



## 스토캐스틱 분자동역학 시뮬레이션을 통한 직사각형 마이크로 채널 내의 입자 확산 연구

김 영 록,<sup>1</sup> 박 철 우,<sup>1</sup> 김 대 중<sup>\*2</sup>

### STOCHASTIC MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF PARTICLE DIFFUSION IN RECTANGULAR MICROCHANNELS

Yongrok Kim,<sup>1</sup> Chulwoo Park<sup>1</sup> and Daejoong Kim<sup>\*2</sup>

*Stochastic molecular dynamics simulation is a variation of standard molecular dynamics simulation that basically omits water molecules. The omission of water molecules, occupying a majority of space, enables flow simulation at microscale. This study reports our stochastic molecular dynamics simulation of particles diffusing in rectangular microchannels. We interestingly found that diffusion patterns in channels with a very small aspect ratio differ by dimensions. We will also discuss the future direction of our research toward a more realistic simulation of micromixing.*

**Key Words :** 분자동역학(MD), Stochastic MD, 브라운 운동(Brownian Motion), Random Number Generation, 페클렛수(Peclet Number), 마이크로믹서(Micromixer), 미세유체(Microfluidic)

#### 1. 서 론

분자동역학 시뮬레이션은 시스템 내의 원자간 포텐셜 또는 힘이 알려졌을 때 이를 이용해서 뉴턴의 운동방정식을 수치적으로 해석함으로써 원자들의 운동 역학을 구하고 이러한 역학적인 데이터를 통계적으로 처리하여 여러 물성치, 분자적 구조, 에너지, 전달 현상을 계산하는 방법이다[1].

스토캐스틱 분자동역학 시뮬레이션은 분자동역학의 한 변형된 형태로 물 분자에 의한 시뮬레이션 시간을 단축할 수 있게 하는 기법이다. 기존의 분자동역학에서 고려해야 했던 물과 다른 분자 간의 상호 작용을 브라운 운동과 같은 수학적 모델로 대체함으로써, 기존의 기법에서 대부분의 부피를 차지하는 물을 제외시킬 수 있게 되었다. 이러한 물 분자의 제외는 나노 스케일에서만 행하여진 분자동역학 시뮬레이션을 대신하여 마이크로 스케일에서의 유체 시뮬레이션을 가능

하게 한다.

본 연구는 직사각형 단면 마이크로 채널 내의 입자 확산에서 특이한 확산 양상을 관찰하는 것이 주된 목적이며 이에 관해 비교대상으로서 직사각형의 가로, 세로의 길이와 동일한 길이를 가지는 두 가지의 정사각단면 마이크로 채널에서 같은 시뮬레이션을 수행하였다. 같은 조건에서 직사각단면 채널과 정사각단면 채널의 확산 양상을 살펴보고 비교한다.

본 연구는 사실적인 마이크로믹서 개발을 위한 연구의 전 단계로 이루어 지는 연구이며 본 논문에서 보고하는 결과를 바탕으로 사실적인 마이크로 믹싱 연구로의 확장에 대하여 간단히 언급한다.

#### 2. 이론적 고찰 - 브라운 운동[2]

관성력이 작용하지 않는 입자가 시간  $t$ 일 때,  $x$ 의 위치에 있다고 가정하자. 단, 마찰은 속도와 비례한다. 일정한 힘  $f^s(x)$ 는 시스템에서 정의된 일정한 속도  $v^s(x) = f^s/\zeta$ 를 일으킨다. 여기서,  $\zeta$ 는 마찰계수이다. 브라운 운동의 확산계수는 스토크스-아인슈타인 방정식( $D = kT/\zeta$ ,  $k$ 는 볼츠만 상

