

## 고출력 레이저에 의한 가열과 폭약의 점화 모델링

이경철\* · 김기홍\* · 여재익\*\*

### Modeling of high energy laser heating and ignition of high explosives

Kyung-Cheol Lee\* · Ki-Hong Kim\* · Jai-ick Yoh\*\*

#### ABSTRACT

We present a model for simulating high energy laser heating of metal for ignition of energetic materials. The model considers effect of ablation of steel plate with long laser pulses and continuous lasers of several kilowatts and the thermal response of well-characterized high explosives for ignition. Since there is enough time for the thermal wave to propagate into the target and to create a region of hot spot in the high explosives, electron thermal diffusion of ultra-short (femto- and pico-second) lasing is ignored; instead, heat diffusion of absorbed laser energy in the solid target is modeled with thermal decomposition kinetic models of high explosives. Numerically simulated pulsed-laser heating of solid target and thermal explosion of RDX, TATB, and HMX are compared to experimental results. The experimental and numerical results are in good agreement.

#### 초 록

본 연구에서는 고출력 레이저에 의한 고에너지 물질의 점화 현상 모델을 제시하였다. 본 모델에서는 강판에 긴 조사 시간을 가진 펄스 레이저를 조사하여 발생한 어블레이션에 의한 열 확산을 고려하였고, 수 kW의 continuous 레이저를 폭약에 조사하여 폭약이 열에 의하여 점화하는 현상을 실험 결과와 비교를 통해 검증하였다. 여기서는 매우 짧은 조사 시간(femto- 혹은 pico-second)을 가진 펄스 레이저에서 나타나는 전자에 의한 효과는 무시 되었다. 본 연구에 사용된 폭약은 RDX, TATB 그리고 HMX 이며, 제시한 모델은 실험 결과와 흡사한 결과를 도출하였다.

Key Words: Laser heating(레이저 가열), Ignition(점화), Explosion(폭발), Energetic materials(고에너지 물질).

† 2008년 1월 3일 접수 ~ 2008년 5월 26일 심사완료

\* 학생회원, 서울대학교 기계항공공학부

\*\* 종신회원, 서울대학교 기계항공공학부

연락처, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

#### 1. 서 론

펄스당 긴 조사 시간(>nano second)을 가진

레이저를 어떠한 고체 표면에 조사하면, 표면에서 온도는 급격히 기화 온도에 도달하게 되고 상변화가 일어난다. 그리고 고체의 물질이 기화되고 표면에서는 빈공간이 생성된다. 기화된 기체는 빠른 속도로 팽창하고, 높은 압력을 형성하며, 충격파를 발생시킨다. 이러한 레이저에 의한 삭마 현상과 열적인 효과는 참고문헌 1부터 3에서와 같이 연구되어왔다.

레이저가 조사된 고체 표면에서 증가한 열은 후면으로 전도되어 후면에 인접한 고에너지 물질에까지 그 열이 전달되어 점화가 이루어진다. 실제로 레이저 물질 조사에 의한 고에너지 물질 점화에는 점화가 이루어지는 몇 가지 경우가 존재한다. 그 중 하나는 앞서 언급한 열전도에 의한 점화를 들 수 있고, 둘째는 레이저에 의하여 구멍이 생기고 레이저가 직접 폭약과 접촉하여 점화가 이루어지거나, 혹은 구멍이 생성되는 과정에서 발생하는 충격파가 전달되어 폭발이 발생할 수 있다. 또한, 구멍이 막 뚫리면서 방출된 입자에 의하여 폭발이 이루어 질 수 있다.

이중 본 연구에서는 열전도에 의한 점화 현상에 초점을 맞추어 진행하였으며, 검증을 위하여 실험 결과[5-7]와의 비교를 수행하였다. 본 연구에서는 레이저에 의한 물질가열 모델을 제시하고, 폭약의 점화 현상 모델을 위해 3 step 과 4 step deflagration reaction 모델이 사용되었다.

