

<학술논문>

DOI <http://dx.doi.org/10.3795/KSME-B.2015.39.5.405>

ISSN 1226-4881(Print)

2288-5324(Online)

친수성/소수성 표면상에서 초기 반구형 액적의 움직임에 관한 수치해석

명 현 국** · 권 영 후*

* 국민대학교 기계공학과

Numerical Analysis of the Movement of an Initially Hemispherical Droplet on Hydrophilic/Hydrophobic Surfaces

Hyon Kook Myong** and Young Hoo Kwon*

* Dept. of Mechanical Engineering, Kookmin Univ.

(Received November 17, 2014 ; Revised February 13, 2015 ; Accepted March 9, 2015)

Key Words: Droplet Movement(액적 움직임), Hydrophilic/Hydrophobic Surface(친수성/소수성 표면), Transport Mechanism(이송 메커니즘), Surface Free Energy(표면자유에너지), VOF(Volume of Fluid), Numerical Analysis(수치해석)

초록: 유체이송 기술은 마이크로 유체시스템 개발에서 핵심문제로 인식되고 있다. 최근 명(2014)은 외부 동력을 사용하지 않고 액적을 이동시킬 수 있는 새로운 개념을 제안하고, 초기에 반원통형 형상을 가지는 가상의 2차원 액적에 대한 수치해석을 통해 이 개념이 성립함을 보였다. 본 논문에서는 친수성/소수성 표면위에서 초기 3차원 반구형상의 실제 물 액적이 가지는 움직임을 상용소프트웨어 Fluent의 VOF 방법을 사용하여 수치해석하였다. 해석결과는 명(2014)의 2차원 수치해석 결과와 비교하였으며, 또한 물 액적이송의 메커니즘을 시간에 따른 액적형상과 액적 내부의 운동에너지, 중력에너지, 표면자유에너지 및 압력에너지의 수치해석 결과를 통해 규명하였다.

Abstract: Fluid transport is a key issue in the development of microfluidic systems. Recently, Myong (2014) has proposed a new concept for droplet transport without external power sources and numerically validated the results for a hypothetical 2D, initially having a hemicylindrical droplet. In this paper, the movement of an actual water droplet, initially having a 3D hemispherical shape, on horizontal hydrophilic/ hydrophobic surfaces is simulated using a commercial computational fluid dynamics (CFD) package, Fluent, with VOF (volume of fluid) method. The results are compared with the 2D analysis of Myong (2014), and the transport mechanism for the actual water droplet is examined based on the numerical results of the time evolution of the droplet shape, as well as the total kinetic, gravitational, surface free and pressure energies inside the droplet.

1. 서 론

최근 미소가공기술의 발전으로 마이크로 유체 (microfluidic) 시스템 개발에서 유체이송(fluid transport) 기술은 많은 산업분야에서 핵심문제로 인식되고 있다. 이러한 마이크로 스케일 시스템

에서는 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)를 이용한 액적이송(droplet transport) 기술은 오랫동안 연구되어 왔으며, 표면 습윤성 기울기를 인위적으로 조작하기 위해 일반적으로 외부 동력으로 열적, 전기적 및 감응원리에 기초한 다

† Corresponding Author, myong@kookmin.ac.kr

© 2015 The Korean Society of Mechanical Engineers

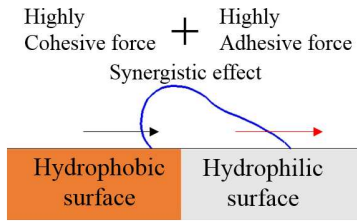


Fig. 1 Synergistic effect acting a droplet on horizontal hydrophilic/hydrophobic surfaces

양한 메커니즘을 이용하고 있다. 그러나 이러한 메커니즘은 온도상승, 화학적 상용성, 전기퍼텐셜의 간섭과 같은 근본적인 문제가 수반된다.⁽¹⁾ 따라서 최근 표면 거칠기(roughness) 등을 주는 방법과 같이 표면의 미세구조 패턴을 변화시키는 물리적 방법이나, 표면에너지의 기울기를 만들어 주는 포토패터닝(photo patterning) 기술을 이용함으로써 결과적으로 표면 습윤성 기울기를 변화시키는 화학적 방법으로 액적을 이송하려는 연구가 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. 그러나 이들 연구는 공통적으로 표면 습윤성 기울기 차이로 액적을 움직이기 때문에 액적이 표면과 접하는 접촉선(contact line) 부근에서만 비평형 Laplace 압력이 생성되는 준평형(quasi-equilibrium) 과정으로 이동거리가 비교적 짧으며, 또한 점진적인 표면 습윤성 기울기를 만들어 주어야하기 때문에 제작상의 어려움과 함께 작동장치의 크기도 제약을 받게 된다.⁽⁶⁾

최근 명^(6,7)은 외부동력을 사용하지 않고 표면장력에 의해 구동되는 유체작동에 관한 새로운 개념을 제안하였다. 이 새로운 개념은 친수성과 소수성 복합표면이 가지는 경계면 위에 액적을 놓음으로써, Fig. 1에서 보는 바와 같이 유체의 응집력과 부착력 사이의 불균형에 따른 힘의 특성을 최대한 이용하는 것으로, 결과적으로 액적 전체 계면 곡률의 심한 비균일 분포로 인해 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태를 야기한 후 평형상태로 변하는 동적과정을 통해서 액적을 이송시키는 것이다. 명^(6,7)은 이 개념을 입증하기 위해 친수성 표면과 소수성 표면 경계에 중심을 둔 가상적인 반원통형 이차원 액적을 대

상으로 액적 움직임에 대한 수치해석을 통해 새로운 개념의 액적이송 메커니즘을 포함해 성능의 우수성을 입증하였다. 그러나 실제 액적은 3차원 형상을 가지고 있기 때문에, 가상적인 2차원 액적에 대한 액적이송 메커니즘과는 다른 특성을 나타낼 것으로 여겨지나, 이에 대한 연구가 전무한 상태이다.

