

아르곤 기체에서 진행하는 충격파 연구를 위한 비평형 분자동역학 모의실험 개발 및 응용

Development and Application of a Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation Method to Study Shock Waves Propagating in Argon Gas

황 현 석* 권 찬 호* 김 흥 래*
 Hyonseok Hwang Chan Ho Kwon Hong Lae Kim

김 성 식** 박 민 규**
 Seong-shik Kim Min Kyu Park

Abstract

A nonequilibrium molecular dynamics(NEMD) simulation method is developed and applied to study shock waves propagating through argon gas. In this simulation method, shock waves are generated by pushing a piston at a constant speed from one side of a simulation box filled with argon molecules. A linear relationship between piston speeds and shock speeds is observed. Thermodynamic properties including density, temperature, and pressure before and after the shock front are obtained from the simulations and compared with the well-known Rankine-Hugoniot equations based on ideal gases. The comparison shows an excellent agreement, indicating that this NEMD simulation method can be employed to investigate various physical properties of shock waves further.

Keywords : Shock Wave(충격파), Shock Front(충격파 전선), Argon Gas(아르곤 기체), Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation(비평형 분자동역학 모의실험), Rankine-Hugoniot Relations(Rankine-Hugoniot 관계식), Light-Generating Device(섬광발생장치)

1. 서 론

충격파란 강렬한 폭발이나 초음속으로 움직이는 물

체에 의해 발생하는 진행성 교란의 한 종류로서, 충격파 전선 전후 면에서 밀도, 온도, 압력, 그리고 연관된 열역학적 성질들의 급격한 변화에 의해 특징지어진다. 충격파가 기체, 액체, 혹은 고체 매질을 통과할 때 발생하는 매질의 구조 변화와 열역학적 성질들의 급격한 변화에 대하여 많은 실험과 이론 및 전산 연구가 진행되어 왔다^{1~6)}.

충격파와 연관된 흥미로운 연구 중 하나는 아르곤 기체에 충격파를 가하여 빛을 발생시키는 것이다. 즉

† 2009년 9월 14일 접수~2009년 11월 20일 게재승인
 * 강원대학교 화학과(Department of Chemistry, Kangwon National University)
 ** 국방과학연구소(ADD)
 책임저자 : 황현석(hhwang@kangwon.ac.kr)

충격파를 가하여 아르곤 분자들을 섬광발생장치의 광원으로 이용하려는 것으로서^[3,7,8], 이 과정의 핵심 반응 메커니즘은 다음과 같다. 먼저 아르곤 기체에 충격파를 가하여 아르곤 분자들의 병진운동 에너지를 증가시킨 후, 병진운동 에너지가 비탄성 충돌에 의하여 내부 에너지인 전자 에너지로 전환되면서 전자들이 들뜨게 되거나 혹은 플라즈마 상태가 되고, 들뜨거나 혹은 플라즈마 상태에서 재결합한 전자들이 더 낮은 에너지 준위로 전이할 때 빛을 방출하게 된다. 만약 아르곤 기체에서 방출되는 빛의 세기가 충분히 크다면 이를 섬광발생장치의 광원으로 이용할 수 있을 것이다.

아르곤 기체에 충격파를 발생시켜 이를 섬광발생장치의 광원으로 사용하기 위해서는 발생하는 충격파의 세기와 이로 인해 증가하는 아르곤 기체의 병진 운동 에너지 사이의 관계를 정확히 이해하는 것이 매우 중요하다. 만약, 충격파의 세기가 작아서 아르곤 기체의 병진 운동 에너지 증가가 크게 일어나지 않는다면, 병진 운동 에너지가 모두 전자 에너지로 전환된다고 하여도 들뜬 상태에 존재하는 전자를 가진 아르곤 분자의 수가 많지 않을 것이고, 이는 아르곤 분자에서 방출되는 빛의 세기를 떨어뜨리는 요인이 될 것이다. 반대로, 방출하는 빛의 세기를 증가시키기 위해 충격파의 세기를 필요 이상으로 크게 하려는 시도는 섬광발생장치의 구조를 복잡하게 만들고 비용을 증가시키는 요인이 될 것이다. 그러므로 적절한 규모와 세기를 갖는 충격파를 발생시키는 것이 매우 중요하고, 이는 충격파의 세기와 이로 인해 증가하는 아르곤 기체의 병진 운동 에너지 사이의 관계를 분자 수준에서 이해할 때 가능하다.

