

## 지구 저궤도 및 준저궤도 환경에서의 폴리이미드 기반 열보호 복합재료의 삭마특성 예측

전인석\* · 양승화\*\*†

### Prediction of Ablation Properties of Polyimide Based Thermal Protective Composites under LEO and sub-LEO Environment

Inseok Jeon\*, Seunghwa Yang\*\*†

**ABSTRACT:** This paper predicted the ablation properties of materials with the reactive molecular dynamics under LEO and sub-LEO environment, the extreme environment. AO and N<sub>2</sub> which are the atmospheric particles under LEO and sub-LEO environment were considered, and evaluated the ablation behavior of kapton and kapton-CNT composite under 3 kinds of particle bombardment (AO, AO+N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) considering the 200 km attitude. The AO and N<sub>2</sub> had different ablation mechanism, and N<sub>2</sub> also affected on the ablation of materials as much as AO. Additionally, AO and N<sub>2</sub> independently maintained their own ablation mechanism under mixed environment. Also, this paper predicted that adding the CNT to kapton can decreased the heating ratio and damage of materials by particles collision, and checked the validity of the ablation properties prediction method under LEO and sub-LEO environment through comparison with the experiment results from NASA.

**초 록:** 본 연구에서는 극한 환경인 지구 저궤도/준저궤도 환경에 노출된 열보호 복합재료의 삭마특성을 반응적 분자동역학을 적용한 입자 충돌 전산모사를 통해 예측하였다. 지구 저궤도와 준저궤도에 분포하는 대기 입자 중 원자 산소와 질소 분자를 고려하였으며, 고도 200 km 근방에서의 대기 구성비를 참조하여 총 세가지의 입자 충돌 상황(원자 산소, 질소 분자, 원자 산소와 질소 분자 혼합)에서의 Kapton 폴리이미드와 Kapton-탄소나노튜브 복합재의 삭마 거동을 모사하였다. 원자 산소와 질소 분자는 서로 다른 삭마 메커니즘을 보이는 것으로 나타났고, 특히 질소 분자의 경우 원자 산소에 못지않는 심각한 표면 침식을 유발하였다. 또한, 질소 분자와 원자 산소가 서로 혼합되어 충돌하는 경우에도 각 입자에 의한 독자적인 삭마 메커니즘이 유지되면서 표면 손상이 진행되는 것으로 나타났다. 본 연구를 통해 Kapton 내에 첨가된 탄소나노튜브가 저궤도 환경에서의 입자 충돌 시 열보호 소재의 온도 상승과 손상을 유의미하게 저하시키는 역할을 하는 것을 알 수 있었으며, 실제 NASA에서 수행된 우주환경 실험결과와의 비교를 통해 본 연구에서 수행된 지구 저궤도 및 준저궤도 환경에서의 삭마특성 예측법의 유효성 또한 확인하였다.

**Key Words:** 탄소나노튜브(Carbon nano tube), 삭마(Ablation), 원자 산소(AO), 지구저궤도(Low Earth Orbit)

Received 26 November 2024, received in revised form 17 December 2024, accepted 19 December 2024

\*Chung-ang University, The School of Energy System Engineering

\*\*Chung-ang University, The Department of Energy System Engineering

†Corresponding author (E-mail: [fafala@cau.ac.kr](mailto:fafala@cau.ac.kr))

