

비푸리에 열전도 현상에 관한 고찰

최순호[†], 김창복⁺⁺, 최현규⁺⁺⁺, 윤석훈⁺⁺⁺⁺, 김명환⁺⁺⁺⁺, 오철⁺⁺⁺⁺

A Study of the Non-Fourier Heat Conduction Phenomena

Soon-Ho Choi · Chang-Fu Jin · Hyun-Kue Choi · Seok-Hoon Yun · Myoung-Hwan Kim · Cheol Oh

Abstract : Although the law of classical fourier heat conduction predicts the heat conduction phenomena occurred in most engineering fields with a good accuracy, it is also well-known that the conventional fourier law of a heat conduction has an application limit when the heating and cooling are periodic for a short duration or when the heat conduction is analyzed in the extremely low temperature region. This application limit of classical fourier law results from the fact that it assumed the infinite speed of a heat wave. In this study, we investigated the feasibility of whether the molecular dynamics could be used to calculate the speed of a heat wave through a solid. The calculated sound velocity showed a good agreement with the theoretical prediction qualitatively. From the calculated results, we confirmed that the same methodology can be applied the evaluation of the speed of a heat wave.

Key words : Impulse(충격), Molecular dynamics(분자동역학), Non-fourier heat conduction(비푸리에 열전도), Relaxion time(완화시간), Acoustic wave velocity(음속)

1. 서론

현재 열전도현상(Heat Conduction Phenomena)을 해석하기 위해 사용되고 있는 식(1)의 푸리에법칙(The Law of Fourier)은 실험결과에 그 바탕을 두고 있는 경험법칙으로서 대부분의 공학적인 응용에 있어 정확한 예측을 제공해주며, 이는 실험결과로부터도 충분히 확인되고 있다[1].

$$q(r, t) = -k \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \quad (1)$$

식(1)의 열전도방정식은 식(2)의 에너지방정식에 대입하면 계의 온도분포의 파악이 가능한 식(3)의 일반열전도방정식이 구해진다.

$$-\frac{\partial q(r, t)}{\partial r} + g(r, t) = \rho c_p \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 T(r, t)}{\partial r^2} + g(r, t) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} \quad (3)$$

상기의 식들에서 g 는 계의 단위시간당, 단위체적당의 발열량이고, $\alpha = k/\rho c_p$ 는 열확산계수(Thermal Diffusivity)이며, 이들 식을 자세히 관찰하면 계의 내부에서 발생한 열적교란(Thermal Disturbance)을 계 내부의 모든 부분이 순식간적으로 인식한다는 것을 나타하며, 이는 열적교란이 무한대의 전파속도(Infinite Propagation Speed)로서 전달되고 있음을 의미한다[2]. 물론 이는 물리적으로 비현실적인 사실임에는 틀림없으나 전술한 바와 같이 상기의 식들은 대부분의 공학적인 응용에 있어 정확한 결과들을 제공해주고 있으며, 비평형정상상태(Non Equilibrium Steady State, NESS)의 열전도의 경우 열적교란을 고려할 필요가 없으므로 상기의 식들은 타당하다고 할 수 있다.

하지만 최근의 NEMS/MEMS와 같은 극초소형기기의 출현과 더불어 레이저가공은 필수적인 공정으로 자리매김하고 있으며, 이와 같이 레이저를 이용한 극히 짧은 시간동안의 주기적이고 반복적인 가열과 냉각이 행해지는 경우와 같이 계의 열적응답 시간(Thermal Response Time)이 중요하거나, 분자들이 거의 고정상태(Frozen State)에 있는 절대영도에 가까운 극저온 영역에

서는 열적교란이 계의 평균온도에 비해 매우 크게 되어 파동특성(Wave Nature)의 열전도가 지배적으로 된다. 이와 같은 경우에는 식(1), (2), (3)의 고전열전도방정식은 더 이상 적용되지 않으며, 1940년대에 처음으로 실험에 의해 입증된 열파(Heat Wave)의 존재는 현재까지 큰 관심의 대상으로 많은 연구가 수행되고 있으나 다양한 물질에 대한 열적교란의 전파속도에 대한 실험결과는 아직 명백하게 정립되지 않은 상태이다[3].

본 연구는 고체물질 내에서의 열적교란의 전파속도를 구하기 위해 저자들이 계획하고 있는 일련의 연구 중에서 분자동역학적인 방법(Molecular Dynamics Method)을 이용한 접근법의 타당성을 확인하기 위해 처음으로 수행한 결과로서 고체의 경계면에 부여한 충격(Impulse)의 전파속도를 계산하고, 이로부터 다음의 2장에 설명된 비푸리에 열전도방정식(Non-Fourier Heat Conduction Equation)에 포함된 열적교란의 전파속도가 전산모의실험(Experiment of Computer Simulation)을 통해서도 구해 질 수 있다는 가능성을 보였다.

