

미세 유로에서 혼합에 대한 수치 모사

김민찬, 이동원*, 박준식**, 박호덕**
 제주대학교 화학공학과, *제주대학교 기계공학과, **전자부품연구원
 mckim@cheju.ac.kr

1. 서론

최근 미세가공 기술의 발달로 미세계에서의 전달현상에 대한 관심이 증대되고 있다. 미세계에서는 몇 가지 물리적 효과들이 중요하게 된다. 미세 흐름에서는 관성력과 점성력의 비인 Reynolds 수가 아주 작게 되고 계의 길이 차원이 작아짐에 따라 표면력(surface force)의 효과가 중요하게 되면서 보통은 무시되었던 몇몇 효과들이 중요하게 된다. 그 중의 하나가 혼합이다.

미세 스케일에서의 액체의 혼합은 micro total analysis system(μ TAS)와 항원-항체 결합과 DNA hybridization과 같은 많은 생물학적 공정들에서 중요하다. 혼합을 증대 시키는 가장 흔한 방법은 효율적인 혼합 메커니즘은 난류(turbulence)를 발생시키는 것이다. 하지만 미세 유로에서의 흐름과 같이 계의 길이 차원이 작고, 액체의 속도가 작은 Reynolds 수가 작은 영역의 흐름에서는 난류를 유발하는 것은 불가능하다 (Reynolds 수, $Re = \rho v d / \mu$ 여기서 ρ = 유체의 밀도, v = 유체의 속도, d = 계의 길이 차원, μ = 유체의 점도). 이와 같은 영역에서 확산(diffusion)에 근거한 혼합은 시간이 오래 걸리고 아주 비효율적이다. 따라서 미세계에서는 층류(laminar)에서 혼합을 증대 시키는 것이 중요하다. 이러한 영역에서 혼합을 증대시키기 위한 혼합기는 계의 일부의 움직임 또는 압력 구배의 변화를 주어 흐름을 능동적으로 제어하는 능동 혼합기(active mixer)와 일정한 유속의 흐름을 일으키는 압력 구배 이외에는 다른 메커니즘을 사용하지 않는 수동 혼합기(passive mixer)가 있다. 이러한 혼합기들은 Tay의 책에¹⁾ 잘 소개되어 있다.

능동 혼합기는 효율을 높일 수 있지만 유체의 흐름을 일으키는 것 이외의 부가적인 에너지를 다른 메커니즘

을 통하여 흐름에 주입하여야 하기 때문에 유동계를 설계, 가공하기 어렵고 또 실제 조업에 이용하기 어렵기 때문에 보통 수동 혼합기를 많이 사용한다. 수동 혼합기에서 혼합 효율을 높이기 위해 많이 사용하는 방법은 복잡한 유로에서의 흐름을 통한 "chaotic advection"을 이용하는 것이다. 본 연구에서는 복잡한 미세 유로에서의 혼합 효과를 전산 유체 역학(Computational Fluid Dynamic) 모사를 통하여 해석하고자 한다.

2. 이론적 해석

2.1. 혼합 메커니즘

미세 스케일 액체 혼합 공정에서는 분자 확산이 중요한 인자이고, 분자 확산은 다음과 같은 잘 알려진 Fick의 법칙에 의하여 기술된다.

$$j = -D \nabla C \quad (1)$$

여기서 j 는 물질 플럭스, D 는 확산 계수, C 는 농도이다. 확산이 지배하는 계에서 얼마나 오래 또는 얼마나 길어야 물질전달이 일어나는지를 추산하기 위해서는 다음과 같은 간단한 상관관계가 사용된다.²⁾

$$\frac{\lambda^2}{Dt} = \frac{\lambda^2 V}{DL} \sim 1 \quad (2)$$

여기서 λ 은 확산 거리, t 는 시간, V 는 흐름 속도, L 은 이동해야 되는 거리이다. 이 판단기준으로부터 미세 유로의 폭, 흐름의 속도가 주어진 경우에, 충분한 혼합 효과를 얻기 위한 미세 유로의 길이를 예측할 수 있다. $D = 5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$, $\lambda = 200 \mu\text{m}$, $V = 3 \text{ mm/s}$ 인 경우에는 요구되는 이동거리와 경과 시간은 각각 24cm와 80초 이

다. 즉 확산만이 존재하는 경우에는 충분한 혼합 효과를 얻기 위해서는 유로의 길이가 24cm 또는 접촉 시간이 80초 정도는 되어야 한다. 이 값들은 미세 분석계에서는 상당히 큰 값이므로 효율적인 혼합기가 요구된다.

2.2. 지배 방정식

정상상태 층류 영역에서의 혼합은 다음과 같은 물질 보존에 대한 연속 방정식, 유체 흐름에 대한 Navier-Stokes 식, 물질전달에 대한 대류 확산 방정식으로 기술된다.