1 서강대학교 기계공학과

2 정회원, 서강대학교 기계공학과

\* Corresponding author, E-mail: daejoong@sogang.ac.kr

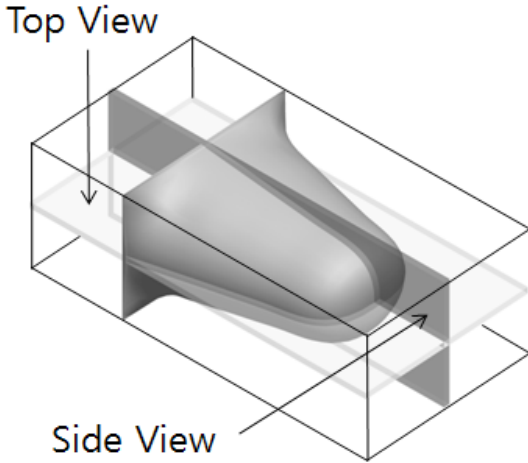


Fig. 1 Geometry of channel with diffused particles

수)에 의해 주어진다.

Brownian Walks의 컴퓨터 시뮬레이션은 다음과 같이 이루어진다.

$$x_{n+1} = x_n + v^s \delta t + A r_n$$

$\delta t$ 는 각각의 time-step,  $A r_n$ 은 시스템에서 일정하게 정의된  $v^s \delta t dp$  대한 임의의 위치를 나타낸다. 여기서  $r_n$ 은 평균이 0이며, 바로 전 time-step의 랜덤 넘버( $r_{n-1}$ )와 관계없는 랜덤 넘버이다. 덧붙여  $A$ 는 시간  $2D(t-t_0)$ 에서 선형적으로 증가하는 랜덤워크 부분  $\langle (x-x_0 - v^s(t-t_0))^2 \rangle$ 의 변화량을 나타내는 값이다. 여기서 랜덤 넘버들이 반드시 정규분포를 이룰 필요는 없다. 또한 어떤 랜덤 넘버 제너레이터는 인접한 숫자끼리 어떤 관계를 가질 필요가 없다. 일반적으로 가장 많이 사용하는 랜덤 넘버는  $[-0.5, 0.5]$ 에 고르게 분포되어 있으며,  $\langle r_n^2 \rangle = \frac{1}{12}$ 의 분산을 가진다. 따라서 임의의 변위에 대한 크기는 다음과 같이 주어진다.

$$A = (24D\delta t)^{1/2}$$

위에서의 가장 간단한 브라운 운동이 상당한 정확성을 보였지만, 고차의 브라운 운동에서는 더 높은 정확성을 기대하기 어렵다. 랜덤 넘버가 비연속적인 속도 분포를 나타내며, 속도와 그 n차 도함수가 연속이어야 하기 때문이다.

고차의 알고리즘에 대한 일반화는 간단하다.  $x_i(t)$  위치에 서 선형 마찰 텐서 계수  $\zeta_{ij}$ 에 따라 진행되는 입자에 대하여,

일정한 힘  $f_i^s$ 은 시스템에서 정의된 속도  $v_i^s = (\zeta^{-1})_{ij} f_j^s$ 를 생성한다. 이 때, 스토크스-아인슈타인 관계식에 의하여 확산성의 텐서  $D_{ij} = kT(\zeta^{-1})_{ij}$ 가 정의된다. 따라서 위의 Random Brownian Walks는 다음과 같이 표현된다.

$$x_i^{n+1} = x_i^n + v_i^s \delta t + A_{ij} r_j^n$$

여기서  $r_j^n$ 은 벡터를 이루는 각 원소의 평균 0, 분산  $\frac{1}{12}$ 의 값을 가지며 각 구성 원소 간에 어떠한 관계도 없고  $r_j^{n-1}$ ,  $r_j^{n+1}$ 와도 아무런 연관이 없는 랜덤 벡터이다.  $A_{ij}$ 의 텐서 성분은 반드시 다음의 식을 만족시킨다.

$$A_{ik} A_{jk} = 24D_{ij} \delta t$$

여기서  $A$ 는  $D$ 의 제곱근으로 표현된다. 아이젠벨류가 양수이고 대칭인 텐서  $D_{ij}$ 에서, 위의 제곱근은 콜레스키 분해법으로부터 반드시 구해지나, 경우에 따라 바로 전 time-step으로 반복적으로 구해내는 것이 더 빠를 수 있다.

