

DPD 기법을 이용한 EVA 점도 계산 및
입자 함량에 따른 점도 예측 모델구축

조형태, 박찬호, 정원복¹, 이근득², 박정수², 문 일†
연세대학교; ¹(주)한화 종합연구소; ²국방과학연구소
(htcho@yonsei.ac.kr†)

고폭 화약은 성능이 우수하면서도 무기 제조 및 보관을 위하여 외부 자극으로부터 둔감한 특성을 가져야 한다. 이런 상반된 두 가지 특성을 만족하고자 여러 연구가 수행중이다. 나노 수준의 RDX결정은 넓은 표면적으로 인하여 표면 에너지가 크기 때문에 고분자 코팅 과정이 필요하다. 따라서 EVA (ethylene vinylacetate) 고분자를 이용한 RDX 입자 코팅 공정 모델 개발 연구가 진행 중이며, 공정 모델링에 필요한 고분자의 점도 또는 고분자와 particle 혼합물의 점도 계산 후 모델을 구축하여 공정 모델링에 적용 하고자 한다. 본 연구에서는 굵은 입자 모델을 이용하는 중규모 동역학 (coarse-grained dynamics, CGD) simulation과 소산성 입자 동역학 (dissipative particle dynamics, DPD) simulation을 통하여 EVA 고분자의 점도를 계산하였다. DPD는 분자들을 CGD단위체로 슈퍼입자(구슬, bead) 모델화하여 상호작용 간소화를 통해 MD의 시공간을 마이크로 수준까지 비약적으로 증대한 방법으로 고분자 점도 계산이 가능하다. 이를 통하여 실험으로 측정이 어렵고 신뢰성이 떨어지는 범위에서의 점도를 계산하였고, 입자 함량에 따른 점도 모델을 구축하였다.
감사의 글: 본 연구는 (주)한화와 국방과학연구소의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사 드립니다. (계약번호: UC120019GD)