비평형 분자동역학 모의실험은 기체, 액체, 혹은 고체 물질을 구성하는 수많은 입자들의 비평형 상태에서의 운동을 컴퓨터를 이용하여 모사하는 전산 방법의 하나이다^[9~13]. Rankine-Hugoniot 관계식과 같은 충격파에 관한 이론들이 충격파가 진행할 때 형성되는 비평형 상태를 정확하게 기술하지 못하는 반면에^[1], 비평형 분자동역학 모의실험은 충격파 진행시 형성되는 비평형 상태를 원자나 분자 수준에서 비교적 정확하게 묘사할 수 있는 장점이 있다. 특히, 매질 속을 진행하는 충격파의 경우에 비평형 분자동역학 모의실험을 통한 연구는 급격한 매질의 구조와 성질 변화를 원자나 분자 수준에서 연구함으로써 충격파의 성질을 이해하는데 많은 도움을 준다. 예를 들면, Belonoshko^[11]는

비평형 분자동역학 모의실험을 이용하여 아르곤 원자로 이루어진 고체 격자에 충격파를 가했을 경우 발생하는 고체의 용해 현상에 대해 연구하였고, 이 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 아르곤 원자로 이루어진 고체 격자의 경우에 용해 현상이 불균일하게 지역적으로 일어남을 밝혔다.

본 논문에서는 가해지는 충격파의 세기와 이로 인해 증가하는 아르곤 기체의 병진 운동 에너지 사이의 관계를 분자 수준에서 이해하기 위하여 우리가 개발한 비평형 분자동역학 모의실험 방법을 소개한다. 그리고 아르곤 기체에 충격파가 진행할 때 발생하는 아르곤 기체의 열역학적 성질 변화에 대해 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 얻어진 연구결과를 발표한다.

2. 모의실험 방법 및 이론

가. 비평형 분자동역학 모의실험 방법

비평형 분자동역학 모의실험을 실행하기 위한 모의실험 상자는 Fig. 1과 같이 충격파가 진행하는 z 방향을 긴 변으로 하는 직육면체의 구조를 가진다. 모의실험 상자는 충격파를 발생시키는 피스톤의 속도에 따라 x, y, z 방향으로 각각 $150 \text{ \AA} \times 150 \text{ \AA} \times 3000 \text{ \AA}$, $150 \text{ \AA} \times 150 \text{ \AA} \times 4000 \text{ \AA}$, 그리고 $150 \text{ \AA} \times 150 \text{ \AA} \times 6000 \text{ \AA}$ 의 크기를 가진다. 충격파를 발생시키기 위한 피스톤은 Fig. 1에 보이는 모의실험 상자의 왼쪽 끝에 위치하며, 피스톤을 +z 방향으로 밀어서 충격파를 발생시킨다. 본 모의실험에서는 x, y 방향으로는 주기 경계조건(periodic boundary condition)을 사용하고, z 방향으로는 피스톤에 의해 주기 경계조건을 사용할 수 없으므로 반사 경계조건(reflective boundary condition)을 사용한다. 즉, 모의실험 상자의 왼쪽 끝에는 피스톤이, 오른쪽 끝에는 벽이 위치한다. 피스톤과 벽은 균일한 아르곤 원자 결정으로 구성^[5,6]되어 있다고 가정한다.

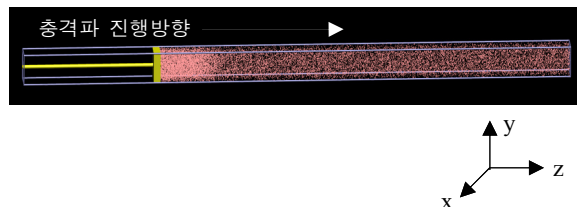


Fig. 1. 아르곤 분자들로 채워진 모의실험 상자. 가장 긴 변이 z 방향으로 충격파가 진행하는 방향이다.

