

# 2자유도 진동계의 운동정보 전달에 관한 연구-경계면열저항

최순호<sup>+</sup>·최현규<sup>++</sup>·김창복<sup>++</sup>·김경근<sup>+++</sup>·윤석훈<sup>+++</sup>·오철<sup>+++</sup>

## A Study on the Transfer of the Oscillator's Motion Information with 2 Degrees of Freedom - Thermal Boundary Resistance

Soon-Ho Choi, Hyun-Kue Choi, Chang-Fu Jin, Kyung-Kun Kim, Seok-Hun Yoon and Cheol Oh

**Abstract** : The analysis of the thermal boundary resistance is very important in the both cases of microscale and macroscale systems because it plays a role of thermal barrier against a heat flow. Especially, since fairly large heat energy is generated in microscale or nanoscale systems with electronic chips, the thermal boundary resistance is a key factor to guarantee the performance of those devices. In this study, the transfer of the oscillator's motion information with 2 degrees of freedom is investigated for clarifying the mechanism of a thermal boundary resistance. We found that the transfer of the oscillator's motion information is defined as a cross-correlation coefficient and the magnitude of it determines the temperature jump over a solid interface. That is, the temperature jump over an interface increases as the magnitude of a cross-correlation coefficient decreases and vice versa.

**Key words** : Contact thermal resistance(접촉열저항), Cross-correlation coefficient(상호상관계수), Interface(경계면), Molecular dynamics(분자동역학), Thermal boundary resistance(경계면열저항)

### 기호설명

$a$  : 가속도,  $m/s^2$   
 $C$  : 상호상관계수, 무차원  
 $F$  : 힘, N  
 $l$  : 분자간 초기배치 거리, m  
 $m$  : 분자 1개의 질량, kg  
 $r$  : 거리, m 혹은 Å  
 $t$  : 시간, s  
 $v$  : 속도, m/s  
 $x$  :  $x$ 방향 변위, m 혹은 Å  
 $\alpha$  : 이중분자의 질량비, 무차원  
 $\beta$  : 이중분자의 포텐셜웰의 비, 무차원  
 $\epsilon$  : 포텐셜웰(Potential Well)의 깊이, J  
 $\eta$  : 에너지반사율, 무차원

$\sigma$  : 분자의 직경, m 혹은 Å  
 $\tau$  : 시간간격, s  
 $\psi$  : 2체 포텐셜에너지, J

### 1. 서론

최근, 기존의 물리적 상식과 비교하여 직관적으로 받아들이기 힘든 연구결과들의 발표에 의해 진동자들이 체인(Chain)형상으로 연결된 일차원 진동계의 열전달특성[1,2]과 이중물질의 결합에 의해 형성되는 고체의 접합경계면에서 관찰되는 경계면열저항(Thermal boundary resistance)에 대한 분자적 관점에서의 연구[3-6]가 주목받고 있다.

일차원 체인형상 진동자의 경우 열전도율은 체인의 길이에 비례해서 무한히 증가하는 특성을 가지는 것

+ 책임저자, 한국해양대학교, 해사대학, 기관시스템공학부, E-mail:choi\_s\_h@naver.com, Tel: 051)410-4261

++ 한국해양대학교 대학원, 기관시스템공학부

+++한국해양대학교, 해사대학, 기관시스템공학부

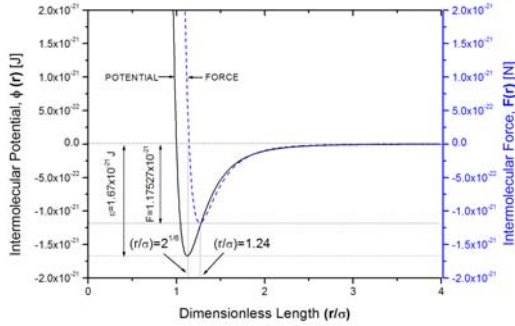


Fig.1 L-J Potential and intermolecular force. It is seen from this figure that the interaction of molecules can be ignored if the distance between two molecules exceeds 2.5 $\sigma$ .

으로 보고되고 있으며, 이는 계의 크기가 일정 크기 이상이 되면 물성이 벌크(Bulk)상태의 값과 같아진다는 최근의 미소계(Microscale or nanoscale system)에 대한 연구결과와 비교할 때 납득하기 힘든 현상이다.