2. 비푸리에 열전도방정식

1장에서 설명한 바와 같이 고전열전도방정식, 즉 푸리에 열전도방정식은 열적교란이 무한대의 전파속도로 계 내부 전체에 전파된다는 것을 의미하므로 이는 명백히 비현실적인 상황이며, 실제로는 식(4)와 같이 현재의 시점에 계 내부를 흐르는 열유속(Heat Flux)은 특정시간 τ 이전에 형성된 계의 온도구배(Temperature Gradient)에 의해 결정되거나, 혹은 식(5)와 같이 현재시점의 온도구배는 τ 이후의 열유속을 결정할 것이다[4].

$$q(r, t) = -k \frac{\partial T(r, t - \tau)}{\partial r} \quad (4)$$

$$q(r, t + \tau) = -k \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \quad (5)$$

식(5)의 열유속을 테일러의 급수전개를 하고 2차항 이상의 고차항을 무시하면,

$$q(r, t + \tau) = q(r, t) + \frac{\partial q(r, t)}{\partial t} \tau + O(\tau^2) = -k \frac{\partial T(r, t)}{\partial r}$$

† 책임저자(한국해양대학교 해사대학), E-mail:choi_s_h@naver.com, Tel: 051)410-4261

++ 한국해양대학교 대학원

+++ 군산대학교, 동력기계시스템공학과

++++ 한국해양대학교 해사대학 기관시스템공학과

$$\tau \frac{\partial q(r,t)}{\partial t} = -q(r,t) - k \frac{\partial T(r,t)}{\partial r} \quad (6)$$

식(6)을 시간 t 에 대해서 한번 더 편미분해주면,

$$\tau \frac{\partial^2 q(r,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial q(r,t)}{\partial t} + k \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} \right) = 0 \quad (7)$$

식(7)의 좌변 마지막 항은 결과에 어떤 영향도 주지 않는다는 사실을 이용하여 편미분 순서 ∂r 와 ∂t 의 미분순서를 바꾼 것에 불과하다. 식(2)의 에너지방정식에서 내부발열량을 무시하면,

$$\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial q(r,t)}{\partial r} \quad (8)$$

식(8)을 식(7)에 대입하고 정리하면,

$$\tau \frac{\partial^2 q(r,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial q(r,t)}{\partial t} - \frac{k}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial r^2} = 0$$

$$\frac{\partial^2 q(r,t)}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial q(r,t)}{\partial t} = \frac{k}{\tau \rho c_p} \frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial r^2} \quad (9)$$

상식 우변의 $k/\tau\rho c_p$ 는 제2종의 음속 혹은 제2음속(Second Sound Velocity)으로 불리는 열파(Heat Wave)의 전파속도 C_2 의 제곱($C_2 = \sqrt{k/\tau\rho c_p}$)이며, 식(9)가 열적교란의 유한한 전파속도를 가정한 비푸리에 열전도방정식이다.

3. 계산결과 및 결론

본 연구에서는 분자동역학법을 이용한 모의실험이 열파의 전파속도를 적절히 측정할 수 있는지를 확인하기 위하여 Fig. 1에 보인 것과 같이 계의 길이가 나노사이즈인 유한한 길이를 가지는 고체 아르곤 계를 fcc<111>의 배열로 배치하였으며, 고체계의 시뮬레이션을 수행하는 경우에는 미소한 분자간 거리의 차이로 할지라도 계의 내부에 상당한 응력을 초래하는 관계로 내부응력(Internal Stress) Zero의 상태로 유지될 수 있도록 식(10)을 이용하여 분자간 거리를 결정하였다[5].

$$r_0(T) = C_0 + C_1 T + C_2 T^2 \quad (10)$$

$$C_0 = 1.09294, C_1 = 3.73333 \times 10^{-4}, C_2 = 2.26667 \times 10^{-6}$$

충격에 대한 계산계의 개개 분자의 반응을 보다 쉽게 구분하기 위해서 계산계는 초기에 특정온도로 평형상태를 유지시켰으며, 평형상태를 확인한 후 한쪽의 고정경계면을 약간 움직임으로서 계에 충격을 가했다. 인가된 충격은 Fig. 2에 보인 것과 같이 반대쪽의 고정경계면에 부딪쳐서 반사되며, 이 시간간격을 측정함으로써 고체계의 정보전달 속도인 음속을 구하였다. Fig. 3은 아르곤과 다양한 가상적인(Imaginary) L-J 포텐셜 물질에 대해 구한 음속의 측정결과를 보이는 것이다. 탄성체 이론에 의하면 고체의 음속은 식(10)과 같이 영계수(Young's Modulus)를 밀도로 나눈 값의 제곱근, 즉 0.5의 지수항으로 주어지나 Fig. 2의 측정결과는 계의 평균온도에 상관없이 식(11)보다 약 20% 정도 높은 값을 보이는 약 0.6의 지수항을 가짐을 알 수 있었다.