모의실험을 실행하기 위하여 모의실험 상자에 아르곤 단원자 분자들을 일정하게 배열한다. 이 모의실험에서는 초기 구성으로 면심입방 격자구조를 갖도록 아르곤 분자들을 배열하였다. 아르곤 기체의 초기 밀도는 아르곤 분자의 수를 모의실험 상자의 크기에 따라 조절함으로써 일정하게 유지된다. 본 모의실험에서는 아르곤 분자들이 모의실험 동안 기체의 구조와 성질을 갖도록 하기 위하여 아르곤 분자의 초기 밀도를 0.0221g/cm³로 정하였다. 충격파를 발생시키는 피스톤의 속도에 따른 모의실험 상자의 크기와 아르곤 분자의 수, 그리고 초기 밀도가 Table 1에 정리되어 있다.

Table 1. 초기 온도와 압력이 각각 298K와 13.7bar일 때, 피스톤의 속도에 따른 모의실험 상자의 크기, 아르곤 분자의 수, 그리고 초기 밀도

피스톤 속도 (km/s)	모의실험 상자 크기(Å ³)	아르곤 분자 수	초기 밀도 (g/cm ³)
0.5	150×150×3000	22500	0.0221
1.0	150×150×4000	30000	0.0221
1.5	150×150×4000	30000	0.0221
2.0	150×150×4000	30000	0.0221
2.5	150×150×4000	30000	0.0221
3.0	150×150×6000	45000	0.0221

본 비평형 분자동역학 모의실험에서 두 아르곤 원자 i 와 j 사이에 작용하는 상호작용은 다음과 같은 Lennard-Jones 퍼텐셜 에너지에 의해 주어진다.

$$V_{LJ}^{Ar-Ar}(r_{ij}) = 4\epsilon_{Ar} \left[\left(\frac{\sigma_{Ar}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{Ar}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

위 식에서 r_{ij} 는 두 아르곤 원자 i 와 j 간 거리를 나타낸다. ϵ_{Ar} 와 σ_{Ar} 는 아르곤 원자에 대한 Lennard-Jones 매개변수로, 아르곤 원자에 대해 $\epsilon_{Ar} = 2.381 \times 10^2$ kcal/mol이고 $\sigma_{Ar} = 3.405 \text{ \AA}$ 의 값을 가진다. 모의실험 상자의 양 끝에 각각 존재하는 피스톤과 벽은 균일한 아르곤 결정으로 구성되어 있다고 가정하므로, 아르곤 원자 i 와 피스톤, 혹은 벽과의 상호작용은 다음과 같은 Lennard-Jones 퍼텐셜 에너지에 의해 주어진다.

$$V_{LJ}^{Ar-Wall}(z_i) = 4\epsilon_{Ar} \left[\left(\frac{\sigma_{Ar}}{z_i} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{Ar}}{z_i} \right)^6 \right] \quad (2)$$

위 식에서 z_i 는 아르곤 원자 i 와 피스톤 혹은 벽과의 z 방향으로 거리를 나타낸다.

모의실험의 초기 구성을 정한 후에, 먼저 100ps 동안 입자의 수(N), 모의실험 상자의 부피(V), 그리고 온도(T)가 일정하게 유지되는 NVT 평형 분자동역학 모의실험을 실행하여 아르곤 기체들이 충격파가 발생하기 전의 평형 상태에 도달하도록 한다. 본 평형 분자동역학 모의실험에서 사용한 time step은 4fs(=4×10⁻¹⁵ 초)이고, 200fs마다 velocity scaling 방법을 이용하여 평형 상태에서 온도를 298K로 일정하게 유지한다. 아르곤 기체들이 평형 상태에 도달한 후에 비평형 분자동역학 모의실험을 실행한다. 비평형 분자동역학 모의실험에서는 100ps 동안 피스톤을 +z 방향으로 일정한 속도로 밀면서 충격파를 발생시킨다. 이 비평형 분자동역학 모의실험에서 사용한 time step은 4fs이고, 충격파가 발생한 후에 비평형 상태에서 아르곤 기체의 온도 변화를 관찰하기 위하여 피스톤이 움직인 직후부터는 velocity scaling을 하지 않는다.

결론적으로 본 분자동역학 모의실험의 총 모의실험 시간은 200ps이며, 처음 100ps 동안은 평형 분자동역학 모의실험을, 나중 100ps 동안은 비평형 분자동역학 모의실험을 실행하였다. 통계적으로 의미있는 열역학 값들을 얻기 위하여 각 피스톤 속도에 대해 30번의 분자동역학 모의실험을 실행하여 평균한 수치들을 그 값으로 이용하였다.