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3)$$

$$\mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{V} \quad (4)$$

$$\mathbf{V} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (5)$$

여기서 \mathbf{V} , P , C , ρ , ν 와 D 는 각각 속도 벡터, 압력, 농도, 유체의 밀도, 동점도와 확산계수이다. 본 연구에서 해석할 미세 유로의 구조는 Fig. 1에 나타나 있다. 그림에서 보듯이 서로 섞여야 할 유체 물과 유체 A가 서로 다른 도입부를 통하여 미세 유로로 들어오고, 미세 유로를 통하여 흘러가면서 서로 섞이게 된다. 확산 계수를 제외한 유체 A의 물성들은 물과 같고 확산 계수는 $D = 5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ 로 가정하였다. 이 유체 A의 농도가 혼합의 정도를 나타내게 된다. 속도장과 농도장은 상용 CFD 코드인 CFD-ACE³를 사용하였다. 속도장 및 유동장 해석에는 상류도식(upwind scheme)을 적용하였고 반복법으로는 Gauss-Swidel 반복법을 사용하였다. 또한 안정된 수렴을 위해 하향이완계수(underrelaxation factor)를 속도장에서는 0.1-

0.5, 농도장에서는 0.01-0.07를 사용하여 해석하였다.

3. 결과 및 검토

두 흐름이 일정한 속도로 직관 형태의 미세 유로로 도입되고 혼합은 확산에 의해서만 진행되는 경우에 대한 mesh 구조는 Fig. 1에 주어지고 계산 결과는 Fig. 2에 주어져 있다. 그림에서 보듯이 직관에서의 흐름은 잘 알려진 포물선형 분포를 보이고 있고 혼합의 정도는 속도가 증가함에 따라 감소하고 있다. 이는 직관에서는 확산에 의해서만 혼합이 진행되고 있음을 나타낸다. 체류시간(또는 접촉시간)이 증가할수록(즉 속도가 감소할수록) 확산에 의한 혼합 효과는 증대되고 있음을 알 수 있다. 또 미세 유로 내를 흐르면서 확산만이 일어나는 경우에 효과적인 혼합을 유지하기 위해서는 유속을 아주 작게 유지해야 됨을 알 수 있다. 이는 분석계의 분석 시간이 오래 걸린다는 것을 의미한다. 따라서 분석 시간을 줄이기 위해서는 혼합 효과를 개선하기 위한 방안이 요구된다.

가장 쉽게 생각할 수 있는 방안은 유로를 복잡하게 설계하는 것이다. 비교적 쉽게 가공할 수 있는 2차원 구조의 여러 형태의 유로중에서 혼합 효과 면에서 효율적인 구조가 Fig. 3에 주어져 있다. 이와 같은 유로로 도입되는 두 흐름의 속도(Reynolds 수)에 따른 속도 분포, 혼합 효과(농도 분포)는 Fig. 4에 주어져 있다. 그림에서 보듯이 Fig. 2의 직관에서의 혼합 보다 훨씬 더 효율적임을 알

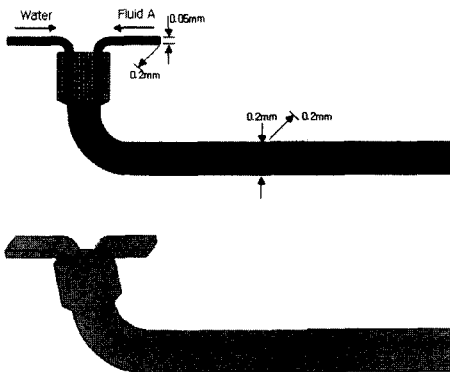


Fig. 1. Schematic diagram and mesh structure for the straight channel.

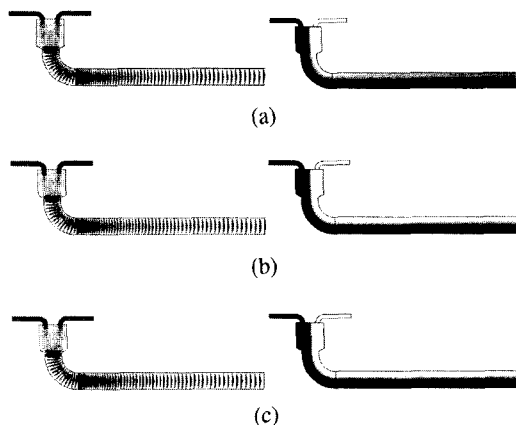


Fig. 2. Calculation results for the straight channel. Inlet velocities of both fluids are (a) $v=1\text{mm/s}$, (b) $v=5\text{mm/s}$ and (c) $v=10\text{mm/s}$, respectively.