고체의 경계면에서 발생하는 열저항의 경우에는 거시계(Macroscale system)에 있어서 일반적으로 접촉열저항(Contact thermal resistance)으로 불리우며, 이는 상당히 오래전부터 연구가 수행된 역사를 가지고 있다[7-10]. 거시계에 대한 접촉열저항은 (1)접촉압력의 증가, (2)접촉표면의 조도(Surface roughness)의 감소, (3)공극(Air void) 사이에 열전도율이 높은 연성재료의 삽입 등에 의해 현저히 감소시킬 수 있다. 따라서 이와 같은 사실로부터 경계면의 접촉이 분자적 수준에서 보아 결함이 없는 완성무결성(Perfect Integrity)을 유지하고 있다면 열저항이 존재하지 않을 것이라는 예상을 쉽게 유추할 수 있다. 하지만 최근에 수행된 분자동역학을 이용한 연구[11-13]에 의하면 이와 같은 경계면에서도 열저항이 여전히 존재함이 보고되었다.

경계면열저항은 열의 이동에 일종의 장벽과 같은 역할을 하기 때문에 함으로본 연구는 최근에 활발히 연구되고 있는 미소계의 열전달특성 가운데에서, 특히 경계면에서 발생하는 열저항의 메커니즘(Mechanism)을 밝히기 위해 일차원 체인상의 2자유도 진동계에 분자동역학법을 적용하여 경계면을 구성하는 이중분자간의 운동정보가 어떤 상관관계를 가지고 전달되는지 파악하기 위해 수행되었다.

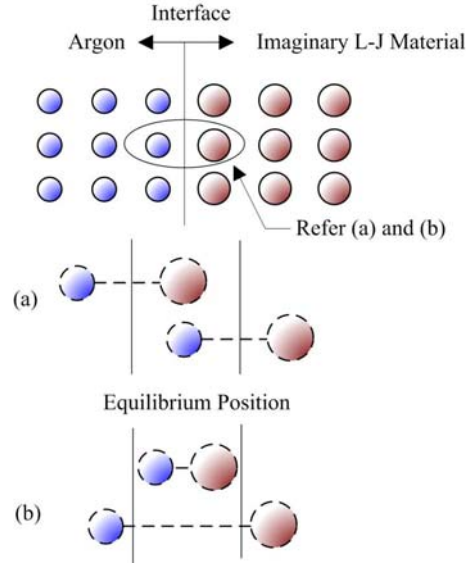


Fig.2 Simulation system with 2 degrees of freedom. The left molecule is the real argon molecules and the right molecule is the imaginary L-J Potential material. (a) and (b) present a motion of synchro mode and anti-phase mode, respectively.

## 2. 분자동역학 시뮬레이션

시뮬레이션 수행을 위한 물질은 Lennard-Jones 포텐셜을 대표하는 물질인 아르곤과 이와는 다른 L-J 포텐셜을 가지는 가상의 분자를 사용하였다. L-J 포텐셜 물질의 분자간 상호작용은 식(1)로 주어지며, 이의 미분치로부터 식(2)와 같이 분자간 상호작용력을 구할 수 있다.

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

$$F(r) = 24 \cdot \epsilon \left\{ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \frac{1}{r} \quad (2)$$

상기의 식들에서 아르곤의 경우  $\epsilon = 1.67 \times 10^{-21} J$ ,  $\sigma = 3.4 \text{ \AA}$  이다. 분자동역학법에서는 식(2)의 분자간의 상호작용력을 뉴턴의 제2법칙,  $F = m \cdot a$ 을 적용해서 분자들의 변위를 계산하는데, 이 경우 아르곤 분자 1개의 질량값은  $m = 6.634 \times 10^{-26} kg$ 으로 주어진다. Fig. 1은 상기의 식(1)과 식(2)의 L-J 포텐셜과 분

자간 상호작용력을 보이는 그래프이며, 이로부터 분자간의 상호거리가  $2.5\sigma$  이상 떨어지면 상호작용력을 무시할 수 있음을 알 수 있다. 본 연구에서는 분자간 상호작용력을 무시하는 절단거리로서  $3.5\sigma$ 를 사용하였다.