$$a = \sqrt{Y/\rho} \quad (11)$$

전산모의실험에 의한 음속의 측정치가 식(11)의 이론식보다 높게 평가되는 것은 본 연구에서 사용한 계산계의 경우 실제의 다결정체의 고체내부에 존재하는 격자결함(Defect)이나 전위(Dislocation)등과 같은 결함이 전혀 존재하지 않는 단결정체의 완전무결한 결정이기 때문에 오히려 당연하다고 할 수 있다.

본 연구에서는 제2음속을 분자동역학법을 이용하여 평가할 수 있는지의 가능성을 검토하기 위해서 경계면에 충격을 인가하여 음속을 측정하였으며, 측정된 음속은 적어도 정량적으로 타당함을 확인할 수 있었다. 추후의 연구에서는 다양한 경계조건에 대해 충격을 인가하는 대신 고온열원(Heat Source)을 경계면에 접촉시킴으로서 열파의 진행속도, 즉 제2음속을 구할 예정이며, 음속과 열파의 전파속도와와의 관계를 기존의 연구결과들과 비교함으로써 다양한 물질들의 제2음속을 확인할 수 있을 것으로 기대하고 있다.

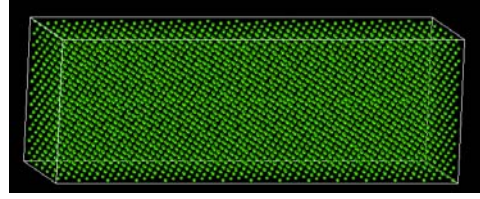


Fig. 1 Simulation system arranged with fcc<111>.

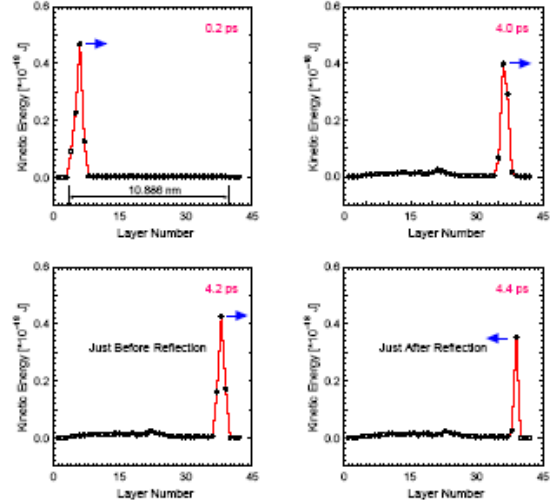


Fig. 2 Impulsed shock and reflection.

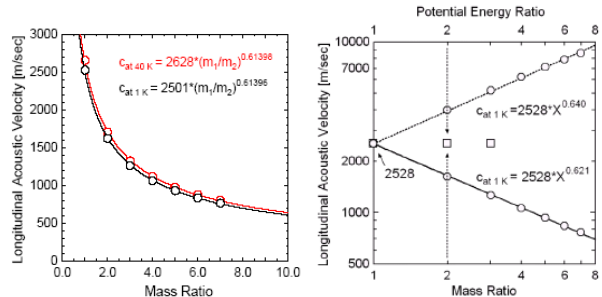


Fig. 3 Measured acoustic velocity from simulation.

참고문헌

- [1] F. P. Incropera and D. P. Dewitt, "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", John Wiley & Sons, 1996.
- [2] M. N. Ozisik and B. Vick, "Propagation and Reflection of Thermal Waves in a Finite Medium", Int. J. Heat & Mass Transfer, Vol.27, No.10, pp.1845-1854, 1984.
- [3] D. D. Joseph and L. Preziosi, "Heat Waves", Review of Modern Physics, Vol.61, No.1, pp.41-73, 1988.
- [4] D. Y. Tzou, "An Engineering Assessment to the Relaxation Time in Thermal Wave Propagation", Int. J. Heat & Mass Transfer, Vol.36, No.7, pp.1845-1851, 1993.
- [5] Soon-Ho Choi, Shigeo Maruyama, Kyung-Kun Kim and Jung-Hye Lee, "Evaluation of Phonon Mean Free Path in Thin Films by Using Classical Molecular Dynamics", J. Kor. Phys. Soc., Vol.43, No.5, pp.747-753, 2003.