본 연구에 사용된 레이저는 10 kW flashlamp-pumped solid state heat capacity laser (SSHCL), milli-second 급의 펄스 레이저[7]와 2대의 CO<sub>2</sub> continuous 레이저[5]로서 매우 긴 조사 시간을 가지고 있기 때문에 femto-nano-pico-second급 레이저에서 나타나는 전자의 효과는 고려하지 않는 one temperature 모델이 사용된다[4].

## 2. Problem description

본 문제에서는 milli-second 고에너지 펄스 레이저(HEL)를 가로 50.8 mm, 세로 127 mm, 두

께가 1.5 mm 인 steel 4340 시편에 조사한다. Figure 1은 모델링에 사용된 문제의 계략도 이다.

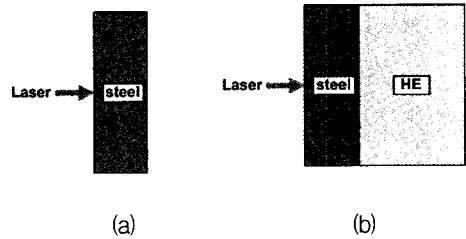


Fig. 1 Problem set-up for 2-cases: (a) Steel only, (b) Steel with RDX in contact.

사용된 펄스 레이저의 출력 에너지는 500 J/pulse이고, pulse duration은 0.5 ms 이다. 주사된 부위의 spot size는 5 cm<sup>2</sup>이므로 laser fluence는 100 J/cm<sup>2</sup>이다[7]. 레이저의 frequency는 20 Hz이다. 또한, 열전달에 의한 점화현상을 보기 위해 RDX라는 폭약을 사용하였다.

또한 본 연구에서는 폭약의 점화 현상 모델에 사용된 3 step 과 4 step deflagration reaction 모델 검증을 위해서 Fig. 2에서 보는 것과 같이 One-dimension Time to eXplosion(ODTX) 실험 [5] 데이터와의 비교를 수행하였다.

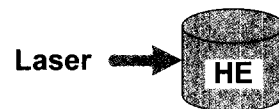


Fig. 2 Schematic of ODTX experiment using laser.

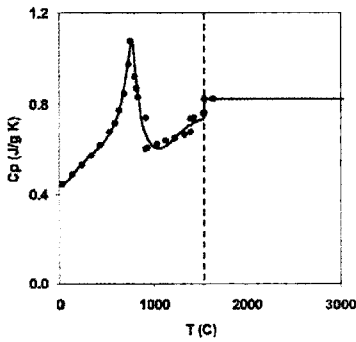
Figure 2는 지름이 1 cm 이고 높이가 6.4 mm 인 원통형 폭약에 10 W/cm<sup>2</sup> ~ 1000 W/cm<sup>2</sup> 인 연속적인 CO<sub>2</sub> 레이저 출력 범위에서 출력치를 바꿔가며 조사하였을 때 폭발이 일어나는 시간을 측정한 실험이다[5].

## 3. Mathematical formulations

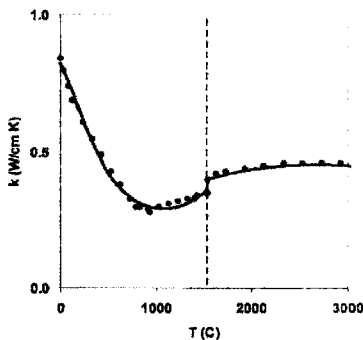
Steel 4340(이하 steel로 표기)의 열전달을 해석하고자 본 연구에서는 다음과 같은 heat diffusion 지배 방정식을 따른다.

$$\rho_s C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

여기서  $\rho_s$ 는 steel의 밀도  $7850 \text{ kg/m}^3$ 이고,  $C_p$ 는 specific heat이다.  $k_s$ 는 thermal conductivity이고,  $T$ 는 steel과 폭약에서의 온도를 나타낸다. Figure 3는 여기서 사용된 steel의 specific heat과 thermal conductivity 이다.