분자들의 변위를 계산하기 위해서는 미분방정식으로 주어지는  $F=m \cdot a$ 의 운동방정식을 컴퓨터가 계산할 수 있는 유한차분형태로 변경시켜야 하는데, 본 연구에서는 가장 단순한 형태의 유한차분인 오일러법(Euler Method)을 사용하였다. 오일러법을 적용하는 경우 시간간격  $\Delta t$  이후의 분자의 속도와 이동거리는 각각 식(3)과 식(4)에 의해 계산되며, 계산 경험상 Fig. 2과 같은 고체상에 대해서는  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-15} s$ 가 최적값으로 추천되고 있다[12-15].

$$v(t + \Delta t) = v(t) + a(t) \cdot \Delta t \quad (3)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t) \cdot \Delta t \quad (4)$$

본 연구에서는 계산의 편의를 위하여 분자의 운동은  $x$ 방향으로만 움직인다는 구속조건을 부여하였으며, 분자들의 초기배치를 위한 분자간 거리는 L-J 포텐셜이 최소가 되는 거리, 즉 분자간 상호작용력이 0가 되는 위치인  $l = 1.14\sigma$ 를 택하였다. 식(3)과 식(4)를 이용하여 분자의 배치상태를 연속적으로 계산하기 위해서는 분자간의 상호작용력  $F(t)$ 를 이용하여 가속도  $a(t)$ 를 평가해야만 하는데, 2.1절에서 이미 언급한 바와 같이 이를 위해 분자간 상호작용범위 이내에 다른 분자들이 포함될 수 있도록 Fig. 2에 보인 것과 같이 총 12개의 체인형상으로 분자들을 배치하였다.

Fig. 2에 보인 분자들은 시뮬레이션의 단순화를 위해서 경계면을 형성하는 중앙의 2개의 분자들만을 분리한 것으로  $x$ 방향으로만 운동한다고 가정하였다. 물론 이와 같은 접근은 극단적인 단순화라고 간주될 수도 있지만 계를 구성하는 고체분자들은 평형위치를 중심으로 진동하기 때문에 장시간에 걸친 평균적인 변위를 고려해본다면 2개의 분자들을 이용하더라도 경계면상에서 운동하는 분자들의 운동에 관한 충분한 정보를 제공한다고 판단한다. 중앙에 경계면을 이루는 2종류의 분자들은 분자직경과 포텐셜의 깊이가 서로 다른 이중분자들과 상호작용하므로 이를 고려하기 위해 Lotentz-Berthelot의 혼합법칙(Mixing rule)을 사용하였다[16].

### 3. 경계면열저항

전술한 바와 같이 경계면열저항은 거시계뿐만 아니라 미시계에 있어서도 매우 중요한 열적 특성이며, 이의 메커니즘을 밝히기 위한 많은 연구가 진행되어 다양한 모델들이 제시되었다. 대표적으로는 Little에 의한 Acoustic mismatch model(AMM)과 Swartz 등에 의한 Diffuse mismatch model(DMM)이 제안되었으나 1 K 이하의 극저온영역을 벗어나면 실험결과와 비교하여 수십배에서 수백배의 차이를 보이는 것으로 알려져 있다[3,4]. 최근에는 Choi와 Maruyama에 의해 고전적인 파동이론(Classical Wave Theory)에 근거하여 열전도율에 자유전자(Free electron)가 전혀 기여하지 않는 절연물질(Insulating material)에 적용할 수 있는 식(4)의 C-M 모델을 제시하였다[12,13].

$$\eta = \left( \frac{1 - \frac{\alpha}{\beta}}{1 + \frac{\alpha}{\beta}} \right)^2 \quad (5)$$

상식에서  $\alpha$ 는 이중분자간의 질량비에 의한 영향을 나타내는 계수이고  $\beta$ 는 포텐셜의 깊이비에 의한 영향을 나타내는 계수, 그리고  $\eta$ 는 동일한 시뮬레이션계에 대해서 경계면이 있는 경우와 없는 경우에 대해서 각각 계산한 열유속(Heat flux)으로부터 계산한 에너지반사율(Energy reflection coefficient)을 의미한다.