나. Rankine-Hugoniot 관계식

충격파 전선 전, 후면에서 이상기체의 열역학적 성질들 사이의 관계는 물질 보존, 운동량 보존, 그리고 에너지 보존에 대한 다음의 연립 방정식들을 풀어서 구할 수 있다.

$$\rho_0 u_0 = \rho_1 u_1 \quad (3)$$

$$P_0 + \rho_0 u_0^2 = P_1 + \rho_1 u_1^2 \quad (4)$$

$$H_0 + \frac{1}{2} u_0^2 = H_1 + \frac{1}{2} u_1^2 \quad (5)$$

위 식에서 아래 첨자 0과 1은 Fig. 2에서 나타나듯

이 충격파 전선 전, 후면의 평형 상태에 있는 영역을 의미한다. 위 식들을 이상기체의 상태를 이용하여 풀면 충격파 전, 후면에서 밀도(ρ), 온도(T), 그리고 압력(P)의 비가 충격파 속도의 함수로 나타나는, 다음과 같은 Rankine-Hugoniot 관계식들^[4,14]을 얻을 수 있다.

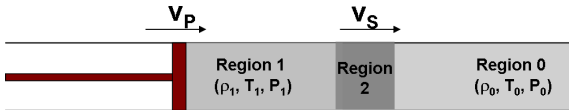


Fig. 2. 충격파 전선 전, 후면에서 평형 영역과 비평형 영역. Region 0은 충격파가 발생하기 전의 평형 영역이고, Region 1은 충격파가 발생한 후의 평형 영역이며, Region 2는 충격파 전선 후면에서 비평형 영역이다. v_p 는 피스톤의 속도를, v_s 는 충격파의 속도를 의미한다.

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{(\gamma+1)M^2}{(\gamma-1)M^2+2} \quad (6)$$

$$\frac{T_1}{T_0} = \frac{\left(\gamma_1 M^2 - \frac{\gamma-1}{2}\right) \left(\frac{\gamma-1}{2} M^2 + 1\right)}{\left(\frac{\gamma+1}{2}\right)^2 M^2} \quad (7)$$

$$\frac{P_1}{P_0} = \frac{2\gamma M^2 - (\gamma-1)}{\gamma+1} \quad (8)$$

위 식에서 M 은 마하수를 의미하며, 충격파의 속도를 같은 매질에서 음파의 속도로 나눈 값으로 정의된다. γ 는 아르곤 기체의 일정 압력 열용량과 일정부피 열용량의 비로서, 이상기체의 경우에 $\gamma = 1.67$ 로 주어진다.

3. 모의실험 결과 및 해석

가. 피스톤 속도와 충격파 속도와의 관계

본 비평형 분자동역학 모의실험에서 충격파를 발생시키기 위해 사용하는 피스톤의 속도와 이 때 발생하는 충격파 속도와의 관계를 조사하기 위하여 피스톤의 속도를 변화시켜가면서 그 때 발생하는 충격파의 속도를 구하였다. 피스톤에 의해 발생하는 충격파의 속도를 구하기 위해 먼저 충격파가 발생한 후에 10ps

마다 z 방향의 함수로 아르곤 분자의 밀도 분포를 계산하였다. Fig. 3은 피스톤의 속도가 2km/s인 경우에 10ps 마다 모의실험으로부터 구한 아르곤 밀도 분포 곡선들을 보여준다.

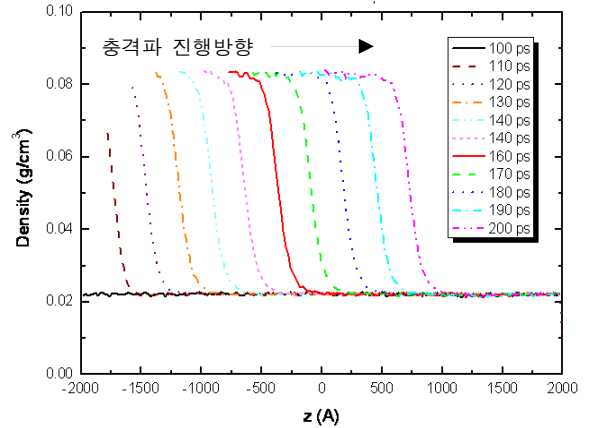


Fig. 3. 피스톤의 속도가 2km/s인 경우에 모의실험으로부터 얻어진 시간에 따른 아르곤 분자들의 밀도 분포 곡선

밀도 분포가 10ps 동안 이동하는 거리를 측정하여 그로부터 충격파의 속도를 구할 수 있다. 즉, 충격파의 속도는 다음과 같이 주어진다.

