비교적 서서히 감소하는 경향을 나타내고 있는데, 이것은 명⁽⁶⁾이 기술한 바와 같이 이 과정에서 액적이 전체적으로 친수성 표면의 특성을 가지게 되어 액적 오른쪽 표면과의 계면에서 다시 오른쪽으로 작용하려고 하나, 소수성 표면으로 인해 정지되며 이로 인해 결과적으로 왼쪽으로 미치는 반작용 힘이 작용되면서 에너지를 크게 잃지 않으면서 액적형상이 산의 형태로 될 때까지 진행되기 때문에, 이 과정은 3차원 실제 액적과는 달리 2차원으로 가정한 반원통형 액적에서 두드러지게 나타나는 현상으로 사료된다. 따라서 향후 이에 대한 연구 및 분석이 필요하다. 이와 함께 60,000 시간 스텝이 진행된 0.3 s에서 운동에너지는 최댓값의 약 1.6%로 떨어진 후, 이후에는 이 값 주위로 아주 미세하게 진동하고 있다. 이것은 VOF 방법에 CSF 모델을 사용하였을 경우 필연적으로 발생하는 기생흐름(parasite current)과 비교적 성긴 격자에 기인하는 것으로 전체 해석 결과에는 영향을 미치지 않는다고 사료되므로, 액적은 약 0.3 s에서 평형상태에 도달한 것으로 판단할 수 있다.

한편 계산영역 전체에 대한 전체 운동에너지 TKE는 Fig. 5에서 보는 바와 같이 약 0.027 s 부근에서 약한 진동을 하며 최댓값을 가지고, 급격히 감쇄되어가나 약 0.06 s 및 약 0.11 s에서 특징

적으로 변곡점을 가지고 있다. Fig. 2와 Fig. 3의 결과와 함께 고려하면 이 변곡점들이 나타나는 영역은 액적이 평형상태보다 넓게 퍼지는 신장에서 볼록한 수축 형상으로 바뀌는 영역으로, 이러한 결과는 액적이 수축하면서 움직이는 경우에 상대적으로 벽면마찰손실이 적어지며, 이와 동시에 다음 절에서 기술하는 바와 같이 액적 주변의 속도분포가 급격하게 변하면서 이것이 액적의 수축과정에 일부 기여하고 있다고 판단된다. 또한 60,000 시간 스텝이 진행된 0.3 s에서 운동에너지는 최댓값의 약 3.75%로 떨어진 후, 이후에는 역시 아주 미약한 진동을 주나 값이 변하지 않는데, 이 결과로부터 약 0.3 s에서 평형상태에 도달한 것을 알 수 있다. 참고로 TKE의 최솟값이 TKE_d의 최솟값보다 상대적으로 큰 것은 액적을 제외한 계산영역에 발생된 속도장이 소멸되지 않은 결과이다.

3.5 액적 내부 및 주변 속도장의 변화

시간에 따른 액적 내부 및 주변 속도장의 결과를 액적형상과 함께 Fig. 6, Fig. 7 및 Fig. 8에 나타냈다. 그림에서 오른쪽 아래 굵은 막대로 표시한 부분이 소수성 표면이고 나머지 부분이 친수성 표면이며, VOF 값 $\alpha \geq 0.5$ 인 부분을 액적으로 나타냈다. 그림에 보여준 결과로부터 몇 가지 사

