

충격파 내에서 형성되는 아르곤 기체의 운동 에너지 분포와 속도 분포에 대한 비평형 분자동역학 모의실험 연구

Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation Study of Kinetic Energy and Velocity Distribution Profiles of Argon Gases in Shock Waves

황 현 석* 이 지 혜* 권 찬 호* 김 흥 래*
Hyonseok Hwang Ji Hye Lee Chan Ho Kwon Hong Lae Kim
박 민 규** 김 성 식**
Min Kyu Park Seong-shik Kim

Abstract

A series of nonequilibrium molecular dynamics(NEMD) simulations are performed to investigate the kinetic energy and velocity distributions of molecules in shock waves. In the simulations, argon molecules are used as a medium gas through which shock waves are propagating. The kinetic energy distribution profiles reveals that as a strong shock wave whose Mach number is 27.1 is applied, 39.6% of argon molecules inside the shock wave have larger kinetic energy than molecular ionization energy. This indicates that an application of a strong shock wave to argon gas can give rise to an intense light. The velocity distribution profiles in z direction along which shock waves propagate clearly represent two Maxwell-Boltzmann distributions of molecular velocities in two equilibrium regions and one bimodal velocity distribution profile that is attributed to a nonequilibrium region. The peak appearing in the directional temperature in z direction is discussed on a basis of the bimodal velocity distribution in the nonequilibrium region.

Keywords : Shock Wave(충격파), Shock Front(충격파 전선), Argon Gas(아르곤 기체), Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation(비평형 분자동역학 모의실험), Rankine-Hugoniot Equations(Rankine-Hugoniot 식), Light-Generating Device(섬광발생장치), Kinetic Energy Distribution Profile(운동 에너지 분포 곡선), Velocity Distribution Profile(속도 분포 곡선)

† 2010년 11월 5일 접수~2011년 1월 20일 게재승인
* 강원대학교 화학과(Department of Chemistry, Kangwon National University)
** 국방과학연구소(ADD)
책임저자 : 황현석(hhwang@kangwon.ac.kr)

1. 서론

강렬한 폭발이나 초음속으로 움직이는 물체에 의해 발생하는 충격파가 기체, 액체, 또는 고체 매질을 통과

하는 경우에 충격파의 에너지는 매질로 전달되고, 이로 인해 매질의 구조와 열역학적 성질들은 급격하게 변하게 된다^{1~6}. 특히 수증 폭발에 의해 발생한 충격파에 의한 온도 변화는 ‘천안함 어뢰 1번 글씨 부위 온도 변화’ 논쟁과 연관되어 최근에 많은 관심을 받고 있다⁷.

액체나 고체에서 발생하는 충격파 이외에 기체에서 진행되는 충격파에 의해 발생하는 광학적 현상에 대해서 많은 관심과 주의가 기울여져 왔다. 즉, 충격파가 아르곤 기체를 통과할 때 발생하는 섬광의 원인을 규명하고 이를 섬광발생장치의 광원으로 사용이 가능한지 규명하려는 많은 실험과 이론 및 전산 연구가 진행되어 왔다^{3,8,9}. 충격파에 의해 아르곤 기체에서 발생하는 섬광의 원인에 대해 크게 두 가지 메커니즘이 제안되고 있다. 두 메커니즘에서 공통적으로 큰 운동 에너지를 갖는 분자가 다른 분자와 비탄성 충돌을 할 때 충돌한 분자의 운동 에너지가 다른 분자의 전자 에너지로 전환되는 것을 가정한다. 두 메커니즘의 차이점은 첫 번째 메커니즘에서는 충돌하는 분자의 운동 에너지가 이온화 에너지보다 충분히 커서 다른 분자의 전자 에너지로 전환될 때 전자가 원자핵으로부터 분리되어 충격파 전선 후면에서 플라즈마 상태가 형성된다고 가정한다. 이 메커니즘에서는 플라즈마 상태의 전자가 원자핵과 재결합한 후에 낮은 에너지 준위로 전이하는 과정에서 방출하는 빛이 섬광의 주된 발생 원인이 된다고 주장한다. 두 번째 메커니즘에서는 운동 에너지가 다른 분자의 전자 에너지로 전환되어 전자가 들뜬 상태로 전이된 후에 다시 바닥 상태나 낮은 들뜬 상태로 전이할 때 방출하는 빛을 광원의 주된 원인으로 제안한다. 기체에 충격파를 가했을 때 발생하는 빛의 스펙트럼 형태는 위의 두 메커니즘 모두가 섬광의 발생 원인이 될 수 있음을 암시한다⁸.