## 1. 서 론

지구 저궤도(LEO) 및 준저궤도에서 운용되는 인공위성체는 매우 빠른 속도로 비행하기 때문에, 대기를 구성하는 입자(대기 입자, 우주 쓰레기 등)들과의 충돌로 인한 심각한 표면 손상이 야기된다. 특히, 고도가 300 Km 이하인 지구 저궤도/준저궤도 구간에서는 대기 입자와의 충돌이 위성체 소재 표면 손상의 주된 원인이며, 장시간 비행 시 열보호 소재(TPM, Thermal Protective Material)의 표면은 대기 입자와의 충돌로 인해 열분해 및 절삭되어 손상된다[1-6]. 이와 같이, 직접적인 입자의 충돌에 의해 소재가 손상되는 삭마(Ablation) 현상은 인공위성체의 내구성과 수명에 큰 영향을 미치게 된다. 따라서, 재료의 정확한 삭마특성 예측 기술은 우주용 소재 설계와 개발 분야에 있어 매우 중요한 기반 기술이라 할 수 있다. 뿐만 아니라, 열보호 소재의 정확한 수명 예측을 가능하게 하는 기술은 우주 산업의 발전에 따라 불가피하게 발생하고 있는 지구 저궤도 내 우주 쓰레기 과잉으로 인한 케슬러 신드롬(Kessler syndrome)을 조금이나마 완화시킬 수 있는 기술이라는 측면에서 큰 의미를 가지고 있다.

재료의 삭마특성은 미국 항공 우주국(NASA)의 MISSE (Materials International Space Station Experiment) 프로젝트 [7,8]와 같이 지구 저궤도 및 준저궤도 환경에 재료를 직접 노출시키는 실험이 이상적인 방법이다. 그러나 소수의 특정국가를 제외하고는 실제 지구궤도에서의 실험이 용이하지 않으며, 궤도환경 모사장치를 이용한 실험의 경우에도 많은 비용과 시간소모가 불가피하다. 이러한 문제점을 극복하기 위한 대안으로 최근 반응적 분자동역학 전산모사를 통한 재료의 삭마특성 예측이 활발히 진행되어 왔다. 2014년 A. Rahnamound[9] 박사의 연구를 시작으로 하여, 우주 소재로 다양하게 활용되고 있는 실리카, Kapton 폴리이미드, POSS 나노입자, 테프론 등에 대한 삭마특성이 반응적 분자동역학 전산모사를 통해 연구되기 시작했다[9-11]. 이 후, 항공우주용 복합재에 다양하게 적용되고 있는 에폭시[12]에 대한 원자 산소 충돌 전산모사를 비롯해, 대표적인 나노카본 구조체인 탄소나노튜브와 그래핀[13-15] 등의 삭마특성을 예측하는 연구가 수행되어 왔다. 또한, 원자 산소 충돌에 대한 금속 재료 및 결정질 재료의 삭마현상 역시 유사한 해석방법의 적용을 통해 연구되어 왔다[16,17]. 그러나, 선행된 모든 연구에서는 원자 산소(AO, Atomic Oxygen)의 충돌만을 고려하였으나, 실제 고도 200 Km 근방에서는 질소 또한 원자 산소 못지 않은 양이 분포한다. 본 연구그룹은 선행연구를 통해 질소 분자 역시 원자 산소와 유사한 수준의 손상을 야기시킴을 보고한 바 있다[18]. 특히, 반응성이 높은 원자 산소가 ‘화학적 삭마’를 일으키는 것과는 달리, 질소 분자는 안정적인 3중결합구조를 그대로 유지하면서 물리적인 충격력을 가해 재료의 표면을 손상

시키는 ‘물리적 삭마’를 유발하는 것으로 확인된 바 있다.

본 논문에서는 대표적인 폴리이미드인 Kapton과 탄소나노튜브로 강화된 Kapton-탄소나노튜브 복합재료에 대해, 원자 산소 및 질소 분자, 그리고 200 Km 고도에서의 대기 구성과 유사한 조건인 원자 산소와 질소 분자가 1:1 비율로 충돌하는 과정에 대한 전산모사를 수행하였으며, 지구 저궤도 환경에서의 Kapton과 복합재료의 삭마특성을 예측해 실제 NASA에서 수행된 MISSE 프로젝트 결과와 비교하였다.