(a)



(b)

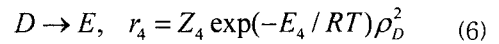
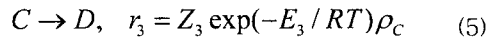
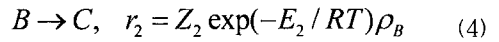
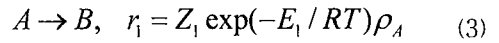
Fig. 3 Thermal dependence of coefficients of steel: (a) Specific heat [9], (b) Thermal conductivity [10].

폭약의 점화 해석을 위해 1-dimension heat diffusion 식에 chemical heat release term이 다음과 같이 추가되었다.

$$\rho_e C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k_e \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \sum_{i=1}^N r_i q_i \quad (2)$$

여기서  $\rho_e$ 는 폭약의 밀도이고, 폭약의  $C_p$ 와  $k_e$ 는 specific heat과 thermal conductivity 이다.  $r_i$ 는 reaction rate이고  $q_i$ 는 heat of reaction이며,  $N$ 은 총 반응 steps이다.

본 연구에서 RDX[13, 15]와 TATB[6, 8]를 위해 3-step chemical decomposition mechanism이 사용되었고, HMX[6, 8]를 위해 4-step chemical decomposition mechanism이 사용되었다. 가령 4-step chemical decomposition mechanism을 예로 들면, 이는 다음과 같이 구성되어 있다.



여기서 A와 B는 solid, C는 solid intermediate, D는 gas intermediate, E는 final product gas를 나타낸다. 또한 species equations를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\rho_e \frac{\partial Y_A}{\partial t} = -r_1 \quad (7)$$

$$\rho_e \frac{\partial Y_B}{\partial t} = r_1 - r_2 \quad (8)$$

$$\rho_e \frac{\partial Y_C}{\partial t} = r_2 - r_3 \quad (9)$$

$$\rho_e \frac{\partial Y_D}{\partial t} = r_3 - r_4 \quad (10)$$

$$\rho_e \frac{\partial Y_E}{\partial t} = r_4 \quad (11)$$

$$Y_A + Y_B + Y_C + Y_D + Y_E = 1 \quad (12)$$

여기서  $Y_i = \rho_i / \rho_e$ 로서 고에너지 물질의 각각 구성분의 질량분율이다.

#### 4. Laser thermal boundary condition

본 연구에서는 Patankar[12]가 제시한 thermal boundary condition을 바탕으로 laser thermal boundary condition을 제시하였다. Figure 4는 steel의 전면부에서 사용된 thermal boundary condition을 보여주고 있다.

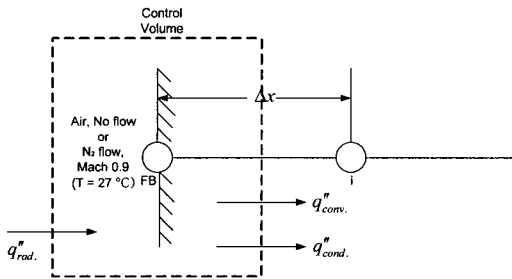


Fig. 4 The thermal boundary condition of front face of a steel coupon.

Steel의 전면부에서 steel을 기준으로 half control volume을 지정한다. Steel은 레이저의 복사 에너지를 흡수하여 가열되기 시작하고, 그 heat은 steel 내부를 따라 전달되어 steel 후면에 도달하게 된다. Steel 표면에는 공기 혹은 Mach 0.9의 N<sub>2</sub>유동이 존재하여 대류 한다. 이러한 조건으로부터 control volume에서의 복사, 전도, 대류의 heat flux 평형 식을 얻을 수 있다.