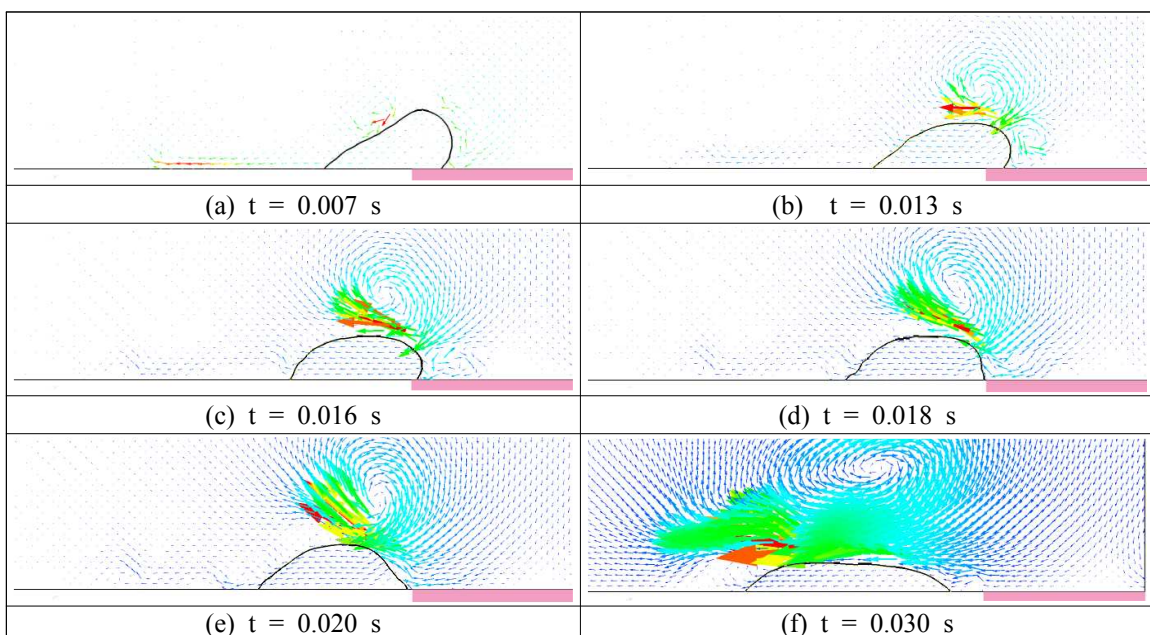


Fig. 6 Time evolution of velocity vectors inside and around moving droplet at several times; $Re = 375$, $Fr = 1.34$, density ratio=1000

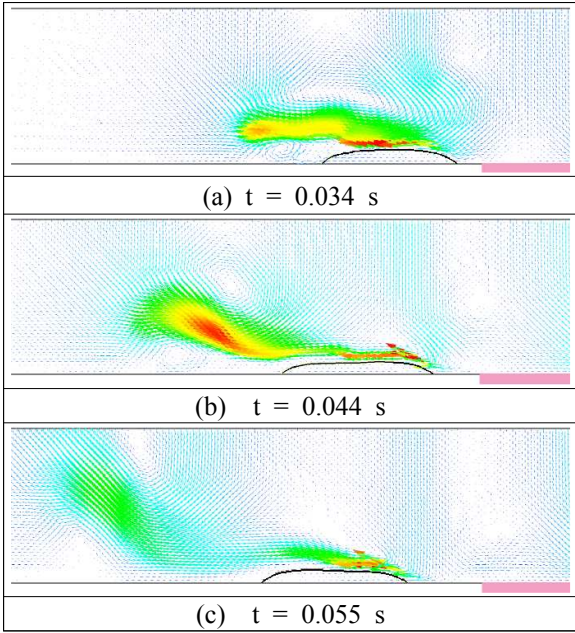


Fig. 7 Time evolution of velocity vectors inside and around moving droplet at several times; $Re = 375$, $Fr = 1.34$, density ratio=1000

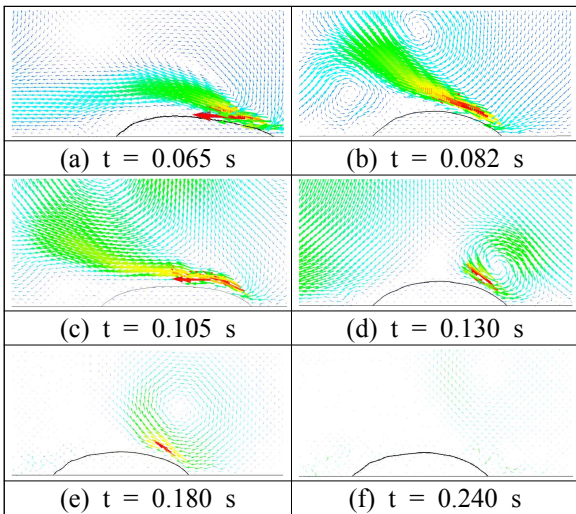


Fig. 8 Time evolution of velocity vectors inside and around moving droplet at several times; $Re = 375$, $Fr = 1.34$, density ratio=1000

실을 확인할 수 있다. 첫째 시간이 경과함에 따라 액적 계면에서 곡률의 심한 비균일 분포로 인해 액적 전체에 강한 비평형 상태가 만들어져 액적이 소수성 표면을 벗어날 때까지 액적 내부 및 주변에 속도를 증가시키며, 액적 내부의 속도 벡터는 액적의 곡률수정과 함께 일부 방향이 바뀌나 전체적으로 왼쪽 친수성 표면쪽으로 향하고 있음을 알 수 있다(Fig. 6(a)-(c)).