## 2. 본 론

### 2.1 입자 충돌 전산모사 기법

본 연구에서는 세 가지의 기체 충돌 상황에서의 삭마특성을 예측하기 위해 대표적인 폴리이미드인 Kapton을 선정하였으며, 입자 충돌 전산모사를 수행하기 위하여 표면이 존재하는 Slab 형태로 모델링하였다. Kapton은 10개의 단량체로 구성된 사슬 12개로 구성하였으며, 복합재의 경우 Kapton에 총 9개의 탄소나노튜브가 랜덤분포하도록 모델링하였다. 이 후, 다이아몬드 기판(Substrate)을 Kapton 및 복합재의 하부에 강체 기저재로 부착하여 입자 충돌 전산모사 시 Kapton 및 복합재의 병진 운동(Translational Motion)을 방지하였다. 위의 과정을 통해 최종적으로 모델링된 Kapton과 복합재의 Slab 구조에 대한 정보는 Table 1과 Fig. 1에 정리하였으며, 모든 모델링은 Material Studio 2018[19]에서 PCFF(Polymer Consistent Force Field)[20]를 사용하여 수행하였다.

모델링된 Slab 구조는 이후 SCM 사의 분자모델링 소프트웨어인 AMS(Amsterdam Modeling Suite)[21]와 ReaxFF을 [22]활용하여 구조안정화 과정을 거쳤다. Slab 구조의 상온 평형화 과정은 NVT ensemble(Canonical Ensemble)을 통해

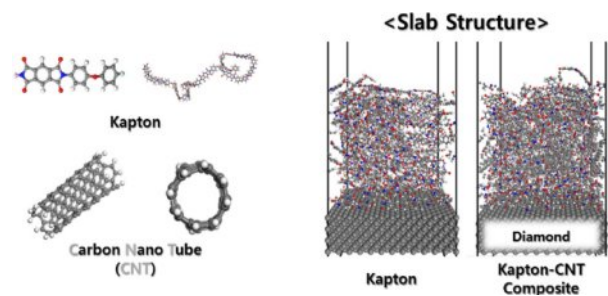


Fig. 1. Molecular model of Kapton, CNT and slab structure

Table 1. Information of slab structure

	Length [Å] (x-axis)	Length [Å] (y-axis)	Area [Å <sup>2</sup> ]
Kapton	42.672	42.672	1,820.9
Kapton-CNT Composite	42.672	42.672	1,820.9

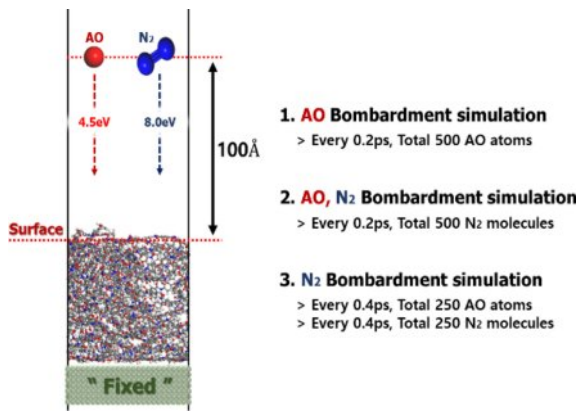


Fig. 2. Condition of bombardment simulation

진행하였으며, Nosé-Hoover thermostat을 통해 300 K의 온도에서 평형상태에 이르도록 했다. 이후, 안정화된 Slab 구조에 대해 원자 산소, 질소 분자, 그리고 원자 산소와 질소 분자가 혼합된 세 가지 종류의 충돌 전산모사를 수행하였다. 이 때, 전산모사에서 활용된 조건들은 Fig. 2에 정리하였다. 충돌 전산모사는 100 ps 동안 0.2 ps 간격으로 총 500 개의 입자가 충돌되도록 하였으며, 충돌에 따른 소재표면 온도 상승을 모사하기 위해 NVE 앙상블(Micro-canonical Ensemble)을 적용하였다. 반응적 분자동역학 전산모사 수행 시의 해석 결과는 시간 적분을 위한 시간 스텝의 크기에 따라 크게 달라지는 것으로 알려져 있으며, 본 연구에서는 선행연구의 결과[23]를 바탕으로 시간 스텝을 0.1펨토초로 설정하였다. 세가지의 기체 충돌 상황을 모사하기 위해 Slab의 표면으로부터 100 Å 높이에서 원자 산소와 질소 분자가 각각 4.5 eV와 8.0 eV의 운동에너지를 가지고 표면에 충돌하도록 하였으며, 이는 인공위성체의 실제 비행속도인 7.4 km/h에 해당한다. 입자 충돌 전산모사는 각각의 경우에 대해 3번씩 수행하여 평균값을 도출하였다.