$$q''_{rad.} - q''_{conv.} - q''_{cond.} = 0 \quad (13)$$

혹은

$$\alpha G_{laser} - h(T_{FB} - T_{air}) - k \frac{(T_{FB} - T_i)}{\Delta x} = 0 \quad (14)$$

$\alpha$ 는 steel의 복사 에너지 absorptivity이고,  $G_{laser}$ 는 레이저의 1 펄스당 조사되는 에너지이다.  $h$ 는 convection coefficient이며,  $k_s$ 는 steel의 thermal conductivity이다.  $\Delta x$ 는 mesh size이고,  $T_{FB}$ ,  $T_{air}$ ,  $T_i$ 는 Fig. 4에서 steel의 FB점과 공기 그리고 steel의 i점에서의 온도이다.

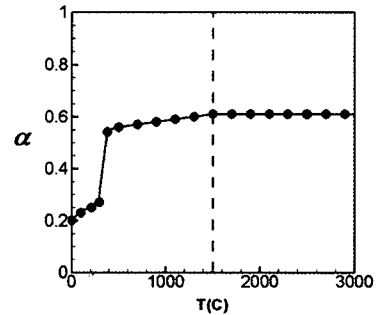


Fig. 5 The absorptivity of steel (modeled).

Equation (14)에 사용된 absorptivity는 Fig. 5에서와 같이 모델 되었다.

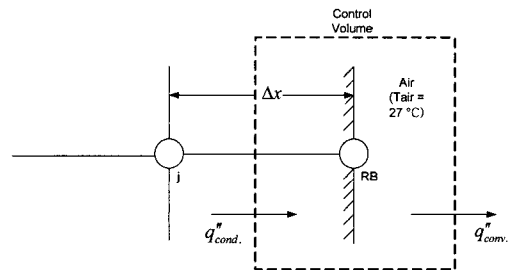


Fig. 6 The thermal boundary condition of back face of a steel coupon.

Figure 6은 steel의 후면부에서의 경계조건을 나타내고 있다. Figure 1에서 (a)의 경우는 Fig. 6과 같이 후면에 유동이 없는 공기가 존재하여 steel의 전도와 대류 현상만을 고려하게 된다. 이 전도, 대류의 heat flux 평형식은 다음과 같다.

$$q''_{cond.} - q''_{conv.} = 0 \quad (15)$$

혹은

$$k \frac{(T_j - T_{RB})}{\Delta x} - h(T_{RB} - T_{air}) = 0 \quad (16)$$

그러나, Fig. 1에서 (b)의 경우에는 공기대신 RDX 폭약이 steel의 후면과 접촉해 있다. 이때의 폭약 접촉면의 경계조건은 steel 후면에서 산출된 온도이다.

본 연구에서 no flow, air condition의 경우  $h=500 \text{ W/m}^2$ ,  $\text{N}_2$  flow, Mach 0.9인 경우  $h=2600 \text{ W/m}^2$ 로 모델되었다. 이는 실제 현상에서 steel 내부에서 3차원으로 열이 전달되어 확산되어 냉각이 일어나는 현상을 감안한 모델치이다.

Figure 2의 ODTX 점화 모델에서 사용된 경계 조건은 perfect absorption과 오직 전도 현상만이 존재한다고 가정하였을 때 다음과 같은 heat flux 평형식을 사용하였다.

$$q''_{rad.} - q''_{cond.} = 0 \quad (17)$$

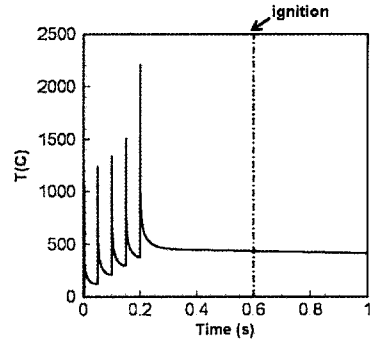
혹은

$$\alpha G_{laser} - k \frac{(T_{FB} - T_i)}{\Delta x} = 0 \quad (18)$$

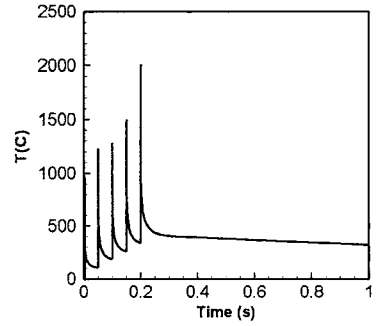
Perfect absorption 가정하였으므로 사용된  $\alpha$ 는 1이다.