본 논문에서는 친수성/소수성 표면상에 놓인 초기 반구형 액적의 움직임에 관한 3차원 수치해석을 수행하고, 반원통형 액적에 대한 2차원 수치해석 결과와 비교를 통해 액적이송에 관한 메커니즘 및 3차원 특성을 파악하고자 한다. 또한 액적 내부의 각종 에너지 변화에 대한 분석을 통해 액적이송 메커니즘을 규명하고자 한다.

2. 수치해석 방법 및 해석대상

액적이송에 대한 수치해석방법에는 다음과 같은 사항이 필수적으로 요구된다. 첫째, 액적이송과 같이 물질경계면(material interface)과 두 유체의 밀도비가 큰 경우 유체 간에 형성되는 경계면을 기준으로 국소 물성 값이 급격하게 변하게 되어 수치해석상에 어려움이 발생하므로, 이를 해결할 수 있는 해석방법이 요구된다. 둘째, 액적이 시간과 함께 형상을 변하며 이동해 가므로 시간에 따른 액적의 질량보존이 중요한 요소로 된다.⁽⁷⁾ 셋째, 액적이송이 표면장력과 벽면부착력에 크게 의존하므로, 표면장력에 의한 힘 및 벽면부착력 경계조건에 대한 적절한 모델이 중요하다.⁽⁷⁾

2.1 지배방정식

유동을 비압축성이라고 가정하면, 기상·액상 모든 영역에 적용되는 질량보존, 운동량보존 및 VOF(Volume Of Fluid) 값 α 에 대한 지배방정식은 검사체적 V 및 검사면 벡터 \vec{S} 에 대해 다음과 같이 적분형태로 표현할 수 있다.

$$\int_S \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho \vec{v}) dV + \int_S [\rho \vec{v} \otimes \vec{v}] \cdot d\vec{S} = \int_S \vec{\tau} \cdot d\vec{S} - \int_S p d\vec{S} + \int_V \rho \vec{g} dV + \int_V \vec{f}_{SV} dV \tag{2}$$

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

위 식에서 \vec{v} 는 속도 벡터, t 는 시간, p 는 압력, \vec{f}_{SV} 는 표면장력에 의한 단위체적당 힘, $\vec{\tau}$ 는 점성응력 텐서, \vec{g} 는 중력가속도를 각각 나타낸다. 또한 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 1사이의 값을 가진다.

2.2 표면장력에 의한 힘 및 벽면부착 경계조건

식 (2)에 나타난 표면장력에 의한 단위체적당 힘 \vec{f}_{SV} 는 Brackbill et al.⁽⁸⁾이 제안한 표면장력을 동등한 체적력으로 변환시키는 CSF(Continuum Surface Force) 모델의 형태로 표면장력계수 σ 가 일정한 경우 다음과 같이 주어진다.

$$\vec{f}_{SV} = \sigma \frac{\rho \kappa \nabla \alpha_1}{\frac{1}{2}(\rho_1 + \rho_2)} \quad (6)$$

또한 경계면의 곡률 및 경계면에 수직한 단위벡터는 각각 다음과 같이 나타내어진다.

$$\kappa = -(\nabla \cdot \hat{n}) \quad (7)$$

$$\hat{n} = \frac{\nabla \alpha_1}{|\nabla \alpha_1|} \quad (8)$$

위 식에서 κ 는 경계면의 곡률, 그리고 \hat{n} 은 경계면에 수직한 단위벡터를 나타낸다.

한편, 벽면부착 경계조건은 계면이 벽면과 접촉하는 접촉점에서의 계면에 수직한 단위벡터로 주어지며, Brackbill et al.⁽⁸⁾은 벽면에서 계면에 수직한 단위벡터를 다음 식과 같이 표현하였다.

$$\hat{n} = \vec{n}_w \cos \theta_{eq} + \vec{n}_t \sin \theta_{eq} \quad (9)$$

위 식에서 θ_{eq} 는 유체와 벽사이의 평형 접촉각이며, \vec{n}_w 는 벽을 향하는 벽면에 수직한 단위벡터, \vec{n}_t 는 액체를 향하고 계면과 벽면(바닥 표면) 사이의 접촉선(contact line)에 수직하고 벽면에 접하

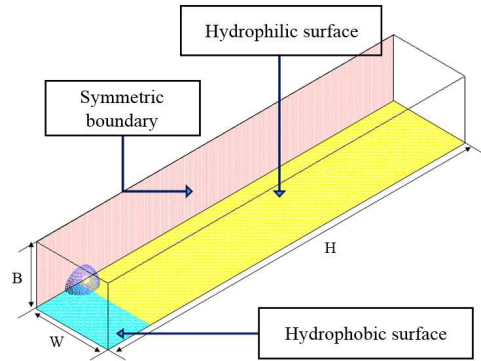


Fig. 2 Computational domain to simulate the movement of a droplet initially having a hemispherical shape

는 방향의 단위벡터를 각각 나타낸다.

2.3 수치해석방법

수치해석은 상용 프로그램인 Fluent 14.0에서 액적의 질량보존을 잘 만족시켜주고 있는 VOF 방법을 사용하여 수행하였다. 구체적으로는 액적이송이 표면장력과 벽면부착에 크게 의존하므로, Brackbill et al.⁽⁸⁾이 제안한 식 (6) 형태의 표면장력에 대한 CSF 모델 및 식 (8) 형태의 벽면부착 경계조건을 사용하였다. 또한 체적포착법(volume capturing method)에서 크게 문제가 되는 번짐 현상과 같은 계면의 비물리적인 변형 및 수치확산 문제를 크게 개선한 것으로 알려진 HR(High Resolution) 도식인 CICSAM⁽⁹⁾(Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes)을 사용하였다.^(7,10-12)