### 3. 결 과

Kapton과 복합재에 대한 입자 충돌 전산모사의 결과로 도출된 시뮬레이션 시간-시스템 온도 그래프는 Fig. 3에 정리하였다. 입자 충돌에 따른 재료의 안정성을 평가하기 위하여 온도-시뮬레이션 시간 그래프를 선형근사하였으며, 본 연구에서는 선형 근사 된 그래프의 기울기를 입자 충돌에 의한 온도 상승률로 정의하였다. 그 결과, 모든 경우의 입자 충돌 상황에서 Kapton-탄소나노튜브 복합재가 Kapton에 비해 더 완만한 온도변화를 보이면서 더 낮은 온도상승률을 보였다. 시스템의 온도는 충돌하는 입자의 온도와 더불어 Kapton과 탄소나노튜브에서 생성된 반응물의 온도 또한 포함하고 있다. 따라서 보다 높은 온도상승률을 보인다는 것은 입자 충돌로 인해 표면에서 분리되어 나온 저분자 반응물들이 보다 많이 생성되었기 때문이며, 이로부터 Kapton

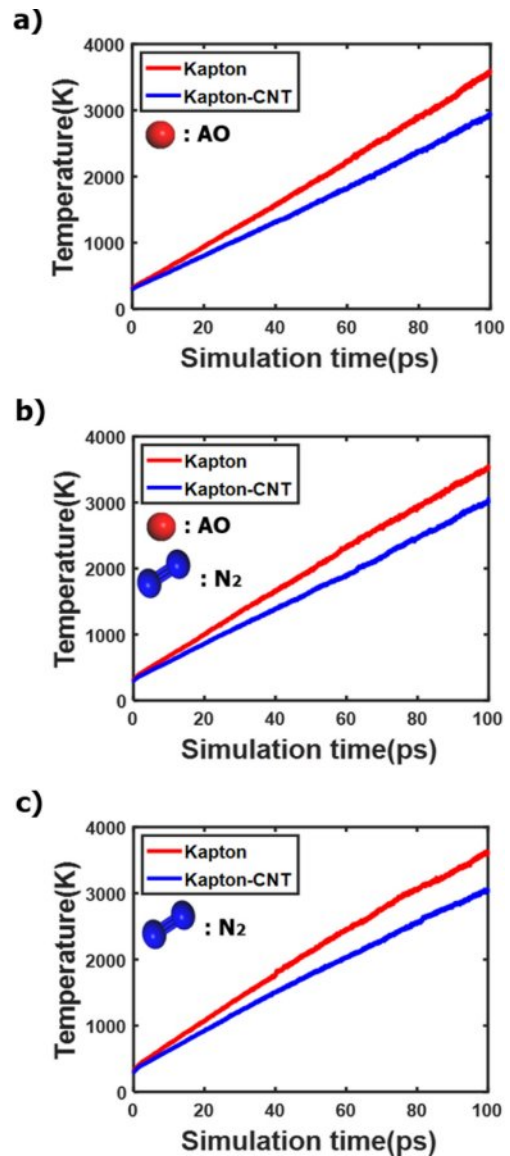


Fig. 3. Temperature changing during a) AO, b) AO + N2, c) N2 bombardment simulation

내에 탄소나노튜브가 첨가될 경우, 입자 충돌에 의한 열분해와 삭마특성이 개선될 수 있음을 알 수 있다.