## 5. Result

레이저 물질 가열 실험[7]에서는, 두께가 1.5 mm인 steel 시편에 펄스당  $100 \text{ J/cm}^2$  에너지를 가진 레이저를 5 펄스 조사하여 유동이 없을 때와 Mach 0.9의 질소 유동이 있을 때의 steel 후면에서의 온도를 측정하였다. 다음의 Fig. 7은 5 펄스를 조사하였을 때의 steel 전면부에서 계산된 온도결과를 나타낸다.



(a)



(b)

Fig. 7 Calculated temperature profile of a steel coupon. (front face) : (a) air, no flow (b)  $\text{N}_2$  flow, Mach 0.9.

Figure 7a는 steel 전면부 유동이 없을 때의 온도 결과이고 (b)는 전면부에 질소 냉각이 있을 때의 온도 결과이다. 5 펄스를 조사하였기 때문에 5개의 피크점을 볼 수 있다. 또한 질소 유동의 냉각 효과로 인해 온도가 낮은 것을 볼 수 있다.

다음의 Fig. 8은 Fig. 7의 전면부의 온도 결과로부터 전달된 열에 의한 steel 후면부에서의 온도결과를 산출한 것으로 실험 데이터[7]와의 비교 분석을 통해 본 레이저 물질 가열 모델의 검증을 이루어낸 결과이다.

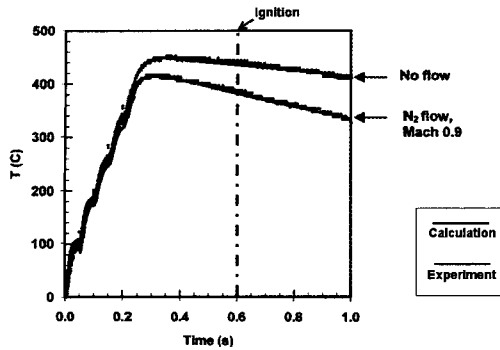
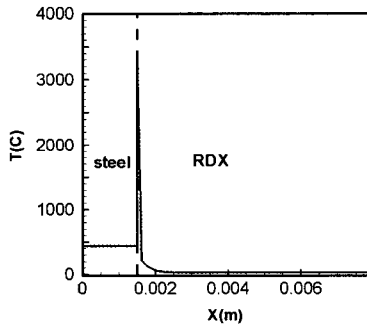
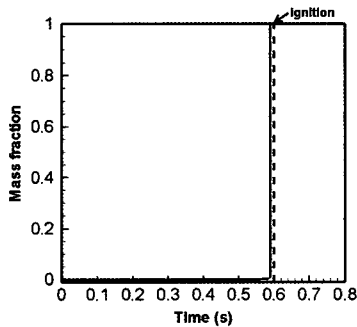


Fig. 8 The temperature profiles of steel coupon - rear face (experimental data from [7]).

그림에서 보는 바와 같이 계산된 온도결과는 실험과 일치하는 것으로 나타나므로 본 연구에서 제시한 모델의 타당성을 나타낸다.



(a)



(b)

Fig. 9 The calculated temperature of steel with RDX and mass fraction at 590.821 ms: (a) Temperature profile; (b) The mass fraction of RDX on the contact face.

계산된 air, no flow의 온도결과를 이용하여 steel의 후면에 RDX라는 폭약을 접촉시켜 놓고 점화와 폭발이 일어나는 예측 모델 결과를 도출하였다.