2.4 해석대상 및 경계조건

해석대상은 반경 $R = 0.002$ m의 친수성 표면과 소수성 표면 경계에 중심을 둔 반구형 액적으로, 초기에 표면(벽면)과의 접촉각이 90° 인 물 액적이 명기된 벽면부착 경계조건, 즉 접촉각(소수성 표면에서 $\theta_{eq}=135^\circ$, 친수성 표면에서 $\theta_{eq}=45^\circ$)을 가진 친수성/소수성 표면상에서의 시간에 따른 액적의 움직임을 파악하는 초기 경계치 문제이다. 참고로 본 연구의 해석대상으로 선정된 반구형 액적은 실제 실험을 통해 구현하기에는 다소 어려움이 있을 것이나, 통상 액적이 충돌할 때 중력에 의해 압착되는 액적의 초기형태가 에스키모 얼음집 형상과 같으므로, 이것의 극단적인 경우로 볼 수 있다. 또한 액적이 평형상태로 초기화한 직후 서로 다른 벽면부착 경계조건에

직접적으로 영향을 받아 움직이기 때문에 명^(6,7)이 제시한 친수성/소수성 표면상에 놓인 가상적인 2차원 반원통형 액적의 움직임과 비교하여 3차원 특성과 함께 실제 액적 움직임의 핵심 메커니즘을 파악하는데 적합하다고 사료된다.

본 연구에서는 반구형상의 액적이 공기 중에 움직이는 실제 물로 상정하여 배경유체는 공기로 가정하였고, 표면장력 계수 $\sigma = 0.07 \text{ N/m}$ 로, 시간스텝 $\Delta t = 5 \times 10^{-6} \text{ s}$ 을 사용하여 반구형 액적의 움직임이 멈추는 0.40 s 까지 수치해석을 수행하였다. 또한 액적이송 문제에서 영향을 줄 수 있는 접촉각 히스테리시스는 명⁽⁶⁾이 기술한 바와 같이 향후 연구과제로 남기고 여기서는 고려하지 않았다.

해석공간은 Fig. 2와 같이 계산시간을 절약하기 위해 대칭조건을 사용하여 반구의 절반만을 해석하는 것으로 하고, x 축 방향으로 $H=0.050 \text{ m}$, y 축 방향으로 $W=0.010 \text{ m}$, z 축 방향으로 $B=0.008 \text{ m}$ 로 각각 설정하였으며, 초기에 반구형 액적 중심은 $(x, y, z) = (0.006 \text{ m}, 0 \text{ m}, 0 \text{ m})$ 에 놓여

있다. 경계조건으로 벽면조건을 부여하는 바닥 표면은 소수성 표면($x < 0.006 \text{ m}$, $\theta_{eq} = 135^\circ$)과 친수성 표면($x > 0.006 \text{ m}$, $\theta_{eq} = 45^\circ$)으로 구분되고, 대칭면은 대칭조건을, 나머지 경계는 압력경계조건으로 각각 설정하였다. 격자계는 유사한 해석대상에 대한 격자 민감도 테스트 결과⁽¹²⁾를 반영시켜, 정육면체의 비정렬 등간격자 500,000 ($250 \times 50 \times 40$) 개의 제어체적을 사용하였다.

3. 해석결과 및 고찰

본 수치해석방법의 유효성 및 격자 적합성은 벽면부착에 의해 야기되는 다상유동현상의 동적 거동을 연구한 이전 연구^(7,12)에서 이미 입증되었다. 또한 본 수치해석에서는 시간 경과에 따른 액적 계면이 퍼지는 변침 현상이 거의 없었으며, 또한 처음 액적의 체적에 대해 약 90,000 시간스텝이 지난 이후에도 0.164 %의 매우 작은 오차를 가지면서 질량보존을 잘 만족시켜 주고 있어, 본 수치해석방법의 유효성 및 정확성을 추가적으로 입증해 주고 있다고 판단된다.