입자 충돌 전산모사로부터 도출된 반응 생성물에 대한 정보는 각각의 충돌해석에 대해 Fig. 4와 Fig. 5에 그래프로 정리하였다. 모든 입자 충돌 전산모사에서 일산화탄소(CO)가 가장 많이 생성 되었으며, 다른 9가지의 분자들은 서로 비슷한 종류로 이루어진 것을 확인하였다. 또한, 일산화탄소는 원자 산소 단독 충돌, 원자 산소와 질소 분자 혼합 충돌, 질소 분자 단독 충돌 순으로 많이 생성되었다. 이는 반응성이 큰 원자 산소가 Kapton의 뼈대를 형성하는 탄소와 반응하여 Kapton 내 탄소-탄소 결합을 끊으며 일산화탄소를 형성하기 때문이다. 원자 산소와 질소 분자의 충돌 시, 각 입자가 화학반응에 참여하는지 확인하기 위하여 입자

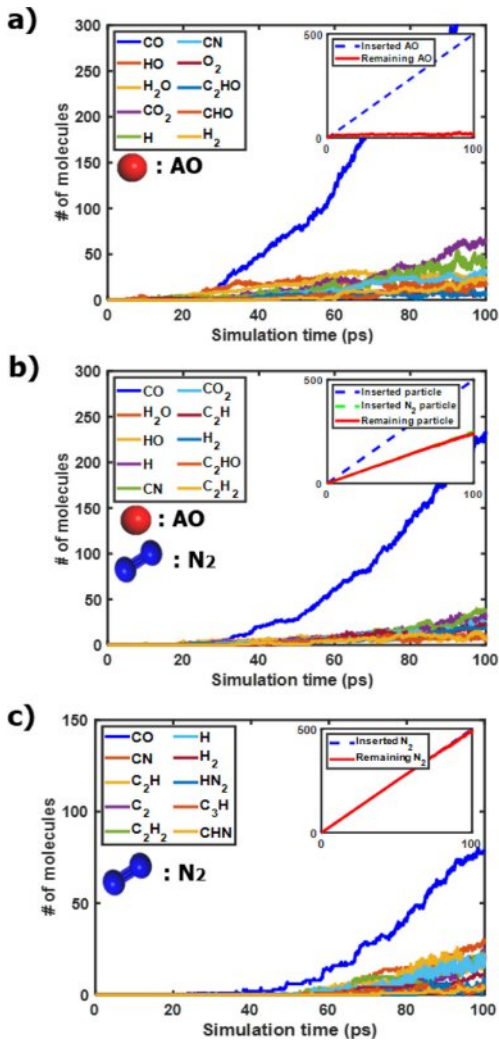


Fig. 4. Products a) AO, b) AO + N<sub>2</sub>, c) N<sub>2</sub> during bombardment simulation (Kapton)