위에서 언급한 섬광 발생 메커니즘으로부터 유추할 수 있듯이 충격파 내 분자들의 운동 에너지는 섬광의 세기와 밀접한 관계가 있다. 즉, 분자의 이온화 에너지 이상의 운동 에너지를 갖는 분자들의 수가 많을수록, 그리고 전자들을 들뜬 상태로 전이시킬 수 있는 운동 에너지를 갖는 분자들이 많을수록 섬광의 세기는 증가하게 될 것이다. 그러므로 충격파 내에서 분자들의 운동 에너지 분포를 정확하게 이해하는 것은 효과적인 섬광발생장치를 설계함에 있어서 매우 중요하다.

본 논문에서는 비평형 분자동역학 모의실험을 이용하여 아르곤 기체에 충격파를 가할 때 나타나는 평형

영역과 비평형 영역을 구분하고, 각 영역에서 형성되는 분자들의 운동 에너지 분포와 속도 분포에 대한 연구 결과를 발표한다^{10~14}. 또한, 얻어진 운동 에너지 분포를 이용하여 충격파 발생 시 충격파 내의 각 영역에 존재하는 분자들의 이온화 가능성에 대해 논의한다.

2. 모의실험 방법 및 이론

가. 비평형 분자동역학 모의실험

본 연구에서 사용되는 비평형 분자동역학 모의실험에 대한 설명은 참고 논문 [16]에 자세히 나와 있으므로 여기에서는 간략하게 소개하기로 한다. 분자의 운동 에너지 분포와 속도 분포를 얻기 위해 사용되는 모의실험 상자는 150 Å × 150 Å × 6500 Å의 크기를 가지며, 모의실험 상자 속에 총 48750개의 분자가 존재한다. 충격파를 발생시키기 위해 사용되는 피스톤은 모의실험 상자의 왼쪽 끝(z = -3250 Å)에 존재하며, 피스톤을 +z 방향으로 밀어서 충격파를 발생시킨다. 본 모의실험에서 사용하는 아르곤 분자의 Lennard-Jones 퍼텐셜 에너지에 대한 매개 변수는 다음 표에 주어진다.

Table 1. Lennard-Jones 퍼텐셜 에너지에 대한 매개 변수

	ϵ (kcal/mol)	σ (Å)
아르곤	2.381×10^2	3.405

본 모의실험에서 사용하는 아르곤 기체의 초기 밀도는 0.0221g/cm³이며, 비평형 분자동역학 모의실험 시간 동안 기체 상태를 유지한다. 모의실험의 초기 구성을 정한 후에 먼저 NVT 평형 분자동역학 모의실험을 100ps 동안 실행하여 아르곤 기체들이 충격파가 발생하기 전의 평형 상태에 도달하도록 한다. 본 평형 분자동역학 모의실험에서 사용한 시간 간격(time step)은 4fs이고, 200fs마다 velocity scaling 방법을 이용하여 평형 상태에서 온도를 298K로 일정하게 유지한다. 평형 상태에서 virial 정리를 이용하여 구한 압력은 13.8bar 이다¹⁷. 아르곤 기체들이 평형 상태에 도달한 후에 NVE 비평형 분자동역학 모의실험을 실행한다. 비평형 분자동역학 모의실험에서는 50ps 동안 피스톤을 +z 방향으로 6.5km/s의 속도로 밀면서 충격파를 발생시킨