AMM과 DMM은 포논(Phonon)의 전달이론으로부터 이론적으로 유도되었으며, C-M 모델은 파동이론으로부터 유도된 관계로 AMM과 DMM이 보다 일반적인 보편성을 가지는 것으로 판단되나 적어도 절연물질의 경우에 대해서 C-M 모델이 분자동역학법을 이용한 계산실험결과와 비교하여 상당히 정확한 예측치를 제공하며, 물리적인 설득력을 가지고 있다고 할 수 있다.

C-M 모델은 전술한 바와 같이 경계면에 입사되는 에너지의 일부가 반사되고 그 나머지가 경계면을 통과한다는 파동이론이 그 근거이므로 이는 고온측에 위치하는 분자의 운동정보가 저온측에 위치하는 분자에 전달되는 과정에서 일정부분의 정보가 누락되고 있음을 의미한다. 이는 분자간의 상호상관계수(Cross-correlation coefficient)를 파악함으로써 정량적으로 구

할 수 있으며, 따라서 이는 경계면열저항의 발생기구 (Mechanism)에 대한 또 다른 해석을 부여할 수 있을 것으로 예상된다.

#### 4. 운동정보와 상호상관계수

상호상관계수는 두 개의 신호정보  $f(t)$ ,  $g(t)$ 가 존재할 때 두 신호의 유사성을 알려주는 척도로서 식(6)으로 주어진다[17].

$$C(\tau) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t f(t) \cdot g(t+\tau) dt \quad (6)$$

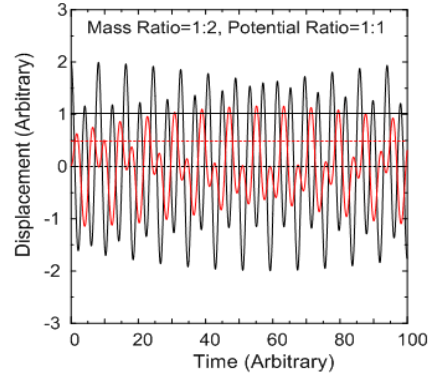
본 연구에서의 대상은 분자의 운동정보이므로 신호정보로서 평형위치로부터의 분자의 변위를 채택하였으며, 변위정보는 계산상 이산적인 값으로 주어지므로 식(7)을 이용하여 2자유도 분자계의 운동정보의 상호관계를 파악하였다.

$$C(j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \cdot g_{i+j} \quad (7)$$

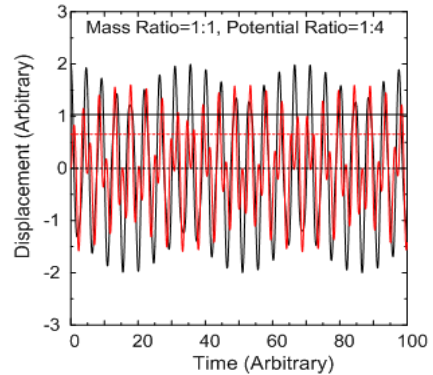
상식에서  $f_i$  및  $g_i$ 는 각각 Fig. 2에 보인 것과 같은 분자1과 분자2의  $i \times \Delta t$  시각에서의 변위를 의미하며,  $j$ 는 상호상관을 평가할 때의 두 신호간의 시간차  $j \times \Delta t$ 를 의미한다. 하지만 두 신호의 유사성을 평가하기 위한 상호상관계수의 계산을 위해서 식(7)을 그대로 사용해도 지장은 없지만 신호를 취하는 시간이 길면 길수록  $C$ 의 값은 크게 계산되기 때문에 표준화 (Normalization)과정을 반드시 거쳐야 하며, 이 경우  $C$ 의 값은 0과 1 사이의 값을 가지게 된다.  $C=0$ 는  $\tau = j \times \Delta t$ 의 시간을 이격시켰을 때 두 신호간에 어떤 연관성도 존재하지 않음을 의미하며,  $C=1$ 은 완전히 일치하는 동일한 신호임을 의미하므로 두 분자의 변위정보로부터 계산된 상호상관계수는 경계면에서의 분자간 운동정보의 전달을 가능하는 척도로서 간주할 수 있다.