### 3. 시뮬레이션 조건

#### 3.1 시뮬레이션의 조건 및 방법

시뮬레이션은 마이크로 채널에서 이루어지며, 전체 시뮬레이션에서 통일된 조건은 다음과 같다. Reynolds' Number는 0.034이다. 용매를 상온(20°C)에서의 물이라 가정하고 밀도를  $998 \text{ kg/m}^3$ , 점도를  $1.00 \times 10^{-2} \text{ cp (g/cm-sec)}$ 로 주었다.

단면이 직사각형인 채널에서의 확산 양상의 특성을 살펴보기 위하여 단면이 직사각형, 정사각형인 경우로 나누어서 시뮬레이션을 수행하였다. 이때 정사각형의 경우는 직사각형의 짧은 선분의 길이에 맞추는 좁은 채널과 긴 선분의 길이에 맞추는 넓은 채널의 두 경우로 나누어 수행하였다. 입자는 일정 부피를 가진 핵의 형태로 주어지며 그 내부에서 입자의 배치는 Random Number Generation에 의해 무작위로 배치된다. 입자의 개수는 부피와 Molality에 의해 결정된다. 시뮬레이션의 결과는 채널의 Binning을 통해 입자의 분포 농도를 확인한다.

#### 3.2 직사각단면 채널 (너비 $30 \mu\text{m}$ x 높이 $2 \mu\text{m}$ )

직사각단면 채널 실험에서 통일된 조건은 다음과 같다. 입구와 출구의 압력 차이는  $0.5 \text{ atm}$ 로 주어지며 채널의 길이는  $200 \mu\text{m}$ 이다. 두 조건을 Darcy Law에 대입해 유속을 계산한다. Molality는  $1 \times 10^{-4} \text{ mM} \times 1050 = 105 \mu\text{M}$ 이다. 채널의 너

