2. 분자동역학법을 이용한 Nano-Scale계의 평형상태에 관한 연구

기관시스템공학과 최 현 규
지도교수 김 경 근

분자동역학법은 고체, 액체 그리고 증기를 구성하고 있는 개개 분자들의 운동현상을 파악하여 분자의 위치, 속도, 회전 등을 시간의 경과에 따라 추적하여 물성을 산출하는 전산시뮬레이션이라고 할 수 있다. 유체의 경계층두께는 고전적인 유체역학의 분야뿐만 아니라 열전달 및 물질전달의 분야에 있어서도 중요한 연구주제로서 취급되고 있으나, 관찰대상인 경계층의 두께가 mm 에서 nm 정도에 불과하기 때문에 실험수행이 매우 어렵다. 예를 들어, 기액계면에서의 열/물질 전달현상, 혹은 최근에 연구대상으로서 집중적인 조명을 받고 있는 미세유동관에서의 유동비등이나 유동응축과 같은 상변화현상은 관찰대상의 크기가 일반적으로 mm 이하이기 때문에 가시화는 고사하고 현상의 측정 자체가 곤란한 경우도 있다. 이와 같은 경우에는 분자동역학법을 이용한 전산모의실험은 훌륭한 대용수단이 될 수 있으며, 최소한 전산모의실험을 수행하기 위한 경계조건들의 설정이 실제 실험하고자 하는 계의 실험조건과 비교하여 동일하고 물리적으로 합당한 범위 내에 있다면 실제의 계를 충분히 그리고 정확히 모사할 수 있다. 또한, 기액계면 현상은 제약, 화장품, 식품, 윤활유, 페인트, 세제, 섬유가공 등의 일상생활로부터 약물전달 시스템, 초박막 기술, 테이프의 가공, 나아가 초미세 전자회로의 설계와 가공에 이르기까지 인간의 생활과 산업의 어디에나 존재하므로 계면에서의 특성을 예측하는 것은 중요한 문제가 되어왔다.

최근들어 기액계면의 온도경계에 대한 연구가 주목을 받고 있는 가운데 나노스케일계에서 연구대상인 계가 열적평형상태에 있음에도 기액계면상에 온도차가 발생하고 있다는 연구가 발표되고 있다. 이들의 연구결과는 계가 나노스케일이나 마이크로 스케일의 경우 열역학적 평형상태에 대한 정의가 어떠한 것인지에 대한 상당히 흥미로운 의문을 남기게 된다. 고전열역학의 관점에서는 계가 평형상태에 있다면 계는 측정장치의 오차범위내에서 동일한 물리적 값을 가지게 된다고 되어있다. 예를들면, 계가 열적평형상태에 있다면, 실제 측정하고자 하는 물성인 온도는 증기영역과 액체영역에서 동일한 값을 나타내야 한다는 것을 말해주고 있다.

지금까지의 수많은 분자동역학법에의한 연구에서 액체와 증기, 고체와 액체, 고체와 고체간의 경계에서의 온도차를 연구하였음에도 불구하고, 평형상태시의 증기와 액체영역에서 온도차가 발생하고 있다는 연구결과는 상기의 연구결과를 빼고는 전혀 보고되고 있지 않다. 계면에서 발생되는 온도 불연속현상은 Maruyama 등에 의해 발표된 고체와 액체간의 경계에서 온도점프현상이 관찰되었으며, 이는 증발이나 응축현상의 분자동역학연구에서 발견되었으

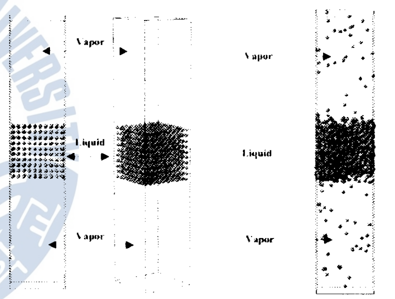
며, Kapitza 저항이라고 한다.

이들의 연구는 고체와 액체의 경계면의 온도점프현상으로서, 계면열저항에 상당하는 액체 열전달 두께로부터 계산되어 진 것이다. 따라서, 액체와 증기 두 개의 상이 공존하는 영역에서 발생되는 온도 불연속현상에 대해 규명할 필요성이 있다. 본 연구에서 규명하고자 하는 것은 선행연구에 의한 미시계의 기액계면 온도 불연속현상이 온도 분석과정에서 해석상의 착오로인해 발생된다는 가정하에 미시계에서도 거시계와 마찬가지로 평형상태에서도 기액계면의 열적평형상태인 온도차가 발생하지 않는다는 것을 규명하고자 하는 것이다.