$$\text{충격파 속도} = \frac{10ps \text{ 동안 밀도분포 이동거리}}{10ps} \quad (9)$$

아르곤 기체 속을 통과하는 음파의 속도는 298K에서 0.322km/s로 주어지므로, 구한 충격파의 속도를 음파의 속도로 나누면 충격파 속도에 대한 마하수도 얻을 수 있다. 피스톤의 속도에 따른 충격파의 속도와 충격파의 마하수가 Table 2에 나와 있다.

Table 2로부터 일정한 속도로 움직이는 피스톤에 의해 생성되는 충격파의 속도는 피스톤의 속도보다 큰 것을 알 수 있다. 피스톤 속도와 충격파 속도와의 관계는 Fig. 4에 나타난다.

Fig. 4는 충격파의 속도(v_s)가 피스톤의 속도(v_p)와 상당한 선형관계에 있음을 보여준다, 최소자승법을 이용하여 Fig. 4로부터 얻어진 기울기는 약 1.32이다.

Rankine-Hugoniot 식으로부터 충격파의 속도와 피스톤의 속도 사이의 관계를 충격파 전선 전, 후면에서 밀도 비를 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다^[4].

Table 2. 피스톤의 속도에 따른 충격파의 속도와 그 마하수

피스톤 속도 (km/s)	충격파 속도 (km/s)	마하수
0.5	0.82	2.55
1.0	1.42	4.41
1.5	2.07	6.43
2.0	2.74	8.51
2.5	3.40	10.56
3.0	4.12	12.80

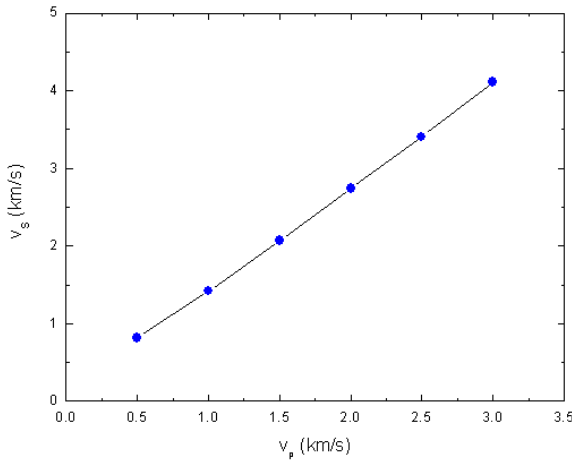


Fig. 4. 피스톤 속도(v_p)의 함수로 나타낸 충격파 속도(v_s)

$$v_s = \frac{\rho_1/\rho_0}{\rho_1/\rho_0 - 1} v_p \quad (9)$$

한편, (6) 식으로부터 충격파의 속도가 증가할수록, 즉 마하수가 커질수록 ρ_1/ρ_0 는

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \quad (10)$$

에 수렴하고, 아르곤과 같은 단원자분자의 경우에는 $\gamma = 5/3$ 이므로 $\lim_{M \rightarrow \infty} \rho_1/\rho_0 = 4$ 가 된다. 그러므로 충격파의 속도가 상당히 큰 경우에 (9) 식과 (10) 식으로부터 충

격파의 속도(v_s)와 피스톤의 속도(v_p) 사이에는 선형관계가 존재하고, 그 기울기는 아르곤 기체의 경우에

$$\frac{\rho_1/\rho_0}{\rho_1/\rho_0 - 1} = \frac{4}{3} \approx 1.33 \quad (11)$$

이 된다. 위 계산 결과에 따르면 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 얻어진 기울기(=1.32)가 Rankine-Hugoniot 식으로부터 얻어진 기울기(=1.33)와 잘 일치함을 알 수 있다.

나. 충격파 전선 전, 후면의 평형 영역에서 아르곤 기체의 밀도, 온도, 압력 계산.