다. 피스톤을 6.5km/s의 속도로 밀어 충격파를 발생시키는 경우에 충격파 내의 아르곤 분자의 속도가 매우 증가하기 때문에 평형 분자동역학 모의실험에서와 같이 큰 시간 간격을 사용할 수 없다. 본 비평형 분자동역학 모의실험에는 Newton 식을 안정적으로 적분하기 위하여 1fs의 시간 간격을 사용한다. 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 150ps이며, 처음 100ps 동안은 NVT 평형 분자동역학 모의실험을, 충격파가 발생하는 나중 50ps 동안은 NVE 비평형 분자동역학 모의실험을 실행하였다. 통계적으로 의미 있는 열역학 값들을 얻기 위하여 평형 분자동역학 모의실험에서 얻은 분자 구성 중 30개를 임의 추출하여 각 분자 구성에 대하여 비평형 분자동역학 모의실험을 실행하였고, 이를 평균하여 결과로 이용하였다.

3. 모의실험 결과 및 해석

가. 6.5km/s의 피스톤 속도에서 발생하는 충격파의 열역학 성질

피스톤의 속도가 6.5km/s일 때 발생하는 충격파의 속도를 구하기 위해 먼저 충격파가 발생한 후에 5ps마다 z 방향의 함수로 아르곤 분자의 밀도 분포를 계산하였다. Fig. 1은 충격파가 생성된 지 30ps 후부터 5ps 간격으로 얻어진 밀도분포 곡선을 보여준다. 밀도 분포 곡선이 5ps 동안 이동하는 거리를 측정하여 그로부터 충격파의 속도를 구할 수 있다. 즉, 충격파의 속도는 다음과 같이 주어진다.

$$\text{충격파 속도} = \frac{5\text{ps 동안 밀도분포 이동거리}}{5\text{ps}} \quad (1)$$

(1) 식을 이용하여 얻어진 충격파의 속도는 8.73km/s이며, 이는 고성능 화약 폭발 시의 폭발과 매우 유사함을 알 수 있다. 아르곤 기체 속을 통과하는 음파의 속도는 298K에서 0.322km/s로 주어지므로, 구한 충격파의 속도를 음파의 속도로 나누면 충격파 속도에 대한 마하수(M)도 얻을 수 있다. 이로부터 얻어진 마하수 $M = 27.1$ 이다.

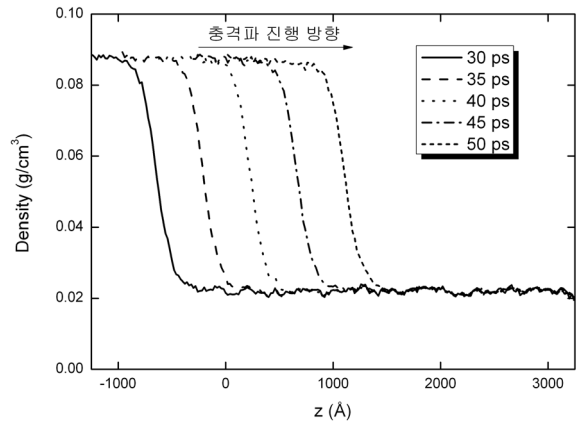


Fig. 1. 충격파가 생성된 지 30ps부터 5ps 간격으로 얻어진 밀도분포 곡선들.

충격파가 기체 속을 진행할 때 기체는 그 열역학 성질에 따라 Fig. 2와 같이 크게 세 부분으로 구분된다.