둘째, 액적이 소수성 표면을 벗어나면 액적 오른쪽 표면과의 계면 근방의 속도가 액적 왼쪽 표면과의 계면 근방의 속도에 비해 매우 미약하며, 곡률이 심한 영역을 완화시키기 위한 속도가 액적내 유동장을 변화시키면서 왼쪽으로 향하는 웨이브 형태의 속도분포를 나타내고 있음을 알 수 있다(Fig. 6(d)-(f)).

셋째, Fig. 6(d)-(f)와 Fig. 7에서 보는 바와 같이 액적이 액적의 곡률수정을 액적의 후행부분인 오른쪽(진행방향의 반대쪽)부터 시작하여 선행부분인 왼쪽까지 진행한 후, 다시 반대 방향으로 진행하면서 웨이브 형태의 진동을 하며 빠르게 신장되면서 액적 주위의 강한 유동을 유발하고 있다. 즉, 액적의 곡률수정이 액적의 선행부분인 왼쪽까지 진행된 $t = 0.03$ s(Fig. 6(f))에서 액적 주위 전체로 강한 유동장이 형성되고, 이보다 더 과도 신장되는 영역으로 들어서면 액적 주위의 강한 유동장은 액적으로부터 떨어져 나가며 액적 내 속도분포는 전체적으로 왼쪽으로 향하고 있으나 액적은 수축을 시작하면서 웨이브 형태의 진동을 하는 액적의 곡률로 인해 불안정한 형태로 변함을 알 수 있다(Fig. 7). 이상의 결과는 액적이 소수성 표면을 벗어나면 액적의 계면은 전체적으로 친수성 표면의 특성을 가지게 되나 액적 오른쪽 표면과의 계면에서 다시 오른쪽으로 움직이려고 하나, 소수성 표면으로 인해 정지되며 이로 인해 결과적으로 왼쪽으로 미는 반작용 힘이 작용되어 이것이 왼쪽 표면과의 계면에서의 부착력에 의한 왼쪽 친수성 표면으로의 움직임을 가속화시키며, 액적 내부 운동에너지는 쇠퇴값을 가진 후 시간과 더불어 이 반작용 힘이 사라지므로 액적 내부 에너지는 급격히 감소하기 시작하며, 액적은 액적 내부의 불균일 압력분포를 가진 비평형상태로 인해 양쪽으로 퍼지는 형태로 과도하게 신장된 형태로 변할 것이라는 명⁽⁶⁾의 액적이송 개념을 간접적으로 입증해 주고 있다고 사료된다. 또한 평형상태와 유사한 액적형상을 가지는 $t=0.03$ s(Fig. 6(f))에서 액적 주위 전체로 강한 유동장이 형성되고 있는 현상은 앞 절에서 기술한 계산영역 전체에 대한 전체 운동에너지 TKE가 이 상태에서 쇠퇴값을 가지는 것을 설명할 수 있다.

넷째, Fig. 8에서 보는 바와 같이 이후에도 액적 내 속도분포는 전체적으로 왼쪽으로 향하고 있으며, 웨이브 형태의 진동과 같은 액적의 곡률수정에 따른 신장과 수축은 계속되나 그 강도가

크게 약화되며 액적 내부 및 주위의 속도도 빠르게 감쇄됨을 알 수 있다. 따라서 액적은 왼쪽으로 움직임을 계속하지만 시간과 더불어 움직임을 점차 느려지다 멈추게 된다.

4. 결 론

본 논문에서는 외부동력을 사용하지 않고 표면을 친수성과 소수성 표면의 복합표면으로 단순하게 구성하고 액적을 이 경계면에 놓음으로써 유체의 응집력과 부착력 사이의 힘의 불균형 특성을 최대한 이용하여 액적을 이송시킬 수 있다는 최근 명⁶⁾이 제안한 액적이송에 대한 기본적인 메커니즘을 보다 명확히 파악하고자, 친수성/소수성 표면에 놓인 반원통형 액적을 대상으로 수치해석 방법을 포함하여 액적 내 압력분포, 속도 분포 및 내부(운동)에너지 변화 등에 관해 보다 상세한 분석을 수행하였다. 또한 이 새로운 개념에 대한 실험적 및 수치해석적 연구결과가 존재하지 않는 상황에서, 향후 실험 및 수치해석 연구결과와의 비교분석을 위한 연구 자료를 제공하였다.

수치해석은 비정렬격자계 및 체적포착법을 채택한 VOF 방법을 사용하는 수치해석방법에 비정렬격자계에 적용할 수 있도록 제안된 표면장력에 대한 CSF 모델 및 벽면부착 경계조건 모델을 삽입하여 수행하였다.