비평형 분자동역학 모의실험으로부터 충격파 전선 전, 후면에서 밀도, 온도, 그리고 압력을 구할 수 있다. 충격파 전선 전, 후면에서 밀도를 구하기 위하여 먼저 충격파 전선 전, 후면에 일정한 부피를 가진 공간을 설정한다. 밀도는 그 공간의 부피와 그 공간 내에 존재하는 아르곤 분자들의 수를 시간 평균하여 얻어진다. 즉, 일정한 공간내의 아르곤 기체의 밀도는 다음과 같이 주어진다.

$$\rho_s = \frac{\langle N_s \rangle_t}{V_s} \quad (12)$$

위 식에서 V_s 는 설정된 공간의 부피이며, N_s 는 그 공간 내에 존재하는 아르곤 분자의 수이다. (12) 식에서 $\langle \dots \rangle_t$ 는 시간 평균을 의미한다. Fig. 5(a)는 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 얻어진 충격파 전선 전, 후면의 평형영역에서 밀도 비를 Rankine-Hugoniot 식의 하나인 (6) 식과 비교한 것을 보여준다. 모의실험 결과가 Rankine-Hugoniot 식의 결과와 잘 일치하며, 두 결과 모두 (10) 식에 의해 예측된 것과 같이 마하수가 증가할수록 밀도 비가 4에 접근하는 것을 알 수 있다.

비평형 분자동역학 모의실험에서 충격파 전선 전, 후면의 평형영역에서의 온도는 충격파가 진행하기 전과 후에 일정한 공간 내에 존재하는 아르곤 분자들의 질량과 속도로부터 구할 수 있다. 이때 온도는 다음과 같이 정의된다.

$$T_s = \frac{m_{Ar}}{3(N_s - 1)k_B} \sum_{i=1}^{N_s} \langle v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2 + v_{i,z}^2 \rangle_t \quad (13)$$

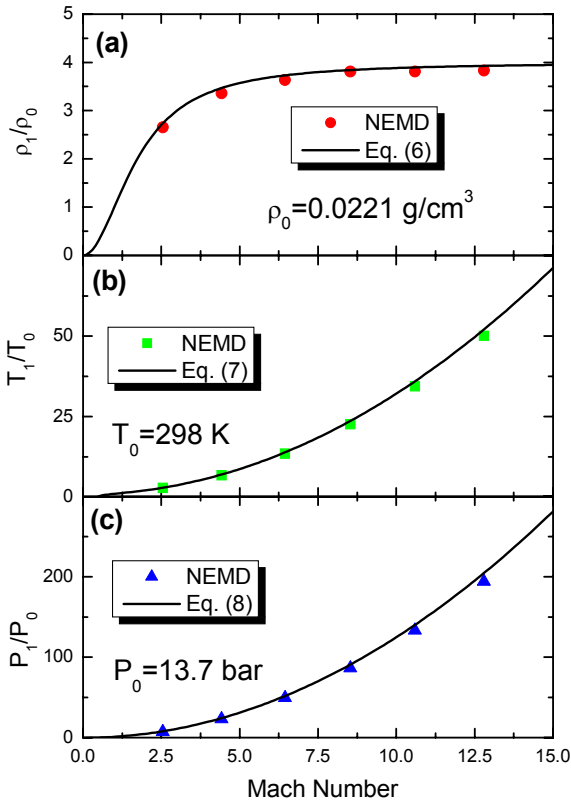


Fig. 5. 비평형 분자동역학 모의실험(NEMD)으로 얻어진 충격과 전선 전, 후면의 평형영역에서 아르곤 기체의 밀도, 온도, 압력 비와 Rankine-Hugoniot 식과의 비교

위 식에서 m_{Ar} , k_B 은 각각 아르곤 분자의 질량과 Boltzmann 상수이며, v_{ix} , v_{iy} , v_{iz} 는 각각 아르곤 분자의 x, y, z 방향 속도 성분이다. Fig. 5(b)는 모의실험 결과가 Rankine-Hugoniot 식의 결과와 잘 일치함을 보여준다. Fig. 5(b)로부터 밀도 비와는 달리 온도 비는 마하수가 증가할수록 계속 증가함을 알 수 있다.