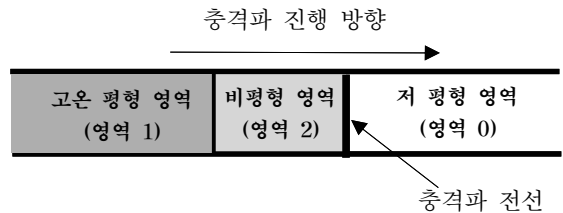


Fig. 2. 충격파 전선 전, 후면의 평형 영역들과 비평형 영역.

먼저 영역 0은 충격파가 진행하기 전의 저온 평형 영역이고, 영역 1은 충격파가 진행한 후에 형성되는 고온 평형 영역이며, 영역 2는 충격파 전선 바로 후면의 비평형 영역을 나타낸다. 비평형 분자동역학 모의실험을 이용하면 평형 영역인 영역 0과 영역 1에서의 밀도, 온도, 그리고 압력을 구할 수 있다. Table 2에 각각 비평형 분자동역학 모의실험과 충격파에 대한 이론인 Rankine-Hugoniot 식들^[4,15,16]을 이용하여 평형 영역인 영역 0과 영역 1에서 얻어진 밀도, 온도, 그리고 압력에 대한 비가 나와 있다. 얻어진 값들로부터 비평형 분자동역학 모의실험 결과가 Rankine-Hugoniot 식들로부터 얻어진 값들과 잘 일치함을 알 수 있다.

방향적 온도(directional temperature)는 각 분자의 속도 벡터를 구성하는 방향 성분의 표준 편차와 연관되어 있으며, 그 정의는 다음과 같다.

Table 2. M = 27.1인 경우에 비평형 분자 동역학 모의 실험과 Rankine-Hugoniot(RH) 식들로부터 얻어진 영역 0과 영역 1의 밀도(ρ), 온도(T), 그리고 압력(P) 비

	밀도 비 (ρ_1/ρ_0)	온도 비 (T_1/T_0)	압력 비 (P_1/P_0)
모의실험	3.94	224.86	890.31
RH 식	3.98	230.38	917.76

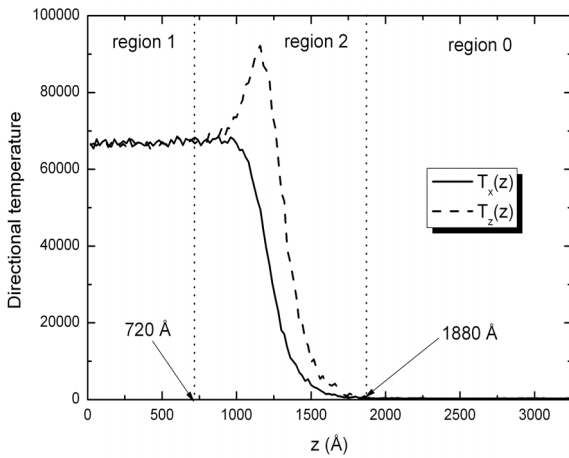


Fig. 3. 아르곤 기체에서 마하 수 27.1의 충격파가 발생한 지 50ps 후에 좌표 z의 함수로 나타낸 z 방향과 x 방향 속도 성분에 대한 방향적 온도 및 각 영역 사이의 경계

$$T_q(z) = \frac{1}{k_B} \sum_{j=1}^{N(z)} \frac{m_j (v_{qj}(z) - \langle v_{qj}(z) \rangle)^2}{N(z)} \quad (2)$$

위 식에서 q = x, y, 또는 z를 의미하며 $v_{qj}(z)$ 는 z 위치에서 j번째 아르곤 분자의 q 방향 속도 성분이다. N(z)는 z 위치에 있는 분자들의 수이며, m_j 와 k_B 는 각각 j번째 아르곤 분자의 질량과 Boltzmann 상수이다. Fig. 3은 아르곤 기체에서 충격파가 발생한 지 50ps 후에 형성되는 방향적 온도에 대한 계산 결과이다. 50ps 후에 피스톤의 위치는 z = 0 Å에 도달한다. 각 영역은 밀도 분포 곡선과 방향적 온도의 곡률 변화를 이용하여 구분할 수 있다. Fig. 3에 각 영역의 경계에 대한 z 좌표가 나와 있다. Fig. 3에서 모의실험 상자의 왼쪽 끝(z = 0 Å)부터 약 z = 720 Å까지는 온도가 일