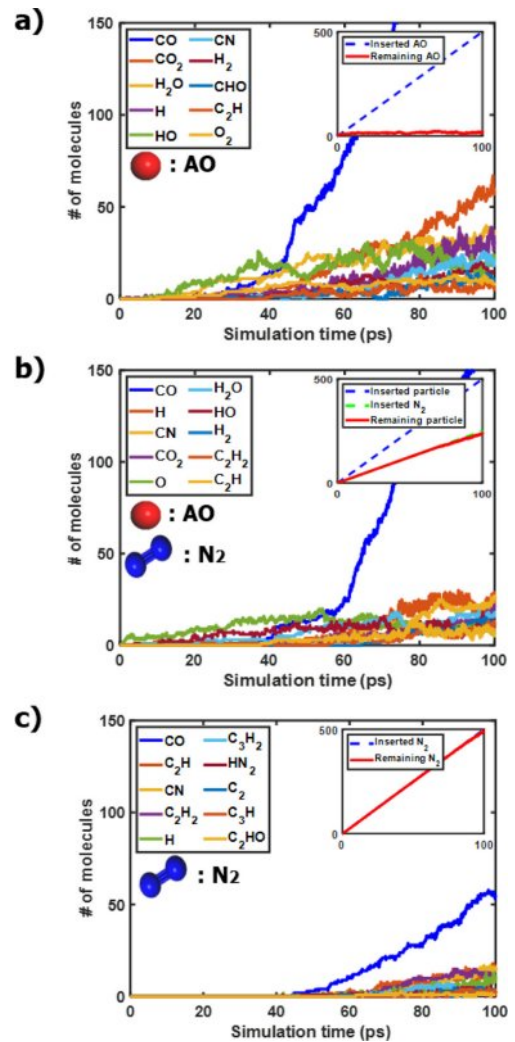


Fig. 5. Products a) AO, b) AO + N<sub>2</sub>, c) N<sub>2</sub> during bombardment simulation (Kapton-CNT composite)

충돌 전산모사 간 시스템 내의 입자 수 변화를 추가로 분석하여 Fig. 4와 Fig. 5에 내부 그래프(Sub-plot)로 도시화하였다. 내부 그래프에서 점선은 전산모사 동안 충돌 시킨 입자 수를 의미하며, 실선은 전산모사 과정 동안 남아있는 입자의 수를 의미한다. 원자 산소 충돌 전산모사에서는 대부분의 원자 산소가 화학적 반응에 참여하기 때문에, 전산모사가 완료된 이후 매우 적은 양만이 시스템 내에 잔존했다.

반면, 질소 분자는 대부분의 분자가 입자 충돌 전산모사가 진행되는 동안 시스템 내에 그 형태를 유지하면서 존재하며, 이는 질소 분자가 Kapton과 반응적 거동을 보이지 않음을 의미한다. 원자 산소와 질소 분자가 혼합되어 충돌되는 상황 역시 대부분의 원자 산소가 화학적 반응에 참여한 반면, 산소와 함께 충돌시킨 질소 분자는 화학적 반응에 참여하지 않았다. 이는 원자 산소와 질소 분자가 혼합되어 충돌되더라도 각 입자 별 충돌 메커니즘은 변화가 없음을 의미한다. 또한, Fig. 4와 Fig. 5으로부터 Kapton에 탄소나노튜브

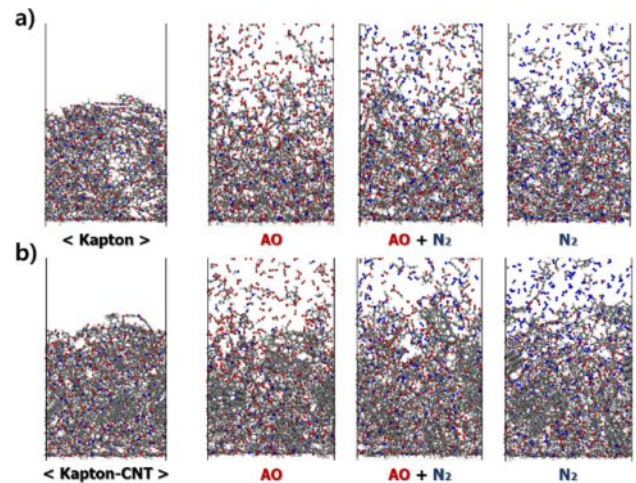


Fig. 6. Initial/Final structure for bombardment simulation a) Kapton, b) Kapton-CNT composite

브가 첨가 되더라도 충돌로 인해 생성된 생성물이 비슷한 것을 확인하였으며, 이는 복합재를 구성하는 Kapton에서 주로 삭마가 일어남을 의미한다.