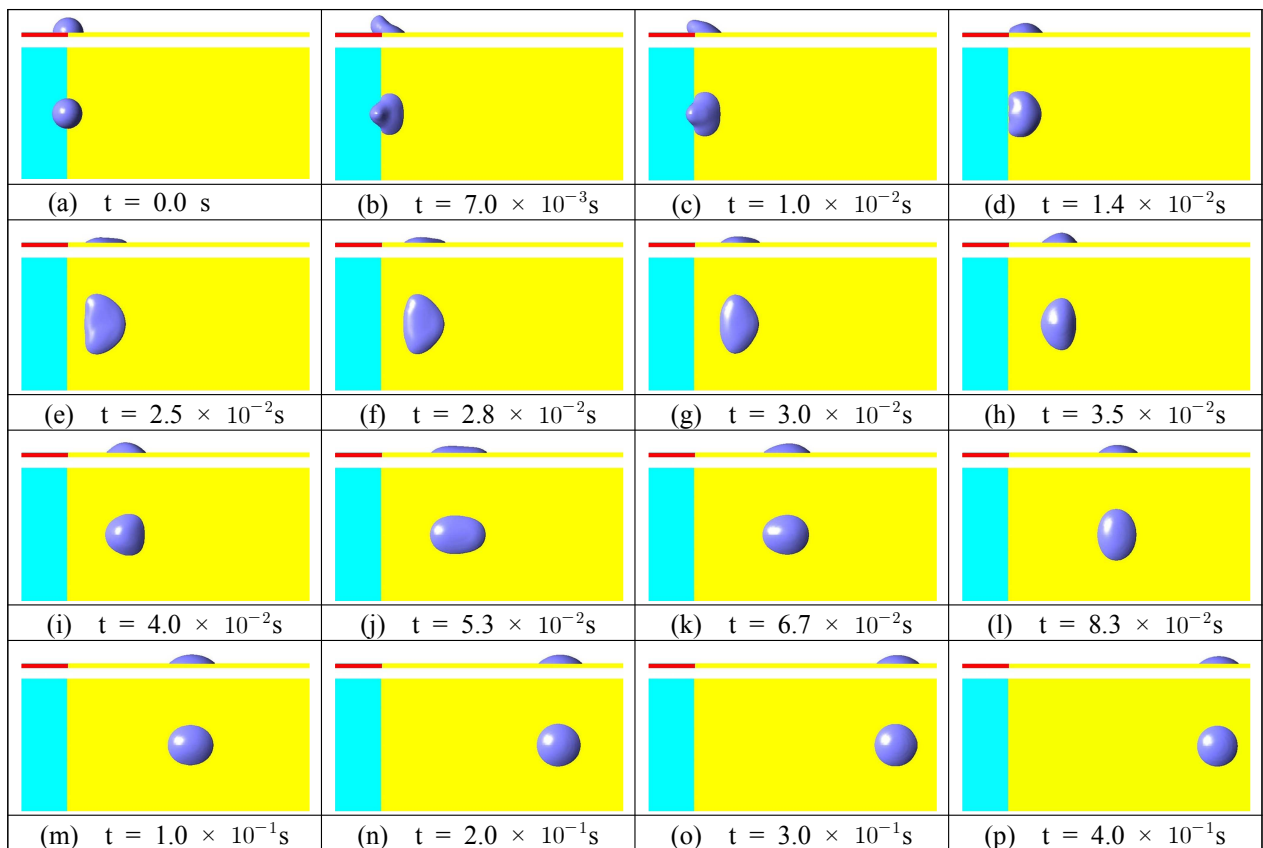


Fig. 3 Time evolution of the movement of actual water droplet, initially having a hemispherical shape, on horizontal hydrophilic/hydrophobic surfaces

3.1 반구형 액적이송에 관한 해석결과 및 고찰

본 절에서는 친수성/소수성 표면상에 반구형으로 초기화된 액적의 이송과정을 시간전개에 따른 액적형상을 통해 살펴보기로 한다.

Fig. 3에는 시간에 따른 반구형 액적의 변화되는 형상 및 움직임을 측면도(side view) 및 상면도(top view)로 나타냈다. 시간별 그림에서 위쪽이 측면도, 아래쪽이 상면도이며, 왼쪽 부분이 소수성 표면, 오른쪽 부분이 친수성 표면이며, VOF 값 $\alpha \geq 0.5$ 인 부분을 액적으로 나타냈다.

먼저 측면에서 시간에 따른 형상변화를 보면, 친수성/소수성 표면상에 놓인 액적이 친수성 표면 위에서는 상대적으로 강한 부착력으로 인해 빠르게 퍼져나가 액적 계면의 곡률이 작아지는데 반해, 소수성 표면 위에서는 강한 응집력으로 접촉선이 안쪽으로 오그라들게 되면서 점차 계면 곡률이 커지게 되어, 결과적으로 이 두 가지 힘의 상승효과로 인해 전체 액적 계면 곡률을 심한 비균일 분포로 만들어 액적이 평형을 이루지 못하는 강한 비평형상태를 야기하며, 액적이 오른쪽 방향(친수성 표면)으로 이동한다(Fig. 3(a)-(c)). 액적이 소수성 표면을 벗어나서 친수성 표면의 특성을 가지는 순간, 소수성 표면으로 퍼져나가지 못하게 막는 소수성 표면의 블록효과(blockage effect)로 인해 더욱 강한 비평형상태로 되어 오른쪽 친수성 표면위로 움직임을 가속화시키나, 액적이 친수성 표면으로 들어서면 이 효과가 사라지며 액적이 넓게 퍼져나간다(Fig. 3(d)-(e)). 이후 과도한 형상변화로 인한 액적 내부에 형성되는 비균일 압력분포를 수정, 완화시키기 위해 액적이 수축된 형상으로 회귀하게 되고(Fig. 3(f)-(i)), 그 후 액적의 이동속도는 시간이 경과함에 따라서 점차 느려지며, 신장(elongation)과 수축(shrinking)을 반복하면서 평형상태에 도달하여 멈추게 된다(Fig. 3(j)-(p)). 이상 측면에서 살펴 본 반구형 액적의 시간에 따른 형상변화는 명^(6,7)이 가상적인 2차원 반원통 액적에 대해서 제시한 결과와 매우 유사하나, 액적이 친수성 표면으로 완전히 움직였을 때의 최대 퍼짐 정도가 Fig. 3(e)-(f)에서 보는 바와 같이 상대적으로 작게 나타나고 있다.

한편 상면에서 본 반구형 액적의 형상변화는 반원통형 2차원 액적^(6,7)에서 볼 수 없는 3차원 특성을 보여주고 있다. 즉, Fig. 3b)-(c)에서 보는 바와 같이 액적이 친수성 표면 전 방향으로 마치

조개와 같은 형상을 보이면서 빠르게 퍼져나가는데 반해, 소수성 표면에서는 반대로 액적 중심 방향으로 접촉선이 오그라들어 전체 액적 계면의 곡률을 심한 3차원적 비균일 분포로 만들고 있다. 또한 Fig. 3(d)-(e)에서 보는 바와 같이 액적이 소수성 표면을 벗어나서 친수성 표면의 특성을 가지는 순간, 친수성 표면에서는 전 방향으로 퍼져나가나, 친수성/소수성 경계면에 접한 액적은 소수성 표면으로 퍼져나가지 못하게 막는 블록효과와 반작용으로 인해 더욱 강한 비평형상태로 되어 오른쪽 친수성 표면위로 움직임을 가속화시킨다. 그러나 친수성 표면으로 들어서면 블록효과가 사라지며, 소수성 표면 부근에서 심한 곡률 변화로 인해 생긴 발생한 높은 압력은 액적 전반에 걸쳐 빠르게 곡률을 완화시키는 형상으로 변화하기 위해 액적이 진행방향보다는 수직한 방향으로 더 넓게 퍼져나간다. 이러한 3차원 현상은 앞에서 기술한 측면에서 보았을 때 액적이 친수성 표면으로 완전히 움직였을 때의 최대 퍼짐 정도가 2차원 반원통형 액적의 경우보다 상대적으로 작게 나타나고 있는 것을 설명해 주고 있다. 이 후 진행방향과 수직한 방향으로 과도하게 변한 형상으로 인해 액적 내부에 형성되는 비균일 압력분포를 수정, 완화시키기 위해 액적이 진행을 하기 보다는 진행 방향과 수직한 방향으로 수축되는 형상으로 회귀하게 된 후(Fig. 3(f)-(i)), 서서히 진행하면서 진행방향과 진행방향에 수직한 방향으로 번갈아 신장 및 수축을 반복하며 평형상태에 도달하고 있다(Fig. 3(j)-(p)).