정하게 유지되는 것으로 보아, 충격파가 지나간 후에 형성된 고온 평형 상태(영역 1)임을 알 수 있다. z = 720 Å부터 z = 1880 Å까지는 방향적 온도가 급격히 변하는 상태로 충격파 전선 바로 후면의 비평형 상태(영역 2)임을 알 수 있다. z = 1880 Å부터 오른쪽 끝(z = 3250 Å)까지는 충격파가 도달하지 않은 초기 저온 평형 상태(영역 0)로, 온도가 초기 온도인 298K를 유지하고 있음을 알 수 있다.

Fig. 3에서 $T_x(z)$ 는 $T_z(z)$ 와 달리 비평형 상태인 영역 2에서 고온 평형 영역에서의 값보다 큰 값을 갖는 봉우리가 형성되는 것을 알 수 있다. $T_x(z)$ 의 영역 2에서 형성되는 봉우리의 원인은 뒤의 속도 분포 곡선에서 논의하기로 한다.

나. 아르곤 기체의 운동 에너지 분포

이온화 에너지 이상의 운동 에너지를 갖는 분자 수를 각 영역 별로 알아보기 위해 비평형 분자 동역학 모의실험을 이용하여 아르곤 분자들의 운동 에너지 분포를 구하였다. Fig. 4는 속도가 8.73km/s(M = 27.1)인 충격파가 발생한 지 50ps 후에 전 영역과 각 영역으로부터 얻어진 아르곤 분자들의 운동 에너지 분포를 보여준다. 운동 에너지 분포를 이용하여 각 영역에서 이온화 에너지(I) 이상의 운동 에너지(E_k)를 갖는 아르곤 분자의 수를 구할 수 있고, 그 결과가 Table 3에 나와 있다.

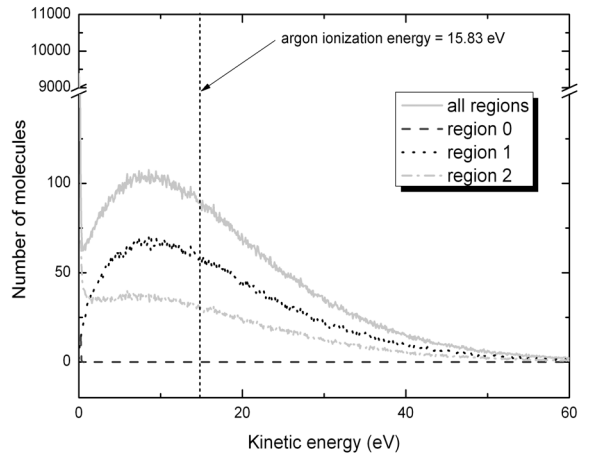


Fig. 4. 마하 수 27.1의 충격파가 발생한 지 50ps 후에 전 영역과 각 영역에서 구한 아르곤 분자들의 운동 에너지 분포와 아르곤 분자의 이온화 에너지

Table 3. 각 영역에서 얻어진 이온화 에너지(I) 이하와 이상의 운동 에너지(E_k)를 갖는 분자 수와 이온화 %

	영역 0	영역 1	영역 2	전영역
분자 수	10071	21209	17470	48750
$E_k < I$	10071	11306	12070	33447
$E_k \geq I$	0	9903	5400	15303
이온화 %	0	46.7	30.9	31.4