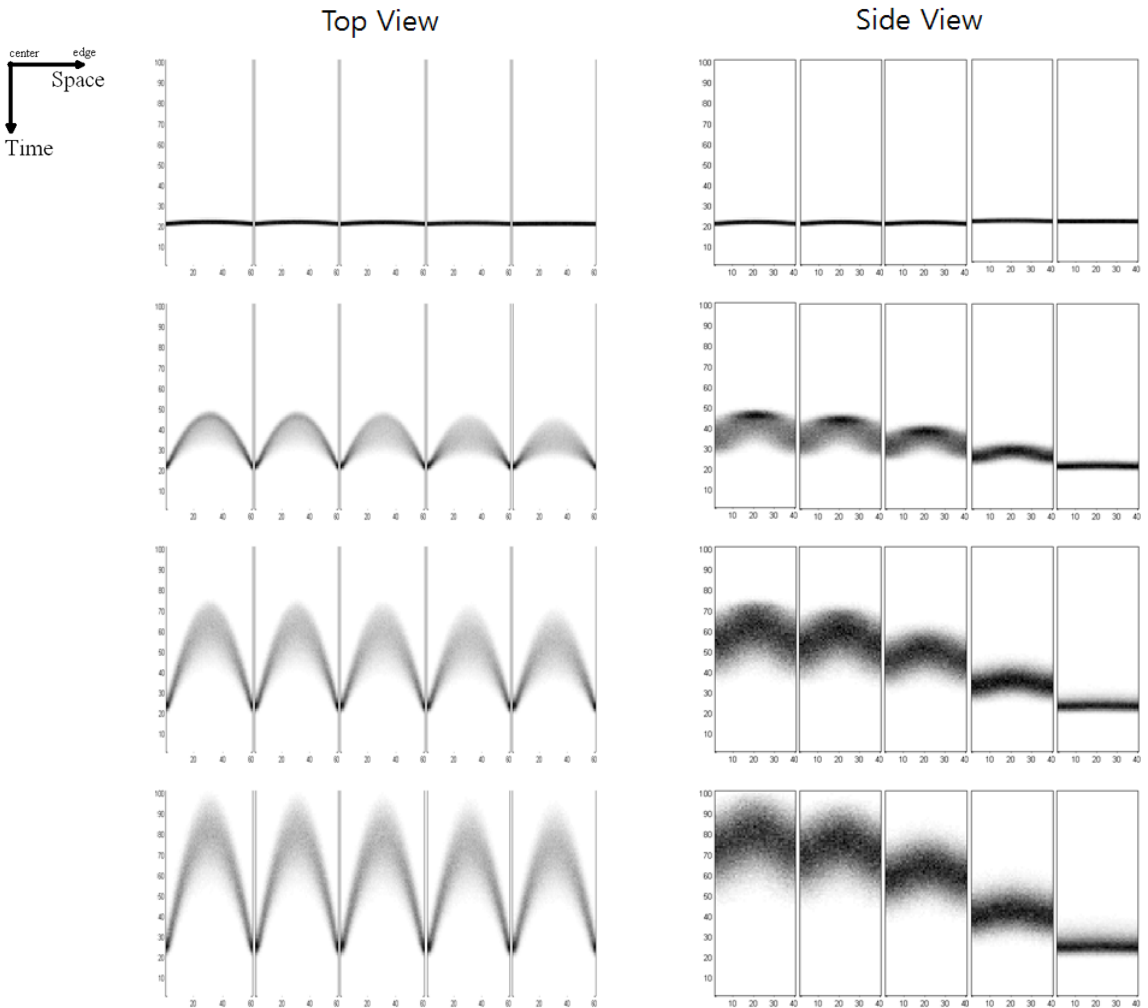


Fig. 2 Particle concentrations from the top and side views

비는 30  $\mu\text{m}$ , 높이는 2  $\mu\text{m}$ 이며 초기의 입자를 포함한 plug의 두께는 2  $\mu\text{m}$ 이다. 너비 방향 Binning size는 너비 0.5  $\mu\text{m}$ , 높이 0.05  $\mu\text{m}$ , 길이 1  $\mu\text{m}$ 이다.

직사각단면 채널에서는 Table 1과 같이 Peclet Number에 따라 6가지의 시뮬레이션을 행하였다.

### 3.3 정사각단면 채널 (2 $\mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ , 30 $\mu\text{m} \times 30 \mu\text{m}$ )

직사각단면 채널의 시뮬레이션 결과와 비교하고 직사각단면 채널의 확산양상에 대한 기준으로 잡기 위해 정사각단면 채널의 시뮬레이션을 같이 수행하였다. 시뮬레이션을 수행한 채널의 크기는 각각 2  $\mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ 와 30  $\mu\text{m} \times 30 \mu\text{m}$ 이다. 정사각단면 채널의 시뮬레이션은 두 가지 크기의 채널에 대해 Table 1의 case 1, case 2, case 4을 수행하였다. 시뮬레이션을

수행하면서, 채널의 단면 넓이가 변화해도 Reynolds' Number와 입자의 개수를 case마다 일치시키기 위하여 Molality, 입구와 출구의 압력차, plug의 두께, Molality, Bin 크기를 변화시켰다.

Table 1 Conditions of Rectangular Channel Simulation

	Diffusion Coefficient	Peclet Number
case 0 : Pure Diffusion	$2.35 \times 10^{-7}$	0
case 1	$2.35 \times 10^{-7}$	0.221
case 2	$1.69 \times 10^{-8}$	3.07
case 3	$2.31 \times 10^{-9}$	22.5
case 4	$3.46 \times 10^{-10}$	150
case 5	$7.41 \times 10^{-11}$	701



## 4. 시뮬레이션 결과

### 3.1 직사각단면 채널 (너비 30 $\mu\text{m}$ x 높이 2 $\mu\text{m}$ )

순수확산을 포함한 6번의 시뮬레이션을 수행하면서 다음과 같은 결과를 도출하였다.