이와 함께 Fig. 3의 결과는 액적이 약 0.4초 후에 평형상태에 도달함을 나타내고 있으며, 전체 액적이송거리(초기 액적 중심에서 최종 액적 중심까지의 거리)가 반구형 액적 초기 반경 R 의 약 13.5배(약 2.7 cm)이고, 이것을 체적에 기초한 상당 직경으로 환산하면 약 8.5배이다. 또한 평균 속도는 (평형상태까지 도달하는 이송거리의 95%까지 걸리는 시간 0.3초 기준으로) 약 90 mm/s이다. 이 결과는 해석대상이 달라 정확한 정량적 비교는 할 수 없으나 전체 액적이송거리가 액적의 직경수준 정도이고, 액적의 평균속도가 62.5 mm/s라고 보고하고 있는 이전연구⁽¹⁾보다도 액적이송 능력이 우수하다고 할 수 있다.

Fig. 4에는 오직 진행방향으로만 퍼져나갈 수밖에 없는 반원통형 2차원 해석과 비교하여 실제

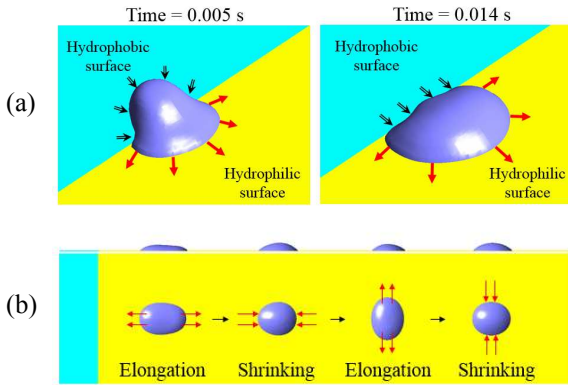


Fig. 4 Characteristic features during 3D movement of a droplet, initially having a hemispherical shape. (a) spreading and recoiling of a droplet on hydrophilic/ hydrophobic surfaces; (b) oscillation motion during droplet movement on hydrophilic surface

반구형 액적에서 나타나는 두 가지 특징적인 3차원 현상을 앞에서 제시한 결과를 토대로 보다 구체적으로 나타냈다. 첫째 현상은 Fig. 4(a)에서 보는 바와 같이 액적이 친수성 표면에서는 전 방향으로 마치 조개와 같은 형상을 보이면서 접촉선이 빠르게 퍼져 나가는데 반해, 소수성 표면에서는 액적 중심 방향으로 접촉선이 오그라들며, 또한 소수성 표면을 벗어난 액적에 대해서는 블록 효과를 나타내는 현상이다. 둘째 현상은 Fig. 4(b)에서 보는 바와 같이 반구형 액적이 평형상태에 도달할 때까지 진행방향과 진행방향의 수직방향으로 주기적으로 신장과 수축을 수차례 반복하며 이동하는 현상이다.

3.2 반구형 액적움직임 과정에서의 에너지 변화

본 절에서는 친수성/소수성 표면 위에 놓인 액적이 강한 비평형상태에서 형상변화와 함께 이동하는 구동원리를 시간전개에 따른 액적내부의 각종 에너지 변화를 이용하여 파악하고자 한다.

시간전개에 따른 액적내부의 운동에너지(kinetic energy) KE , 중력(또는 위치)에너지(gravitational energy) GE 및 표면자유에너지(surface free energy) SE 는 다음 식으로 정의된다.⁽¹³⁾

$$KE = \sum_{i=1}^{n-cells} \frac{1}{2} \rho_i v_i^2 (V_i) \quad (10)$$

$$GE = \sum_{i=1}^{n-cells} \rho_i g h_i (V_i) \quad (11)$$

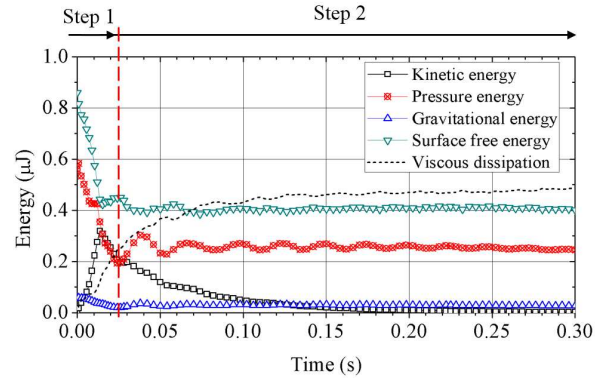


Fig. 5 Time evolution of kinetic energy, pressure energy, gravitational energy and surface free energy for a droplet initially having a hemispherical shape

$$SE = \sigma_{GL} (A_{GL} - \sum_{i=1}^n A_{LS}^i \cos \theta_w^i) \quad (12)$$

위 식에서 V_i , ρ_i 및 \vec{v}_i 는 각각 물 액적($\alpha \geq 0.5$ 인 부분)의 i 번째 셀의 체적, 밀도 및 속도이다. 또한 σ_{GL} 과 A_{GL} 은 각각 기상-액상 간의 표면장력과 경계면적을 각각 나타내며, A_{LS}^i 와 θ_w^i 는 각각 액상-고상이 만나는 i 번째 벽면 셀의 면적과 (평형)접촉각을 각각 나타낸다. 그리고 $n-cells$ 및 n 은 물 액적 내의 셀 총수 및 액상-고상이 가지는 벽면 셀의 수를 각각 나타낸다. 또한 본 연구에서는 에너지 손실을 의미하는 점성소산(viscous dissipation) D 를 다음과 같이 구하였다.

$$KE + GE + SE + D = KE_0 + GE_0 + SE_0 \quad (13)$$

위 식에서 KE_0 , GE_0 , SE_0 는 초기화 상태일 때의 운동에너지, 중력에너지 및 표면자유에너지를 각각 나타낸다.