모의실험 결과는 모의실험 상자 내에 존재하는 분자들 중 약 31.4%의 분자들이 이온화 에너지 이상의 운동 에너지를 갖고 있음을 보여준다. 충격파 내에 존재하는 아르곤 분자 38679개 중에 이온화 에너지 이상의 운동 에너지를 갖는 분자의 수는 15303개로써, 약 39.6%의 아르곤 분자들이 이온화 에너지 이상의 운동 에너지를 가지고 있음을 알 수 있다. 이는 $M = 27.1$ 의 충격파가 가해진 후 50ps 후에 충격파 내에 존재하는 분자들 중 최대 39.6% 정도의 아르곤 분자들이 이온화 될 수 있음을 보여준다. 각 영역 별로 비교를 해보면 충격파가 지나간 후에 형성되는 고온 평형 영역인 영역 1에서는 약 46.7%의 분자들이 이온화가 가능하고, 충격파 전선 바로 후면의 비평형 영역인 영역 2에서는 약 30.9%의 분자들이 이온화가 가능함을 알 수 있다. 충격파가 도달하기 전의 영역인 영역 0에서는 이온화가 가능한 분자들이 존재하지 않는다.

다. 아르곤 기체의 속도 분포

비평형 분자 동역학 모의실험을 이용하면 아르곤 기체 각 영역에서 속도 분포를 구할 수 있다. Fig. 5는 $M = 27.1$ 의 충격파가 발생한 후 50ps에 전 영역과 각 영역에서 얻어진 분자들의 x 방향 속도 성분에 대한 분포를 보여준다.

Fig. 5로부터 x 방향 속도 성분은 모든 영역에서 좌우 대칭으로 분포하는 것을 알 수 있다. 충격파가 도달하기 전의 평형 상태인 영역 0에서 속도 분포는 $v_x = 0$ 주위에 밀집되어 있고, 충격파가 지나간 후에 형성되는 평형 상태인 영역 1에서의 속도 분포는 충격파에서 전달된 높은 운동 에너지에 의해 $v_x = 0$ 을 중심으로 좌우로 넓게 퍼져 있는 것을 알 수 있다. 평형 상태인 영역 0과 영역 1에서 속도 분포 $f_i(v_x)$ 는

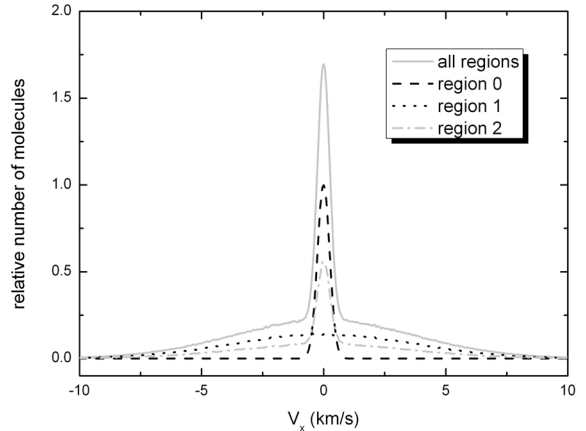


Fig. 5. 마하 수 27.1의 충격파가 발생한 지 50ps 후에 전 영역과 각 영역에서 구한 아르곤 분자들의 x 방향 속도 분포. 영역 0에서 최대값을 1.0으로 했을 때에 대한 상대적인 값들을 다른 영역에서의 값으로 정하였다.

Maxwell-Boltzmann 속도 분포식에 의해 다음과 같은 비례 관계가 성립한다.

$$f_i(v_x) \propto N_i \left(\frac{m_{Ar}}{2\pi k_B T_i} \right)^{1/2} e^{-mv_x^2/2k_B T_i} \quad (3)$$

위 식에서 영역을 의미하는 i 는 0 또는 1이며, N_i 는 영역 i 에서 분자 수, m_{Ar} 은 아르곤 분자의 질량, T_i 는 영역 i 에서 온도를 의미한다. 영역 0과 1에서 $v_x = 0$ 일 때 f_i 는 최대값을 갖고, 영역 0과 영역 1에서 최대값의 비는 (3) 식을 이용하여 다음과 같이 간단하게 나타낼 수 있다.