공간적으로 중앙에서 가장자리에 가까워지고 진행방향에 대하여 앞으로 이동되는 양상이 약한 경우 윗면에서 보면 입자 분포가 포물선 형태를 띄게 된다. 또한 이러한 경우, 옆면에서의 분포가 포물선 형태와 같지 않기 때문에 윗면에서 볼 때 공간적으로 중앙에서 가장자리로 이동하여도 전혀 차이가 없다.

Case 3(Peclet Number = 22.477)의 윗면에서 관찰할 때와 Case 4(Peclet Number = 150.06)의 옆면에서 관찰했을 때, 중앙과 가장자리에 입자의 분포가 집중되어 있는 현상을 발견하였다.

전반적으로 Peclet Number가 커질수록 윗면, 옆면 모두 포물선 형태가 두드러지게 나타나나, 특정 수준을 지나면 확산 현상에 의하여 포물선 형태가 잘 관찰되지 않는 경향성을 발견하였다.

### 3.2 정사각단면 채널 (2 $\mu\text{m}$ x 2 $\mu\text{m}$ , 30 $\mu\text{m}$ x 30 $\mu\text{m}$ )

채널의 가장자리에서 관찰하는 경우 직사각단면 채널의 넓은 윗면에서 볼 수 있었던, 가장자리로 이동하면서 생기는 입자가 집중된 곳이 분포도의 앞에서 뒤로 이동하는 것을 관찰하였다. 더불어, 양쪽이 같은 모양이기 때문에 직사각단면 채널의 옆면에서 나타났던 가장자리에서 입자의 극단적인 최소 변화가 나타나지 않았다.

시뮬레이션 초반 중앙에 집중되어있던 입자의 분포가 시간이 지나면서 골고루 흩어지는 것을 관찰할 수 있었다. 따라서 직사각단면 채널에서 관찰되었던 중앙의 입자 집중현상은 Peclet Number나 채널의 크기 외에도 충분한 확산이 이루어질 시간의 부족도 한 요인이라는 것을 확인하게 한다.

## 5. 요약 및 향후 연구과제

직사각단면 채널에서의 확산 양상의 다음의 몇 가지 부분에서 정사각단면 채널에서의 그 것과 차이를 보인다. 같은 Peclet Number를 가진다면, 직사각단면 채널에서는 정사각단면 채널에서보다 포물선 형상이 더욱 잘 발달한다. 공간적으로 중앙에서 가장자리에 가까워지고 앞으로 이동되는 양상이 약한 경우 윗면에서 보면 포물선 분포를 띄게 되며 옆면 분포가 포물선 형태를 띄지 않기 때문에 공간적으로 중앙과 가장자리의 차이가 없다.

채널의 가장자리에서 관찰하는 경우, 입자가 집중되는 지역이 정사각단면 채널보다 직사각단면 채널에서 더 앞쪽에 생성된다. 추가적으로, 채널 모서리의 길이가 다르기 때문에 정사각단면 채널에서는 볼 수 없는 옆면 가장자리에서의 입자의 극단적인 최소변화를 관찰할 수 있었다.

다양한 분야에서 사용하는 대부분의 미세유동 시스템에서 물질을 혼합시키는 마이크로 믹서는 분자의 확산으로 인해 혼합류를 발생, 물질을 혼합시키는 장치이다. 일반적으로 마이크로 믹서의 스케일이 작아지고 압력 섭동이 심해지면 일반적으로 수치해석이 힘들다. 그러나 본 연구에서 다룬, 확산이 지배하는 영역에서의 해석이 가능한 스토캐스틱 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 특성 해석이 가능하다[3].

## 참고문헌

- [1] 2002, Frenkel, D. and Smit, B., *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, pp.7-108.
- [2] 1995, Grassia, P.S., Hinch, E.J. and Nitsche, L.C., "Computer simulations of Brownian motion of complex systems," *J. Fluid Mech.*, Vol.282, pp.374-377.
- [3] 2005, Nguyen, N.-T. and Wu, Z., "Micromixers-a review," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, pp.R1-R6.