#### 5. 계산결과

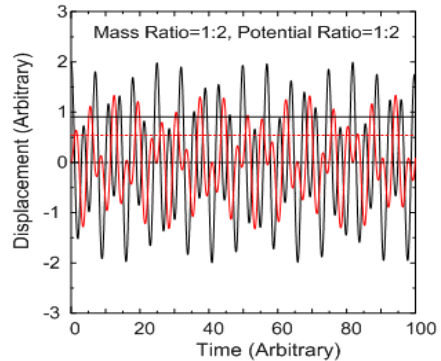
본 연구에서는 Fig. 2에 보인 2자유도 진동자의 동기모드(Synchro mode)와 비동기모드(Anti-Pase mode)가 혼재된 운동하에서 질량과 포텐셜에너지를 변경하면서 변위를 측정하였다. Fig. 3은 질량비 및 포텐셜비가 존재할 때의 두 진동자의 변위차를 보이는 것이으



(a) Mass Ratio=1:2



(b) Potential Ratio=1:2



(c) Mass Ratio=1:2 & Potential Ratio=1:2

Fig.3 Displacement difference when the properties of L-J materials are different. (a) is the case for a mass ratio; (b) for a potential ratio; (c) for a mass ratio and potential ratio, simultaneously.

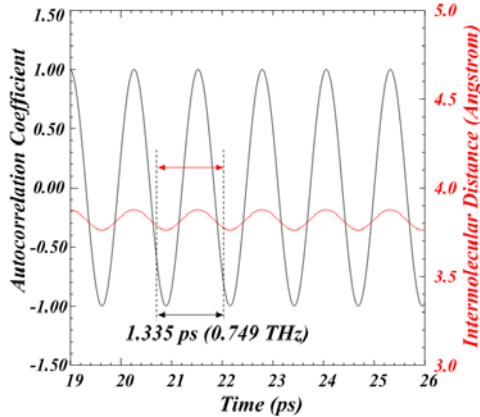


Fig.4 Auto-correlation coefficient and cross-correlation coefficient for the mass ratio of 1:4. The curve with a small amplitude presents cross-correlation coefficient.

로서 (a)는 질량비만이 존재할 때, (b)는 포텐셜비만이 존재할 때, (c)는 질량비와 포텐셜비가 동시에 존재하는 경우이다. Fig. 3에서 알 수 있듯이 질량비가 다른 경우의 변위차가 포텐셜비가 있을 경우의 변위차와 비교하여 큰 사실로부터 운동정보의 전달, 즉 경계면 열저항은 경계면을 구성하는 이종물질의 질량차에 더 의존한다는 것을 알 수 있다.

Fig. 4는 Fig. 3의 질량비가 1:4인 경우, 분자 1개만의 변위정보로부터 식(7)을 이용하여 구한 자기상관계수(Auto-correlation coefficient)를 계산한 예이다. 자기상관계수의 경우에는 식(7)의  $f_i \cdot g_{i+j}$ 를  $f_i \cdot f_{i+j}$ 로 대치함으로써 구해지며, 상호상관계수의 계산에서는 Fig. 3에서 보인 변위차와 동일하게 질량비가 증가할수록 감소폭이 크게 나타냄을 보였으며, 이로부터 경계면 열저항의 크기 역시 정량적으로 구할 수 있음을 알 수 있다.

## 6. 결 론

본 연구는 계속 수행중인 관계로 금번의 연구결과 발표시점에 있어 다양한 물성치의 변화에 대한 결론은 유보할 수밖에 없지만 경계면 열저항은 운동정보의 전달과정에서 경계면의 존재로 인해 고온측 분자의

운동정보가 일부 누락내지는 소실됨에 의해서 발생된다고 할 수 있으며, 상호상관계수를 파악함으로써 경계면 열저항의 정량적인 분석의 시도가 가능함을 시사하고 있다.

현재까지의 연구결과에 의하면 경계면 열저항의 크기는 이종분자의 포텐셜의 차이보다는 질량차이에 더 크게 의존한다는 것을 알 수 있었으나, 이들 효과가 혼재되는 경우에는 뚜렷한 경향을 보이지 않음을 알 수 있었다. 하지만 상호상관계수에 대한 후속연구가 완료되면 경계면 열저항의 발생기구가 분자간의 운동정보의 전달량 및 경계면에서의 소실량으로부터 계산 가능함을 보일 수 있을 것으로 기대된다.