각각의 입자 충돌 전산모사 종료 후의 분자구조를 초기 구조와 비교하여 Fig. 6에 정리하였다. 모든 경우에 있어 Kapton과 복합재는 상당한 수준으로 삭마가 진행되며, 표면에 있는 원자들이 분해되면서 다수의 반응생성물이 표면에 존재함을 알 수 있다. 그러나, 충돌 전/후의 구조만을 비교해서는 Kapton과 Kapton-탄소나노튜브 복합재 중 어떤 재료에서 삭마가 보다 많이 진행되었는지 알 수 없다. 따라서, 본 연구에서는 삭마 정도를 정량화하기 위해 삭마과정에 따른 재료 표면의 위치를 정의하여 표면 침식량을 분석하였다. 재료의 표면을 정의하는 방법은 선행된 연구의 방법을 활용하였으며[18], 각각의 충돌 전산모사에서 해당 표면을 기준으로 Kapton과 복합재의 삭마 정도를 도출하였다. 본 연구에서는 Kapton과 복합재의 삭마특성 평가를 위한 척도로 침식 속도를 예측하여 비교하였다. 각 구조의 침식 속도는 충돌 시뮬레이션에 따른 침식 깊이(표면의 높이 변화) 그래프를 선형근사하여 도출하였으며 이는 Fig. 7에 설명되어 있다. 고려한 세가지의 기체 충돌 상황에 따른 Kapton과 복합재의 침식 속도는 Table 2에 정리하여 나타내었다. 모든 충돌 상황에서 복합재는 Kapton에 비해 완화된 삭마 및 열분해 특성을 보이는 것으로 나타났다. 입자 충돌 전산모사 결과, Kapton에 탄소나노튜브를 첨가할 시 기체 입자 충돌에 의한 침식 속도가 약 45% 정도 감소하였으며, Kapton과 복합재는 세가지 충돌 상황에서 모두 비슷한 속

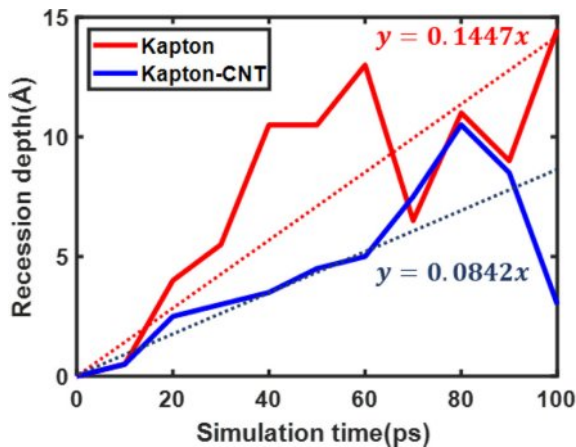


Fig. 7. Definition of recession rate during bombardment simulation

Table 2. Recession rate under bombardment simulation [Å/ps]

	AO	AO + N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
Kapton	0.1404	0.1378	0.1363
Kapton-CNT	0.0766	0.0759	0.0757

Table 3. Recession rate under bombardment simulation

	Flux [atom/cm <sup>2</sup> sec]	Recession rate [cm/sec]	Modified Recession rate [cm/sec]
Kapton (Simulation)	2.746 × 10 <sup>25</sup>	1.337 × 10 <sup>3</sup>	4.868 × 10 <sup>-9</sup> (24,740 min)
Polyimide (MISSE-6)	~1.00 × 10 <sup>14</sup>	~6.25 × 10 <sup>-9</sup> (~20,000 min for 75.9 μm)	

도로 침식되었다. 질소 분자의 비율이 증가함에 따라, 침식되는 속도가 감소하는 것으로 보이나 이는 유의미한 차이로는 보이지 않는다. 이로부터 질소 분자도 원자 산소와 비슷한 수준으로 재료의 손상을 야기시키며, 더 나아가, 원자 산소와 질소 분자는 서로 독자적으로 재료의 삭마에 영향을 미친다는 것을 확인하였다. 따라서, 똑같은 주기 및 횟수의 원자 산소와 질소 분자 충돌은 그 비율과는 상관없이 비슷한 속도로 재료를 손상시킬 것으로 예상된다.