연구결과, 액적이송의 기본적인 메커니즘이 소수성 표면상에서는 응집력에 의한 힘이, 반대로 친수성 표면상에서는 부착력에 의한 힘이 상대적으로 강하여 이 두 힘이 서로 시너지 효과를 내며 결합하여 액적 내부(운동)에너지를 증가시키면서, 액적 전체에 강한 비평형 상태를 만들어, 결과적으로 액적 계면에서의 곡률의 심한 비균일 분포로 인해 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태와 그 후에 액적 표면에서 발생하는 모세관파로 설명할 수 있음이 명확하게 확인되었다.

향후 실제 액적에 대한 액적모양, 초기 액적 위치, 액적 크기, 친수성/소수성 표면 평형 접촉각, 동적 접촉각 등의 영향에 대한 연구를 진행시킬 예정이다.

후 기

본 연구는 2013년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아

수행한 연구 과제(No. 20134040200580)이다. 또한 교육과학기술부와 한국연구재단의 BK21 플러스 사업 일환으로 수행된 연구(No. S14SN01D0502)이다.

참고문헌

(References)

- (1) Yang, J. T., Chen, J. C., Huang, K. J. and Yeh, J. A., 2006, "Droplet Manipulation on a Hydrophobic Textured Surface with Roughened Patterns," *J. Microelectromechanical Systems*, Vol. 15, No. 3, pp. 697~707.
- (2) Shen, W., Kim, J. and Kim, C. J., 2002, "Controlling the Adhesive Force for Electrostatic Actuation of Microscale Mercury Drop by Physical Surface Modification," in *Proc. IEEE Int. Conf. MEMS*, Las Vegas, NV, Jan., pp. 52~55.
- (3) He B. and Lee, J., 2003, "Dynamic Wettability Switching by Surface Roughness Effect," in *Proc. IEEE Int. Conf. MEMS*, Kyoto, Japan, Jan., pp. 120~123.
- (4) Liao, Q., Qang, H., Zhu, X. and Li, M., 2006, "Liquid Droplet Movement on Horizontal Surface with Gradient Surface Energy," *Science in China Series E: Technological Sciences*, Vol. 49, No. 6, pp. 733~741.
- (5) Ito, Y., Heydari, M., Hashimoto, A., Konno, T., Hirasawa, A., Hori, S., Kurita, K. and Nakajima, A., 2007, "The Movement of a Water Droplet on a Gradient Surface Prepared by Photo-degradation," *Langmuir*, Vol. 23, No. 4, pp. 1845~1850.
- (6) Myong, H. K., 2014, "A New Concept to Transport a Droplet on Horizontal Hydrophilic/Hydrophobic Surfaces" *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 38, No. 3, pp. 263~270.
- (7) Myong, H. K. and Kim, J. E., 2006, "A Study on an Interface Capturing Method Applicable to Unstructured Meshes for the Analysis of Free Surface Flow" *KSCFE J. of Computational Fluids Engineering*, Vol. 11, No. 4, pp. 14~19.
- (8) Myong, H. K., 2009, "Numerical Simulation of Multiphase Flows with Material Interface due to Density Difference by Interface Capturing

- Method" *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 33, No. 6, pp. 443~453.
- (9) Myong, H. K., 2008, "Comparative Study on High Resolution Schemes in Interface Capturing Method Suitable for Unstructured Meshes" *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 32, No. 1, pp. 23~29.
- (10) Myong, H. K., 2011, "Numerical Simulation of Surface Tension-Dominant Multiphase Flows with Volume Capturing Method and Unstructured Grid System" *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 35, No. 7, pp. 723~733.
- (11) Blackbill, J. U., Kothe, C. and Zamach, C., 1992, "A Continuum Method for Modeling Surface Tension," *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 335~354.
- (12) Myong, H. K., 2012, "Numerical Study on Multiphase Flows Induced by Wall Adhesion" *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 36, No. 7, pp. 721~730.
- (13) Myong, H. K. and Kim, J., 2005, "Development of 3D Flow Analysis Code using Unstructured Grid System(1st Report, Numerical Method)," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 29, No. 9, pp. 1049~1056.
- (14) Myong, H. K. and Kim, J., 2006, "Development of a Flow Analysis Code using an Unstructured Grid with the Cell-Centered Method," *J. of Mechanical Science and Technology (KSME Int. J.)*, Vol. 20, No. 12, pp. 2218~2229.
- (15) Ubbink, O., 1997, Numerical Prediction of Two Fluid Systems with Sharp Interface, PhD Thesis, University of London.