온도 비를 구하는 것과 같은 방법으로 충격과 전선 전, 후면의 일정한 공간 내에서 아르곤 기체의 압력도 구할 수 있다. 분자동역학 모의실험에서 압력은 virial 정리^[15]에 의해 다음과 같이 주어진다.

$$P_s = \rho_s k_B T_s + \frac{1}{3V_s} \left\langle \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j>i}^N \vec{r}_{ij} \cdot \vec{F}_{ij} \right\rangle_t \quad (14)$$

위 식에서 ρ_s 는 설정된 공간 내의 아르곤 기체 밀

도, N 은 모의실험 상자에 존재하는 아르곤 분자의 총 수, $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, 그리고 \vec{F}_{ij} 는 아르곤 분자 j 에 의해 아르곤 분자 i 에 가해지는 힘이다. (14) 식에서 밀도와 온도는 시간 평균에 의해 얻어진 값이다. Fig. 5(c)는 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 얻어진 충격과 전선 전, 후면에서 압력 비가 Rankine-Hugoniot 식의 하나인 (8) 식과 잘 일치함을 보여준다. 또한, 온도 비와 같이 압력 비도 마하수가 증가함에 따라 계속 증가함을 보여준다.

다. 모의실험을 통한 충격파의 진행으로 형성되는 평형, 비평형 영역에 대한 구현

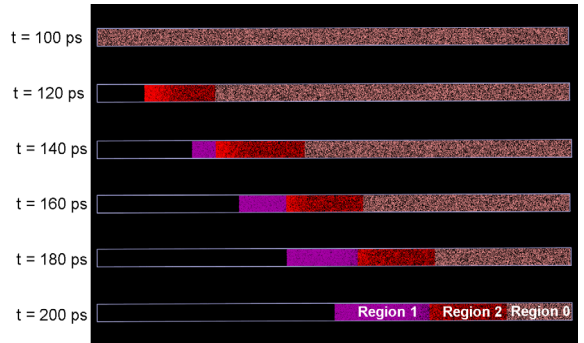


Fig. 6. 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 얻어진 피스톤 속도가 2.0km/s일 때 발생하는 충격파에 의해 형성되는 Fig. 2의 각 영역들. Region 0은 분홍색, Region 1은 보라색, Region 2는 붉은색으로 표시된다.

앞에서 얻어진 피스톤 속도와 충격파 속도 간의 관계에 대한 계산과 밀도, 온도, 압력에 대한 Rankine-Hugoniot 식들과의 비교를 통하여 개발된 비평형 분자동역학 모의실험이 충격파의 열역학적 성질을 비교적 정확하게 모사함을 보였다. 이를 바탕으로 충격파가 진행할 때 형성되는 Fig. 2의 각 영역을 비평형 분자동역학을 이용하여 나타낼 수 있다. 먼저 충격파가 발생하기 전의 영역(Region 0)과 충격파가 발생하여 충격과 전선이 형성되는 영역(Region 2)의 경계는 밀도 분포곡선이 초기 밀도인 0.0221 g/cm^3 에서 급격하게 변하는 지점으로부터 구할 수 있다. 충격파가 진행한 후에 형성되는 평형 영역(Region 1)과 충격과 전선이 형성되는 영역(Region 2)과의 경계도 같은 방법으로 구할 수 있다.

Fig. 6은 비평형 분자동역학으로부터 얻어진 충격파가 발생하여 진행하면서 형성되는 각 영역들을 나타낸다. Region 1에서 피스톤과 Region 1의 경계(Region 1의 왼쪽 면)는 피스톤의 속도인 2.0km/s로 진행하고 Region 1과 Region 2의 경계(Region 1의 오른쪽 면)는 충격파의 속도인 2.74km/s로 진행하므로 Region 1의 크기는 계속 증가함을 볼 수 있다. 충격파 전선이 형성되는 Region 2는 왼쪽과 오른쪽 경계 모두 충격파의 속도인 2.74km/s로 진행하므로 Region 2의 크기는 일정하게 유지되는 것을 알 수 있다.