## 후 기

이 논문의 내용 중, 저자 최순호와 김경근에 의해 수행된 부분은 2004년도 학국학술진흥재단의 지원에 의해 연구되었으며, 이에 감사드립니다 (KRF-2004-002-D00208).

## 참고문헌

- [1] C. Giardiná, R. Livi, A. Politi and M. Vassalli, "Finite Thermal Conductivity in 1D Lattices", *Phys. Rev. Letter*, Vol. 84, No. 10, pp.2144-2147, 2000.
- [2] Tomaz Prosen and David K. Campbe, "Momentum Conservation Implies Anomalous Energy Transport in 1D Classical Lattices", *Phys. Rev. Letter*, Vol. 84, No. 13, pp.2857-2860, 2000.
- [3] W. A. Little, "The Transfer of Heat between Dissimilar Solids at Low Temperature", *Canadian J. of Phys.*, Vol. 37, pp.334-349, 1959.
- [4] E. T. Swartz and R. O. Pohl, "Thermal Boundary Resistance", *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 61, pp.605-668, 1989.
- [5] D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson, G. D. Mahan, A. Majundar, H. J. Maris, R. Merlin and S. R. Phillpot, "Nanoscale Heat Transfer", *J. of Appl. Phys.*, Vol. 93, No. 2, pp.793-818, 2003.

- [6] A. R. Abramson, C. L. Tien and A. Majumdar, "Interface and Strain Effects on the Thermal Conductivity of Hetrostructures: A Molecular Dynamics Study", ASME J. of Heat Transfer, pp.963-970, 2002.
- [7] G. F. C. Roggers, "Heat Transfer at the Interface of Dissimilar Metals", Int. J. of Heat & Mass Transfer, Vol. 2, pp.150-154, 1961.
- [8] R. W. Powell, R. P. Tye and B. W. Jolliffe, "Heat Transfer at the Interface of Dissimilar Materials : Evidence of Thermal-Comparator Experiments", Int. J. of Heat & Mass Transfer, Vol. 5, pp.897-902, 1961.
- [9] Yu. P. Shlykov and Ye. A. Ganin, "Thermal Resistance of Metallic Contacts", Int. J. of Heat & Mass Transfer, Vol. 7, pp.921-929, 1964.
- [10] D. V. Lewis and H. C. Perkins, "Heat Transfer at the Interface of Stainless Steel and Aluminum-The Influence of Surface Conditions on the Directional Effect", Int. J. of Heat & Mass Transfer, Vol. 11, pp.1371-1383, 1968.
- [11] M. Matumoto, H. Yakayabashi, and T. Makino, "Thermal Resistance of Crystal Interface: Molecular Dynamics Simulation", Trans. JSME (B), Vol.68, No. 671, pp.87-93, 2002.
- [12] S. H. Choi, S. Maruyama, K. K. Kim, and J. H. Lee, "Feasibility Study of a New Model for the Thermal Boundary Resistance at Thin Film Interface", J. Kor. Phys. Soc. Vol. 44, No. 2, pp.317-325, 2004.
- [13] S. H. Choi and S. Maruyama, "Thermal Boundary Resistance at an Epitaxially Perfect Interface of Thin Films", Int. J. Thermal Sciences, Vol. 44, No. 6, pp.547-558, 2005.
- [14] S. H. Choi, S. Maruyama, K. K. Kim, and J. H. Lee, "Evaluation of the Phonon Mean Free Path in Thin Films by Using Classical Molecular Dynamics", J. Kor. Phys. Soc. Vol. 43, No. 5, pp.747-753, 2003.
- [15] S. H. Choi and S. Maruyama, "Variations in the Thermal Conductivity of Insulating Thin Films with Temperature and Pressure", J. Kor. Phys. Soc. Vol. 45, No. 4, pp.897-906, 2004.
- [16] J. O. Hirschfelder, C. R. Curtiss and R. B. Bird, Molecular Theory of Gases and Liquids, Wiley, New York, 1964.
- [17] Sato Yukio, Introduction to Signal Processing, Ohmsha, Tokyo, 1999.