$$\frac{f_1(0)}{f_0(0)} = \frac{N_1}{N_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_1}} \quad (4)$$

Table 2와 Table 3의 값들을 (4) 식에 대입하면 두 평형 영역에서 속도 분포의 최대값의 비는 다음과 같이 구해진다.

$$\frac{f_1(0)}{f_0(0)} = \frac{21209}{10071} \sqrt{\frac{1}{224.86}} \approx 0.14 \quad (5)$$

Fig. 5로부터 얻어진 영역 0과 영역 1의 속도 분포

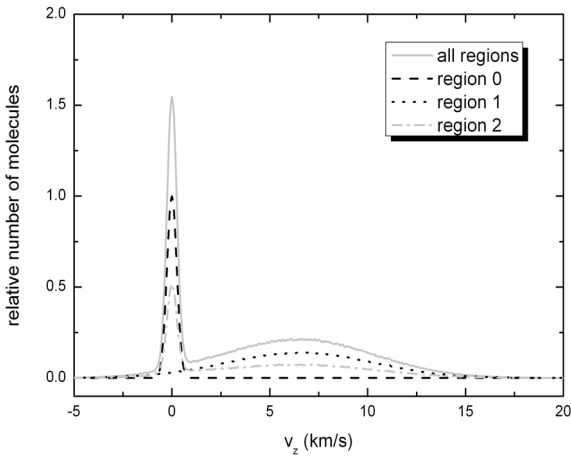


Fig. 6. 마하 수 27.1의 충격파가 발생한 지 50ps 후에 전 영역과 각 영역에서 구한 아르곤 분자들의 z 방향 속도 분포. 영역 0에서 최대값을 1.0으로 했을 때에 대한 상대적인 값들을 다른 영역에서의 값으로 정하였다.

의 최대값은 각각 1.00과 0.14이고, 이 두 값의 비 $0.14/1.00 = 0.14$ 로 (5) 식에서 얻은 값과 잘 일치함을 알 수 있다.

Fig. 6은 M=27.1의 충격파가 발생한 후 50ps에 전 영역과 각 영역에서 얻어진 분자들의 z 방향 속도 성분 에 대한 분포를 보여준다. 영역 0에서의 속도 분포는 v_x 의 속도 분포와 같이 $v_x = 0$ 을 중심으로 좌우 대칭임을 알 수 있다. 영역 1에서의 속도 분포는 피스톤의 속도인 $v_z = 6.5\text{km/s}$ 을 중심으로 좌우 대칭으로 분포되어 있음을 알 수 있다. 이는 z 방향으로 6.5km/s의 속도로 움직이는 피스톤과 충돌하는 분자에 피스톤의 운동량이 전달되기 때문이다. 영역 2에서 z 방향의 속도 분포는 $v_z = 0\text{km/s}$ 과 $v_z = 6.5\text{km/s}$ 두 값에서 봉우리를 갖는 비대칭 형태임을 알 수 있다. 이는 충격파 전선의 바로 후면에 위치한 영역 2에는 충격파의 영향을 아직 받지 않아 낮은 운동 에너지를 갖고 있는 분자들과 충격파의 영향을 받아 높은 운동 에너지를 갖고 있는 분자들이 혼재되어 있기 때문이다. 즉, 영역 2는 저온 평형 상태인 영역 0에서 바로 유입된 분자들과 고온 평형 상태인 영역 1로 이동할 분자들이 섞여 있는 비평형 상태임을 알 수 있다. 영역 2에서 비대칭 형태인 v_z 의 속도 분포는 z 방향의 방향적 온도 T_z 가 영역 2에서 큰 봉우리를 갖는 것을 설명한다(Fig. 3). 즉, (2) 식으로부터 방향적 온도는

속도들의 분산에 비례하고, 영역 2에서 분자들의 z 방향 속도 분포가 $v_z = 0\text{km/s}$ 과 $v_z = 6.5\text{km/s}$ 두 값을 중심으로 분포되어 있어 분산이 커지므로 T_z 도 커지게 된다. 반면에 x 방향 속도 성분은 영역 2에서 $v_x = 0$ 을 중심으로 좌우 대칭으로 분포되어 있으므로 분산이 작기 때문에 T_x 는 T_z 와 달리 봉우리를 형성하지 않는다.