4. 결론

본 논문에서는 충격파가 진행할 때 나타나는 아르곤 기체의 열역학적 성질 변화를 연구하기 위하여 개발된 비평형 분자동역학 모의실험을 소개하였다. 이를 이용하여 피스톤 속도와 충격파 속도의 관계식을 구하였고, 여기에서 얻어진 기술기 1.32가 이론으로부터 얻어지는 기술기 1.33과 거의 일치함을 알 수 있었다. 또한, 충격파가 발생하기 전의 평형 영역과 충격파가 진행한 후 형성되는 평형 영역과의 밀도, 온도, 압력 비를 개발된 비평형 분자동역학 모의실험을 이용하여 구하였고, 두 평형 영역의 밀도, 온도, 압력 비에 대한 Rankine-Hugoniot 관계식들과 비교하여 매우 잘 일치함을 보였다. 이로부터 비평형 분자동역학 모의실험이 충격파가 진행할 때 발생하는 아르곤 기체의 열역학 성질 변화를 연구하는데 매우 유용함을 알 수 있었다. 이를 바탕으로 충격파가 진행할 때 형성되는 각 영역을 조사하기 위하여 비평형 분자동역학 모의실험을 이용하였고, 피스톤 속도와 충격파 속도와 연관되어 각 영역이 발생하고 진행함을 알 수 있었다.

본 연구로부터 개발된 비평형 분자동역학 모의실험이 아르곤 기체에서 진행하는 충격파를 비교적 정확하게 모사할 뿐만 아니라, Rankine-Hugoniot 관계식으로는 얻을 수 없는 비평형 영역에 대한 정보도 제공하는 것을 알 수 있었다. 이를 바탕으로 후속 연구에서는 비평형 분자동역학 모의실험을 이용하여 충격파 내에서 아르곤 분자의 속도 분포와 병진 운동에너지 분포를 조사하여 아르곤 분자의 병진 운동에너지가 내부 에너지인 전자 에너지로 전환되어 들뜬 전자들이 더 낮은 에너지 준위로 전이할 때 발생할 수 있는 방출 스펙트럼의 파장과 세기를 추정하고자 한다.

후 기

본 연구는 국방과학연구소 기초연구사업 연구비(과제번호 : ADD-08-08-02)의 지원으로 수행되었다.

Reference

- [1] H. M. Mott-Smith, "The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave", Phys. Rev., Vol. 82, No. 6, pp. 885~892, 1951. 6.
- [2] T. P. Cotter, "Collision Kinetics in a Shock Wave", Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1413, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, 1952.
- [3] J. W. Bond, "Structure of a Shock Front in Argon", Phys. Rev., Vol. 105, No. 6, pp. 1683~1694, 1957. 3.
- [4] A. G. Gaydon and I. R., Hurlle, "The Shock Tube in High Temperature Chemical Physics", Reinhold Publishing Co., New York, 1963.
- [5] G. A. Bird, "Molecular Gas Dynamics", Clarendon, Oxford, 1976.
- [6] G. Phan-Van-Diep, D. Erwin, E. P. Muntz, "Nonequilibrium Molecular Motion in a Hypersonic Shock Wave", Science, Vol. 245, pp. 624~626, 1989. 8.
- [7] R. L. Conger, L. T. Long, J. A. Parks, and J. H. Johnson, "The Spectrum of the Argon Bomb", Appl. Opt., Vol. 4, pp. 273~276, 1965. 3.
- [8] C. R. Jones and W. C. Davis, "Optical Properties of Explosive-Driven Shock Waves in Noble Gases", LA-9475-MS, Los Alamos Nat'l. Lab., Los Alamos, 1982. 9.
- [9] M. P. Allen and Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Clarendon, Oxford, 1987.
- [10] B. L. Holian, W. G. Hoover, B. Moran, and G. K. Straub, "Shock-wave Structure Via Nonequilibrium Molecular Dynamics and Navier-Stokes Continuum Mechanis", Phys. Rev. A, Vol. 22, pp. 2798~2808, 1980. 12.
- [11] A. B. Belonoshko, "Atomic Simulation of Shock Wave-Induced Melting in Argon", Science, Vol. 275, No. 5302, pp. 955~957, 1997. 2.

- [12] B. L. Holian and P. S. Lomdahl, "Plasticity Induced by Shock Waves in Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations", *Science*, Vol. 280, pp. 2085~2088, 1998. 6.
- [13] L. Cai, Q. Chen, J. Zhang, D. Chen, F. Jing, "Atomic Simulation of Shock Compressed Liquid Helium", *Physica B* Vol. 269, pp. 304~309, 1999. 9.
- [14] J. D. Lambert, "Vibrational and Rotational Relaxation in Gases", Clarendon Press, Oxford, 1977.
- [15] J. P. Hansen and I. R. McDonald, "Theory of Simple Liquids", Academic Press Inc., London, 1986.