분자동역학법에 의한 전산시뮤레이션에서 주로 상용되고 있는 식(1)은 Lennard-Jones 12-6 포텐셜로서, 단원자 분자인 아르곤을 통해 수행하였다.

$$\phi(r) = 4 \cdot \epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right\} \qquad (1)$$

아르곤의 격자구조는 고체상태에서는 면심입방격자인 FCC구조를 가지고 있으나, 액체와 증기영역에서는 단순입방격자인 SCS격자를 사용하여 계산하였다. 우측의 그림(a)는 전산시뮬레이션의 초기배치상태를 보여주고 있는 것으로서, 중간에 액체영역과 상단과 하단에 증기영역으로 구분하여 초기배치시켰다. 그림(b)는 평형상태가 된 후의 상태로서, 액체영역에서 분자가 증기영역으로 이동하여 액체와 증기영역간의 평형상태를 이루고 있다.



(a) Initial State (b) Equilibrium State

분자운동은 뉴튼의 제2법칙을 미분하여 각 위치에 해당되는 분자의 속도와 위치를 알았으며, 시간의 경과에 따라 추적하여 분자의 이동경로를 파악하였다.

온도분석은 그림(a)에 해당되는 계의 높이방향을 1Å으로 구분하고, 구간안에 포함된 분자가 보유하고 있는 운동에너지로부터 온도를 계산하게 된다. 이 구간의 온도는 시간의 경과에 따라 분자가 이동되므로, 평형상태의 분자의 이동을 정지시킨후 구간안에 포함된 분자로부터 온도를 계산하고 시간단계에 따라 온도를 순차적으로 계산하고 전체 계산시간후 시간평균온도로서 정의하게 된다. 그러나, 액체영역에 비하여 증기영역의 분자가 희박하므로, 증기영역의 높이방향의 구간에서 분자가 존재하지 않는 구간이 발생하게 되는 것이다. 이 영역은 분자의 온도를 분자의 운동에너지로부터 계산됨에따라 분자 자체가 없는 경우는 온도자체를 정의할 수 없다는 오류를 포함하게 된다. 식(2)는 선행연구에서 사용된 식으로서, 증기영역의 분자가 존재하지 않는 영역도 계산에 포함한 식이다. 따라서, 식(2)를 통해 계산된 식은 전체 시간에 대한 시간평균을 통해 증기와 액체영역사이에 온도차가 발생하게 되는 것이다.

$$T_{sys} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{mv_i^2}{fk_B}\right) \tag{2}$$

식(3)은 분자가 존재하지 않는 구간에 대하여 계산시에 배제시키고 계산한 식으로서, 식(3)을 통해 계산한 결과는 기액계면상에 온도차가 발생하지 않게된다.

$$T_{sys} = \frac{1}{(n-n_{empty})}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{mv_i^2}{3k_B}\right) \tag{3}$$

증기영역의 분자가 존재하지 않는 구간을 계산시에 배제한 이유는 실제 거시계에 해당되는 분자는 아보가드로수만큼의 분자에 해당되지만, 현재까지의 전산장치로 계산하기에는 불가능하다. 그러나, 실제분자의 거동을 분석하고 해석하기에 수 천~수 만개의 분자만으로도 가능하게 된다.

거시계의 증기영역은 높이방향의 구간을 1Å으로 구분한다 하더라도 무수한 분자개체로 인하여 분자가 존재하지 않는 구간이 발생하지 않으며, 설상존재하지 않는다 하더라도 분자가 존재하지 않는 구간은 양단에 존재하는 분자가 보유하고 있는 복사에너지로인하여 양단 온도의 평균온도를 취하게 된다. 따라서, 분자가 존재하지 않는 영역이다 하더라도 온도자체를 계산할 수는 없다 하더라도 온도자체가 없다고는 할 수 없는 것이다.

본 연구에서는 상기의 이유로 인하여 증기영역의 온도계산에서는 분자가 존재하지 않는 영역에 대하여 계산에 포함시키지 않는 식(3)을 사용하였으며, 거시계만큼의 분자를 전산모의 하는 경우는 식(2)를 사용하여도 동일한 결과값을 얻을 수 있게 될 것이다. 상기의 연구를 통해 계가 평형상태에 있다면 계의 크기에 관계없이 기액계면 온도의 불연속현상이 발생되지 않으며, 거시계와 마찬가지로 기액계면상에 온도평형을 이룬다.

3. 한·중·일 전통 선박에 관한 비교연구

- 16~18세기 미곡운송선을 중심으로 -

운항시스템공학과 최 운 봉
지도교수 허 일

동북아에 위치하여 있는 한·중·일 3국은 옛 부터 동일한 文化圈에 속해있었으며, 모두