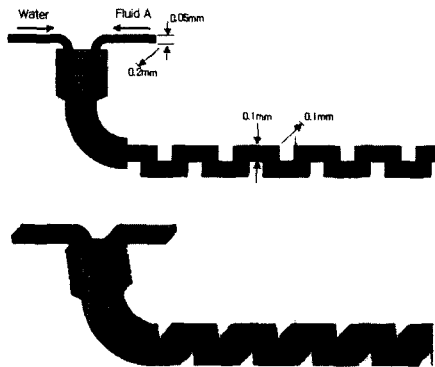
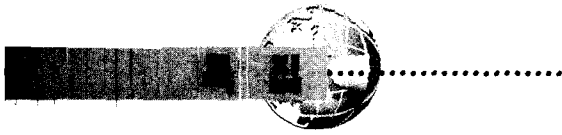


Fig. 3. Schematic diagram and mesh structure for the 2-dimensional curved channel.

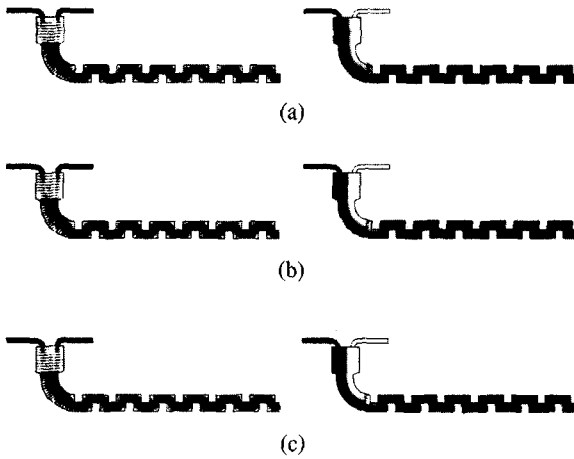


Fig. 4. Calculation results for the 2-dimensional curved channel. Inlet velocities of both fluids are (a) $v = 1\text{mm/s}$, (b) $v = 5\text{mm/s}$ and (c) $v = 10\text{mm/s}$, respectively.

수 있다. 이는 혼합이 진행되어야 할 방향으로의 흐름이 존재가 혼합에 상당한 영향을 미친다는 것을 보여준다. 또 이러한 구조에서는 혼합이 유속과 거의 무관하게 진행되고 있음을 알 수 있다. 이는 확산에 의하여 혼합이 진행되었던 앞의 직관에서와는 달리 혼합이 확산에 무관하게 이루어지고 있음을 보여준다. 따라서 이러한 구조의 유로를 사용하여 유체를 흘려보내는 경우의 장점은 혼합 효과를 증대시킬 수 있을 뿐만 아니라 유속을 증대시킬 수 있기 때문에 전체 계의 분석 시간을 단축시킬 수 있다.

Liu 등은⁴⁾ 복잡한 기하학적 형태의 유로에서 이차 흐름(secondary flow)에 의한 복잡한 유동에 의한 혼합인 chaotic advection을 이용하는 3차원 serpentine 미세 유로에서의 혼합을 실험적으로 고찰하였다. 본 연구에서는 Fig.

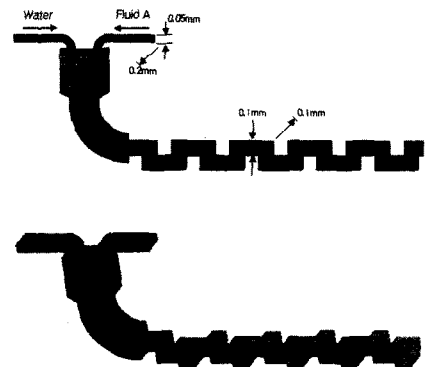


Fig. 5. Schematic diagram and mesh structure for the 3-dimensional serpentine channel.

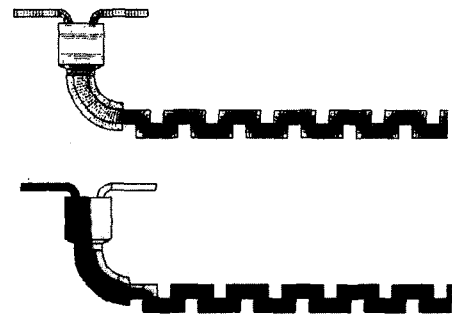


Fig. 6. Calculation results for the 3-dimensional serpentine channel. Inlet velocities for both fluids are 5mm/s .