4. 결론

본 논문에서는 비평형 분자동역학 모의실험을 이용하여 아르곤 기체와 같은 비활성 기체에 충격파가 진행할 때 나타나는 충격파 내의 분자들의 운동 에너지 분포와 속도 에너지 분포를 구하였다. 비평형 분자동역학 모의실험에서 폭발 시의 폭속과 유사한 8.73km/s 속도를 갖는 충격파를 발생시켰으며, 아르곤 분자들의 밀도 분포 곡선과 방향적 온도를 이용하여 저온 평형 영역, 고온 평형 영역, 그리고 비평형 영역을 구분하였다. 분자들의 운동 에너지와 이온화 에너지를 비교하여 충격파가 발생한지 50ps 후에 이온화가 가능한 분자들의 수를 구하였으며, 고온 평형 영역에서는 약 46.7%, 그리고 비평형 영역에서는 30.9%의 분자들이 이온화가 될 가능성이 있음을 알 수 있었다. 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 구한 x 방향 속도 성분은 모든 영역에서 $v_x = 0$ 을 중심으로 좌우 대칭으로 분포되어 있고, 평형 상태인 영역 0과 영역 1에서 Maxwell-Boltzmann 속도 분포식의 예측과 잘 일치하는 것을 알 수 있었다. z 방향 속도 성분은 x 방향 속도 성분과 달리 영역 1에서는 $v_z = 6.5\text{km/s}$ 중심으로 좌우 대칭으로 분포되어 있고, 이는 충격파를 발생시키기 위해 사용하는 피스톤의 속도 6.5km/s와 연관되어 있음을 알 수 있었다. 영역 2에서 z 방향 속도 성분은 $v_z = 0\text{km/s}$ 과 $v_z = 6.5\text{km/s}$ 두 값을 중심으로 비대칭으로 분포되어 있고, 이로 인해 z 방향의 방향적 온도인 T_z 가 영역 2에서 큰 값을 갖는 봉우리가 형성됨을 알 수 있었다.

아르곤 분자의 전자 구조와 비평형 분자동역학 모의실험으로부터 얻어진 아르곤 분자들의 운동 에너지 분포를 이용하여, 후속 연구에서는 분자들의 운동 에너지가 전자 에너지로 전달되어 들뜬 전자들이 더 낮은 에너지 준위로 전이할 때 발생할 수 있는 방출 스펙트럼의 파장과 세기를 연구하고자 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. Hurler, "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] 송태호, "천안함 어뢰 1번 글씨 부위 온도 계산", <http://htl.kaist.ac.kr/>
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] M. P. Allen and Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Clarendon, Oxford, 1987.
- [11] 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.
- [12] A. B. Belonoshko, "Atomic Simulation of Shock Wave-Induced Melting in Argon", *Science*, Vol. 275, No. 5302, pp. 955~957, 1997. 2.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] J. D. Lambert, "Vibrational and Rotational Relaxation in Gases", Clarendon Press, Oxford, 1977.
- [16] H. Hwang, C. H. Kwon, H. L. Kim, S. Kim, M. K. Park, "Development and Application of a Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation Method to Study Shock Waves Propagating in Argon Gas", *J. Kor. Inst. Mil. Sci. Technol.* Vol 13, pp. 156~163, 2010. 2.
- [17] J. P. Hansen and I. R. McDonald, "Theory of Simple Liquids", Academic Press Inc., London, 1986.