Figure 9의 (a)는 레이저 물질 가열에 의한 폭약 점화를 예측한 결과로서, 레이저가 조사되기 시작하여 대략 590 ms 후에 폭약의 전면부에서 갑자기 약 3300 °C로 증가하면서 점화가 발생된다. 또한 점화 여부를 확인하기 위해 final product gas의 mass fraction을 계산해 본 결과 Fig. 9의 (b)와 같이 점화 시간에 mass fraction이 1에 도달하는 것을 볼 수 있는데 이는 연소가 완전히 이루어 졌음을 의미한다. 이러한 레이저 물질 조사 가열에 의한 폭약 점화 모델은 laser-kill 과 같은 군사 응용분야에 널리 응용될 수 있다.

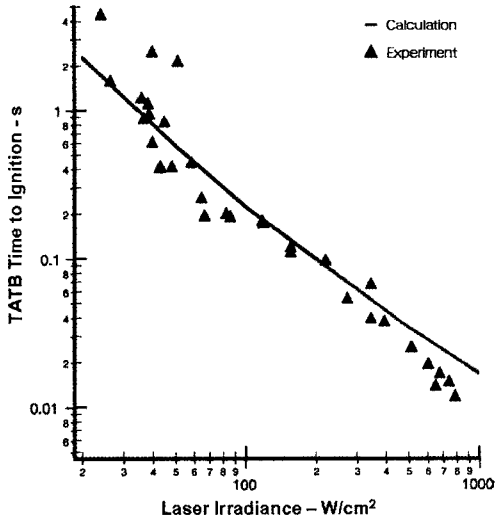
레이저 가열에 의한 화약의 점화 현상 검증을 위한 2개의 추가적인 경우를 검증하였다(ODTX). 이 경우에는 TATB와 HMX[11]를 사용하였다. TATB와 HMX에 사용된 deflagration kinetic parameters는 참고문헌 5와 14에 나타나 있으나, 여기서  $\ln Z$  값은 본 연구에 맞게 수정 되었다. Table 1은 수정되어 본 연구에 사용된 TATB와 HMX의  $\ln Z$  값이다.

Table 1. The corrected values of  $\ln Z$  for TATB and HMX.

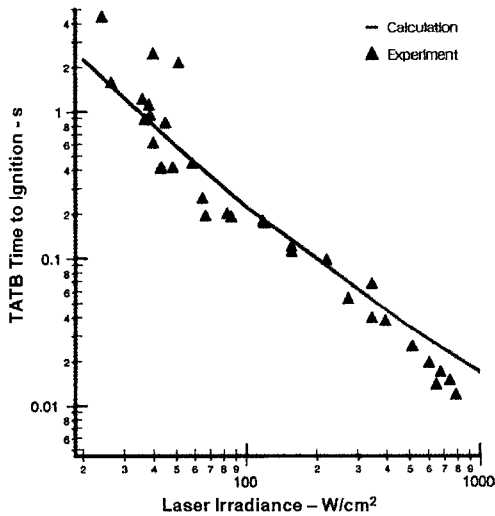
Reaction step	TATB	HMX
1	48.0	49.13
2	35.8	56.7
3	36.8	52.8
4		50.1

Figure 10은 ODTX 실험 데이터와[5] 계산 결과를 비교한 결과를 나타내고 있다. 그림에서 볼 수 있듯이 계산 결과와 실험 데이터가 상당히 잘 일치하는 것을 볼 수 있다. 이는 본 연구에서 제시한 boundary 이론과 deflagration kinetic가

적절함을 나타낸다고 하겠다.



(a)



(b)

Fig. 10 Unconfined HE ignition via direct laser irradiation shown for TATB and HMX: (a) TATB, (b) HMX.