본 연구에서는 추가적으로 친수성/소수성 표면상의 액적 메커니즘에서 비평형 액적 내부에 발생하는 시간에 따른 압력변화의 영향을 확인하기 위해 다음 식으로 정의된 압력에너지(pressure energy) PE 의 변화를 함께 살펴보았다

$$PE = \sum_{i=1}^{n-cells} p_i (\alpha_i V_i) \quad (14)$$

참고로 식 (14)는 액적내 평균 압력에 체적을 곱한 것으로도 인식할 수 있으므로, 액적내 평균 압력의 변화로 이해해도 무리가 없다.

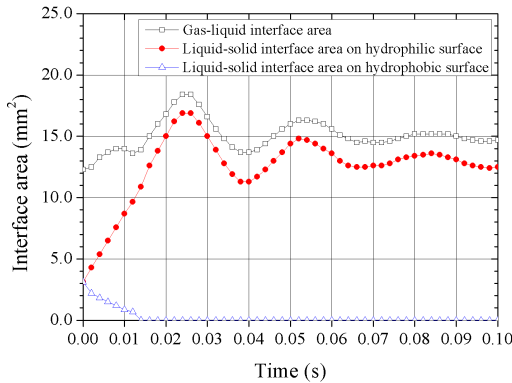


Fig. 6 Time evolution of the liquid-solid interface areas on hydrophilic and hydrophobic surfaces and the gas-liquid interface area for a droplet initially having a hemispherical shape

Fig. 5에는 본 수치해석을 통해 예측된 시간에 따른 액적의 운동에너지, 중력에너지, 표면자유에너지, 점성소산 그리고 압력에너지의 변화를 나타냈다. 또한 표면자유에너지의 변화에 대한 이해를 돕기 위해 액체와 기체사이의 계면면적, 친수성 표면 및 소수성 표면과 만나는 액적의 접촉면적을 Fig. 6에 나타냈다. 점성소산에 대한 결과를 보면, 다소 변동성이 존재하지만 예상한대로 시간에 따라 점성소산은 점차 증가하는 경향을 보여주고 있다. 이러한 점성소산에 대한 변동성은 주로 에너지(특히 표면자유에너지) 산정 과정의 오차에 기인하는 것으로 판단되나, 0.005 s 이하의 매우 짧은 초기 시간대에서 급격히 증가하는 특이한 해석결과를 보이고 있다. 이것은 향후 보다 엄밀한 검증이 요구되나, 현재로서는 초기형상으로 가정한 비평형상태인 반구형 액적이 친수성 및 소수성 표면과 접촉하면서 접촉면적이 친수성 표면에서는 급격히 증가하고, 소수성 표면에서는 감소함에 따른 액적내 압력분포가 급격하게 변하는 급확대 및 축소의 비가역과정을 점성소산과 함께 겪는데 기인한 것으로 사료된다. 참고로 균일한 압력장을 가진 액적내 압력장이 초기화 이후 소수성 표면 접촉선 부근에서 매우 높은 압력이, 친수성 표면 접촉선 부근에서는 부압이 발생하면서 급격한 압력장 변동과 함께 매우 짧은 시간동안 평균 압력이 초기값보다 증가하여 약 5×10^{-4} s에서 최댓값을 가진 후에 감소하는 본 연구의 해석결과는 이러한 사실은 간접적으로 반증하고 있다고 사료된다.

시간에 따른 액적의 각종 에너지 변화에 대한

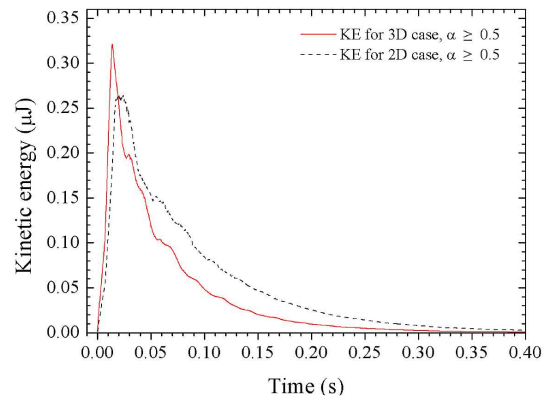
해석결과로부터 액적의 구동원리를 Fig. 5에 나타낸 바와 같이 액적의 형상이 비평형상태로 가장 심화되는 순간인 0.025 s를 기준으로 크게 두 영역으로 나눌 수 있다. 즉 첫 번째 영역은 상대적으로 강한 친수성 표면의 부착력과 소수성 표면의 응집력으로 인한 두 힘의 상승효과와 소수성 표면의 블록효과로 인해 야기되는 강한 비평형상태에서 액적의 형상이 심화되면서 이동하는 구간이며, 두 번째 영역은 비평형상태의 액적이 평형상태에 이르기 위해 신장과 수축을 반복하며 이동하는 구간이다.

구체적으로 살펴보면, 첫 번째 영역에서 액적의 형상은 초기화 이후 표면과의 접촉각이 90° 인 반구형상에서 친수성 표면 위에서는 평형접촉각 45° 를 이루기 위해 접촉선이 빠르게 퍼져나가며 접촉면적을 증가시키고, 반대로 소수성 표면 위에서는 평형접촉각 135° 를 이루기 위해 접촉선이 안쪽으로 오그라들게 되면서 접촉면적이 감소하게 된다(Fig. 6 참조). 이러한 친수성 표면위에서의 부착력과 소수성 표면위에서의 응집력이 상대적으로 강하게 작용하기 때문에 두 힘의 상승효과로 인해 액적은 강한 비평형 형상으로 변해 Fig. 6에서 보는 바와 같이 계면면적도 다소 증가하게 된다. 결과적으로 표면자유에너지는 액적이 소수성 표면을 벗어나는 약 0.014 s까지 크게 감소하게 되고, 이때 감소한 표면자유에너지는 액적을 비평형상태와 함께 친수성 표면 방향으로 이동하게 만드는 운동에너지로 전환되며, 초기화 이후 운동에너지를 0.014 s까지 최대 증가시킨다. 그러나 이 구간에서 액적은 초기화 이후 매우 짧은 시간 동안에 액적 내부에 급격하게 형성된 비균일 압력분포를 해소하면서 액적 형상변화에 치중하므로 점성소산은 그다지 증가하지 않는다. 그 후, 0.014 s에서 0.025 s까지 액적은 소수성 표면이 가지는 블록효과로 인해 친수성 표면 위로 움직임을 가속화시켜 빠르게 넓게 퍼져나가며 강한 비평형상태인 부채꼴 형상으로 변화하는 것을 액적의 계면면적과 친수성 표면의 접촉면적이 증가하는 것을 통해 확인할 수 있다(Fig. 6 참조). 따라서 액적의 계면면적과 친수성 표면의 접촉면적이 동시에 빠르게 증가하는 이 과정 동안 점성소산은 급격하게 증가하나, 표면자유에너지는 약간 증가 하는데 그치게 되며, 이로 인해 운동에너지는 친수성 방향으로 액적을 움직이며 형