5에 보이는 3차원 serpentine 미세 유로에서의 혼합을 위의 2차원 유로에서와 비슷하게 해석하였다. 해석 결과는 Fig. 6에 나타내었다. Reynolds 수가 같은 경우의 2차원 유로의 경우와 비교한 것이 Fig. 7에 나타내었다. 이 그림에서 보듯이 3차원 serpentine 유로의 결과와 2차원 유로의 결과 사이에는 큰 차이가 없다. 즉 여기에서 다루고 있는 경우에서와 같이 두 유체가 연속적으로 계에 분석계에 주입되고 있는 경우에는 소위 "racetrack effect"가⁵⁾ 큰 효과가 없다는 것을 의미하며, 따라서 가공하기 어려운 3차원 serpentine 유로를 사용할 의미가 없다는 것을 의미한다.

4. 결 론

본 연구에서는 복잡한 미세 유로에서의 혼합 효과를 전산 유체 역학 모사를 통하여 해석하였다. 확산이 중요한 혼합 메커니즘인 직관에서는 충분한 혼합 효과를 얻기 위해서 긴 체류시간이 필요하였다. 이를 개선하기 위하여

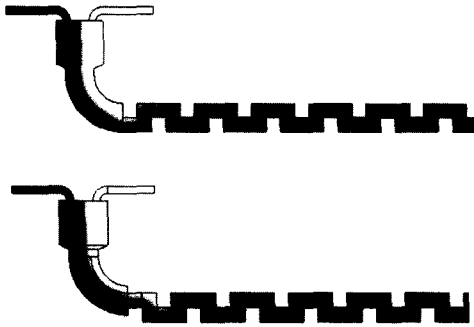
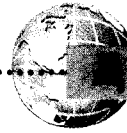


Fig. 7. Comparison of mixing effect in 2-dimensional and 3-dimensional channel. The Reynolds numbers for both cases are about 10.

제안된 2차원적인 기하학적 형태를 갖는 유로에 대한 혼합 효과를 해석하였다. 해석결과 혼합이 진행되어야 할 방향으로의 흐름이 존재하는 경우는 확산 보다는 대류에 의한 혼합이 중요하게 되고 체류시간과 혼합 효과와는 큰 상관성이 없는 것으로 밝혀졌다. 기존에 제안된 3차원 serpentine 유로에서의 혼합 효과도 해석하였다. 본 연구에서 고려되는 경우와 같은 경우에는 3차원 유로와 2차원 유로 사이에서의 혼합 효과는 별 차이가 없는 것으로 나타났다.

감사의 글

본 연구는 산업자원부 및 정보통신부의 유망전자부품 기술 개발사업 (ELECTRO 0580사업)의 일환으로 이루어졌으며, 이에 감사 드립니다.

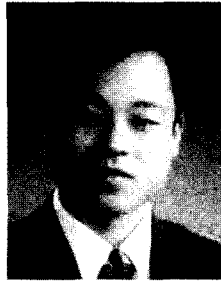
참고문헌

1. Tay, F.E.H., Microfluidics and BioMEMS Application, Kluwer Academic Pub., Boston, MA (2002).
2. Cussler, E.L., Diffusion, Cambridge University Press, NY (1984).
3. <http://www.cfdrc.com>
4. Liu, R.H., Stremmer, M.A., Sharp, K.A., Olsen, M.G., Santiago, J.G., Adrian, R.J., Aref, H. and Beebe, D.J., Passive Mixing in a Three-Dimensional Serpentine Microchannel, J. Microelectromechanical Systems, 9, 190 (2000).
5. Molho, J.I., Herr, A.E., Mosier, B.P., Santiago, J.G., Kenny, T.W., Brennel, R.A., Gorden, G.B. and Mohammadi, B., Optimization of Turn Geometries for Microchip electrophoresis, Anal. Chem., 73, 1350 (2001).



김민찬

- 1992년 서울대 화학공학과 (박사)
- 1990년 서울대 화학공학과 (석사)
- 1988년 서울대 화학공학과 (학사)
- 1993년 제주대학교 화학공학과 교수 ~ 현재



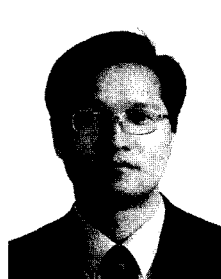
이동원

- 1997년 제주대 기계공학과 (석사)
- 1995년 제주대 기계공학과 (학사)
- 1998년 제주대 기계공학과 박사과정 ~ 현재



박준식

- 2004년 한양대 재료공학과 (박사)
- 1994년 한양대 재료공학과 (석사)
- 1992년 한양대 재료공학과 (학사)
- 1994년 전자부품연구원 나노 메카트로닉스 연구센터 책임연구원 ~ 현재



박효덕

- 1993년 경북대 전자공학과 (박사)
- 1986년 경북대 전자공학과 (석사)
- 1984년 경북대 전자공학과 (학사)
- 1993년 전자부품연구원 나노·융합 연구본부 본부장 ~ 현재