## 6. Conclusion

본 연구에서는 레이저 물질 조사 가열에 의한

고에너지 물질의 점화 모델을 제시하였다. 이를 검증하기 위해 실험 결과와의 비교 분석을 수행하였다. 레이저에 의한 steel 4340의 가열, 열전달 현상을 위해 heat diffusion equation이 사용되었고, 이와 함께 chemical heat release가 steel과 폭약(RDX)의 열전달을 계산하기 위해 사용되었다. 또한 3 혹은 4 step chemical reaction이 폭약의 점화 현상을 보기 위해 사용되었으며, thermal boundary condition을 제시하였다. 이러한 모델은 군사적으로 laser kill system과 같은 레이저를 이용한 미사일 요격 시스템에서 유용하게 이용될 수 있다.

## 7. Acknowledgments

This work was supported by the High Energy Materials Research Center(ADD-HM-22) and the Brain Korea 21 project through the Institute of Advanced Aerospace Technology at Seoul National University. Scientific discussion with Dr. A. Gojani is warmly acknowledged.

## 참고 문헌

1. A. E. Wynne, B. C. Stuart, "Rate dependence of short-pulse laser ablation of metals in air and vacuum," *Applied physics A*, 76, 373-378(2002)
2. J. Mazumder, W. M. Steen, "Heat transfer model for cw laser material processing," *Journal of Applied Physics*, 51, 941-947 (1980)
3. J. K. Chen, J. E. Beraun, L. E. Grimes, "Short-time thermal effects in thermomechanical response caused by pulsed lasers", *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 17, 35-42 (2003)
4. B. N. Chichkov, C. Momma, S. Nolte,

- F.vonAlvensleben, A. Tunnermann, "Femtosecond, picosecond and nanosecond laser ablation of solids," *Applied Physics A*, 63, 109-115 (1996)
5. A. N. Ali, S. F. Son, B. W. Asay, M. E. Decroix, "High-irradiance laser ignition of explosives," *Combustion Science and Technology*, 175, 1551-1571 (2003)
  6. C. M. Tarver, "Chemical kinetic modeling of HMX and TATB laser ignition tests," *Journal of Energetic Materials*, 22, 93-107 (2004)
  7. C. D. Boley, A. M. Rubenchik, "Modeling of high-energy pulsed laser interactions with coupons," LLNL Technical Report, 2003, UCRL-ID-151857
  8. J. J. Yoh, M. A. McClelland, J. L. Maienschein, A. L. Nichols, and C. M. Tarver, "Simulating thermal explosion of octahydrotetranitrotetrazine-based explosives: model comparison with experiment," *Journal of Applied Physics*, 100, 073515(2006)
  9. R. Hultgren, P.D. Desai, D. T. Hawkins, M. Gleiser, K. K. Kelley, Selected values of the thermodynamic properties of the elements, American Society of Metals, p. 185 (1973)
  10. Y. S. Touloukian, "Thermophysical properties of matter," Vol. 1, Thermal conductivity, Metallic Elements and Alloys, IFI/Plenum, NY, p. 169 (1970)
  11. J. J. Yoh, K. H. Kim, "Shock compression of condensed matter using Eulerian multi-material method: Applications to multidimensional shocks, deflagration, detonation and laser ablation," *Journal of Applied Physics*, in press (2008)
  12. S. V. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow, Taylor&Francis, (1980)
  13. J. J. Yoh, M. A. McClelland, J. L. Maienschein, J. F. Wardell, and C. M. Tarver, "Simulating thermal explosion of octahydrotetranitrotetrazine-based explosives: model comparison with experiment," *Journal of Applied Physics*, 97, 083504 (2005)
  14. K. C. Lee, K. H. Kim, J. J. Yoh, "Modeling of high energy laser ignition of energetic materials," *Journal of Applied Physics*, 103, 083536 (2008)
  15. 이경철, 김기흥, Ardian Gohani, 이현희, 최지혜, 여재익, "고에너지 물질의 레이저 점화 연구," 한국추진공학회, 2007 추계학술대회