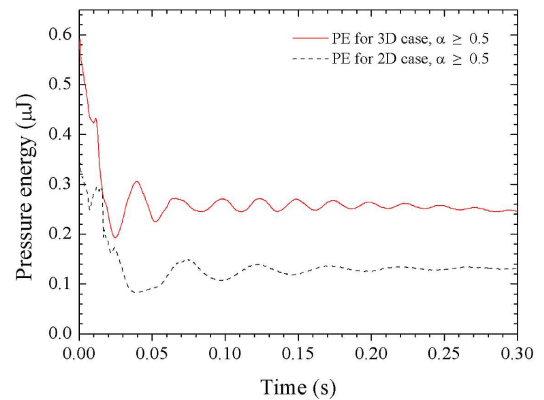
상변화와 함께 지속적으로 단조감쇄하게 된다. 그러나 압력에너지는 소수성 표면이 가지는 블록 효과로 인해 액적의 움직임이 다소 정체되는 약 0.01 s 부근에서 정체된 값을 나타내나, 그 외의 영역에서는 0.025 s까지 급격하게 감소하는 것을 보여주고 있다. 이 압력에너지는 액적 계면의 곡률에 기인하여 액적 내부에 형성되는 비균일 압력분포들의 총합으로 액적의 형상과 함께 변하며, 액적 중심의 곡률이 작은 신장상태에서는 전체적인 내부압력이 작아지게 되어, 압력에너지 또한 작아지게 된다. 결과에서 보듯 압력에너지는 0.025 s에서 최솟값을 가지며, 이것은 액적의 형상이 최대 신장상태로 비평형상태가 극대화 되었다는 것을 간접적으로 의미하고 있다.

두 번째 영역은 비평형상태의 액적이 평형상태에 도달하기 위해 신장과 수축을 반복하며 이동하는 구간으로, 비평형상태의 액적은 내부에 생긴 불균형한 압력분포를 수정하기 위해 계속적으로 형상을 변형하게 되는데 이것은 비평형 액적 계면에서 발생하는 모세관파로 설명할 수 있다. 즉 신장상태에서 액적은 중심에 비하여 상대적으로 압력이 높은 액적 접촉선 주변의 압력에 의해 액적 중심으로 이동하면서 수축하게 된다. 반대로 수축상태에서 액적은 중심의 높은 압력분포가 액적 접촉선 부근으로 이동하게 되면서 신장하게 된다. 이러한 액적 내부의 압력변화는 평형상태 주위에서 주기적으로 변동하는 압력에너지를 통해 확인할 수 있다. 즉, 높은 압력분포가 액적 접촉선 둘레에 위치하는 0.025 s의 최대 신장상태에서 압력에너지는 최솟값을 보이고, 블록한 형상으로 액적 중심에서 높은 압력분포를 가지는 0.04 s에서 압력에너지는 회복하게 된다. 이후 이러한 신장과 수축을 반복하며 이동하는 액적의 형상과 압력에너지가 함께 변화하며 평형상태에 도달하여 멈추게 되며, 점성소산 값도 서서히 변화를 멈추는 것을 확인할 수 있다.

마지막으로 중력에너지는 첫 번째 영역에서는 단조감소를 나타낸 후, 두 번째 영역에서는 신장과 수축 과정과 함께 약하게 진동하고 있으나, 초기화 상태의 중력에너지 값이 표면자유에너지에 비해 상대적으로 매우 작은 것을 알 수 있다. 이것은 반구형 액적이송 과정에서 중력에너지의 영향력이 다른 에너지들에 비해 상대적으로 작아, 액적의 구동원리가 운동에너지와 표면자유에



(a) Kinetic energy



(b) Pressure energy

Fig. 7 Comparison between 2D simulation for a hemicylindrical droplet and 3D simulation for a hemispherical droplet on time evolution of total kinetic and pressure energies

너지 그리고 압력에너지(평균 압력)의 변화에 크게 영향을 받아 이동하는 것을 의미하고 있다. 참고로 본 연구에서 해석대상으로 한 반구형 액적의 경우 중력의 영향이 크게 작용하지 않는 것은 액적의 높이가 크게 변화하지 않기 때문이기도 하나, 체적력과 표면장력의 비로 표현되는 무차원수인 Bond 수 $Bo = \rho g r^2 / \sigma$ 로 설명할 수 있다. 즉, $Bo \ll 1$ 인 경우에 중력효과를 무시할 수 있는데, 반경 $R = 0.002$ m의 반구형 물 액적은 체적에 기초한 상당반경 $r \approx 0.794R$ 을 사용하면 Bo 가 약 0.35의 비교적 작은 값을 가지기 때문에 액적 이동과정에서 중력의 효과는 크게 작용하지 않는다고 볼 수 있다.

3.3 2차원 반원통형 액적과 3차원 반구형 액적에 대한 에너지 변화 해석결과의 비교
가상적인 2차원 원통 액적에 대한 2차원 해석^(6,7)과 반구형 액적에 대한 3차원 해석에서 얻어진

운동에너지와 압력에너지의 시간에 따른 변화 양상을 Fig. 7에 나타냈다. 그림에서 에너지는 정량적인 비교를 위해 동일한 체적을 기준으로 하였다. 즉, 반원통형 액적의 축방향 길이를 조절하여, 반구형 액적과 부피가 같게 하였다.

먼저 Fig. 7(a)의 운동에너지 변화를 살펴보면, 전술한 바와 같이 초기화 이후 반구형 액적의 운동에너지는 상대적으로 강한 소수성 표면 위에서의 응집력과 친수성 표면에서의 부착력이 결합한 시너지효과로 인해 비평형상태로의 액적 변화와 함께 증가하게 되고 소수성표면을 벗어나는 약 0.014 s에서 최댓값을 가진 이후에 단조 감소하게 된다. 이것은 2차원 반원통형 액적의 해석결과와 전체적인 경향은 유사하지만 최댓값 직후에 감소하는 3차원 해석과 다르게, 반원통형 액적의 경우 최댓값을 약 0.019 s에서 보인 후 비교적 서서히 감소하다 약 0.023 s이후부터 단조 감소하는 차이점을 갖는다. 이 차이점은 오직 단방향으로 퍼져나갈 수밖에 없는 반원통형 액적의 경우, 액적형상이 위로 볼록하게 산의 형상을 이루며 에너지를 크게 잃지 않고 보존하지만, 반구형 액적의 경우에는 친수성 표면 전 방향으로 빠르게 퍼져나가기 때문에 발생하는 3차원 특성(Fig. 4(a) 참조)이라고 사료된다.

또한 Fig. 7(b)의 모세관 파로 설명할 수 있는 압력에너지 변화를 통해 신장과 수축을 반복하는 액적형상을 비교할 수 있다. 즉, 반원통형 액적에서는 2차원 해석의 특성상 오직 진행방향으로 크게 세 차례 신장과 수축을 한 뒤에 평형상태에 이르게 되어 압력에너지 변화의 주기가 긴 데 비해, 반구형 액적에 대한 3차원 해석은 진행방향과 진행방향의 수직방향으로 신장과 수축을 주기적으로 수차례 반복하며 이동하기 때문에 압력변동의 주기가 짧은 차이점을 명확하게 보이고 있다. 이것은 Fig. 4(b)의 액적형상으로 설명한 실제 액적이 가지는 특성을 압력에너지의 변화로 설명할 수 있음을 의미한다고 사료된다.

4. 결론

본 논문에서는 외부동력을 사용하지 않고 표면장력에 의해 구동되는 친수성/소수성 표면상에 놓인 초기 반구형 액적의 움직임에 관한 3차원 수치해석을 수행하고, 반원통형 액적에 대한 2차원 수치해석 결과와 비교를 통해 액적이송 메커니즘 및 3차원 특성을 파악하였다. 또한 액적 내부의 각종 에너지에 대한 분석을 통해 액적이송 메커니즘을 보다 명확히 규명하였다.

수치해석은 상용 프로그램인 Fluent 14.0에서 액적의 질량보존을 잘 만족시켜주고 있는 VOF 방법을 사용하여 수행하였다. 구체적으로는 액적이송이 표면장력과 벽면부착에 크게 의존하므로, Brackbill et al.⁽⁸⁾이 제안한 표면장력에 대한 CSF 모델 및 벽면부착 경계조건을 사용하였다. 또한 비정렬격자계 및 체적포착법에서 크게 문제가 되는 번짐 현상과 같은 계면의 비물리적인 변형 및 수치확산 문제를 크게 개선한 것으로 알려진 CICSAM 모델을 사용하였다.

연구결과, 액적의 형상과 내부에너지 분석을 통해 친수성/소수성 표면상에 놓인 반구형 액적이송의 기본적인 원리는 명^(6,7)이 제시한 액적이송의 구동원리와 같이 상대적으로 강한 소수성 표면에서 응집력에 의한 힘과 친수성 표면에서 부착력에 의한 두 힘의 시너지효과로 인해 운동 에너지를 증가시키고, 강한 비평형상태로 인해 액적 내부에 형성되는 비균일 압력 분포를 수정하기 위해 비평형 액적 표면에 발생하는 모세관 파가 액적 이송의 구동력이라는 것을 확인하였다. 또한 액적 내부의 각종 에너지에 대한 분석을 통해 액적의 구동 메커니즘이 운동에너지와 표면자유에너지 그리고 압력에너지의 변화에 크게 영향을 받아 이동하는 것을 확인하였다. 이와 함께, 반원통형 액적에 대한 2차원 해석결과와 비교하여 실제 형상을 가지는 반구형 액적에서는 액적이 친수성 표면에서는 전 방향으로 마치 조개와 같은 형상을 보이면서 접촉선이 빠르게 퍼져 나가는데 반해, 소수성 표면에서는 액적 중심 방향으로 접촉선이 오그라들며, 또한 소수성 표면을 벗어날때 블록효과를 나타내는 현상과 함께 평형상태에 도달할 때까지 진행방향 및 진행방향의 수직방향으로 복합적인 신장과 수축을 하는 현상과 같은 3차원 특성이 있음을 확인하였다.

후기

본 연구는 2013년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지 기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제(20131040200580)입니다. 또한 교육과학기술부와 한국연구재단의 BK21플러스사업의 일환으로 수행된 연구(S14SN01D0502)

입니다.

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," *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," *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., 2014, "Droplet Transport Mechanism on Horizontal Hydrophilic/ Hydrophobic Surfaces," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 38, No. 6, pp. 513~524.
- (8) Brackbill, J. U., Kothe, C. and Zamach, C., 1992, "A Continuum Method for Modeling Surface Tension," *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 335~354.
- (9) Ubbink, O., 1997, *Numerical Prediction of Two Fluid Systems with Sharp Interface*, PhD Thesis, University of London.
- (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) 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.
- (12) Myong, H. K. and Kwon, Y. H., 2015, "Behavior of Liquid Droplet Driven by Capillarity Force Imbalance on Horizontal Surface under Various Conditions," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 37, No. 4, pp. 359~370.
- (13) Gunjal, P. R., Ranade, V. V. and Chaudhari, R. V., 2005, "Dynamics of Drop Impact on Solid Surface: Experiments and VOF Simulations," *AIChE Journal*, Vol. 51, No. 1, pp. 59~78.