마지막으로 반응적 분자동역학을 적용한 입자 충돌 전산모사 기법을 통해 예측된 Kapton의 침식속도를 실제 NASA의 MISSE-6 project 결과[6]와 비교해 보았다. 본 연구에서 수행된 입자 충돌 전산모사는 실제 시간과의 스케일 차이로 인해 매우 큰 입자 충돌 선속(Flux)을 가지도록 수행되었다. 이에 따라 실험 결과와의 비교를 위해 선속을 선형 근사하여 보정하였다. 입자 충돌 전산모사와 MISSE-6 실험에서의 충돌 입자 선속 및 침식 속도는 Table 3에 정리하였다. 보정된 침식속도는 실제 MISSE project와 유사한 속도로 도출되며, 일정 깊이 75.9 μm가 침식되는데 걸리는 시간도 유사하였다. 이로부터 본 연구에서 수행한 기체 충돌 전산모사가 지구 저궤도 및 준저궤도 환경에서의 재료 삭마 특성 예측에 있어 매우 효과적인 가상실험방법으로 적용될 수 있음을 의미한다. 또한 새로운 열보호 소재 개발 시 실험적 검증에 앞서 새롭게 설계된 고분자의 구조가 어느 정도의 삭마특성 개선을 가져올 수 있는지를 선제적으로 예측할 수 있기 때문에, 우주용 소재개발 비용과 시간을 혁신적으로 단축할 수 있을 것으로 기대된다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 반응적 분자동역학 전산모사를 통한 입자 충돌 전산모사기법을 통해 지구 저궤도 및 준저궤도 환경 내에서 Kapton과 Kapton-탄소나노튜브 복합재의 삭마 특성을 예측하였다. 입자 충돌 상황은 지구 저궤도 및 준저궤도에 분포하는 원자 산소, 질소 분자를 고려하여 세가지의 충돌 상황을 설정하였으며, 각 입자 충돌 상황에 따른 Kapton과 복합재의 삭마거동을 분석하였으며 그 결과 다음과 같다.

1) 원자 산소와 질소 분자 각각의 충돌은 서로 다른 메커니즘을 통해 재료의 삭마를 야기시키나, 충돌로 인한 재료

의 손상 정도는 매우 유사한 수준이었다.

2) 원자 산소와 질소 분자가 혼합된 충돌 상황에서도 원자 산소와 질소 분자는 독자적인 삭마 메커니즘을 유지하며 재료를 손상시켰다.

3) Kapton 내 탄소나노튜브의 첨가는 원자 산소와 질소 분자와의 충돌로 인한 온도 상승을 저하시킬 뿐만 아니라, Kapton의 질량손실 등과 같은 손상을 완화시킬 수 있었다. 특히, 첨가된 탄소나노튜브는 Kapton 내 뼈대의 결합이 입자 충돌로 인해 해리되는 것을 방지하기 때문에 내구성을 향상시킴을 알 수 있었다.

본 연구에서 수행된 반응적 분자동역학 전산모사는 실제에 비해 매우 작은 시간스케일에서 수행되었음에도 불구하고, 선형근사를 통해 예측된 Kapton의 침식 속도는 실제 NASA에서 수행된 MISSE-6의 폴리이미드 결과와 매우 유사하였다. 따라서, 앞으로의 우주항공분야 열보호 소재 설계에 있어 반응적 분자동역학을 적용한 삭마특성 예측 기법을 충분히 활용할 수 있을 것이라 사료된다. 또한, 본 연구에서는 지구 저궤도 및 준저궤도 환경에서 열보호 소재가 대기 입자와 충돌하는 가장 간단한 모델을 활용되어 수행된 점을 감안하여, 앞으로 실제 인공위성이 지구 저궤도/준 저궤도 환경에서 손상되는 메커니즘을 구체화하여 전산모사 기법으로 구현한다면 보다 정확성이 높은 예측 기법을 정립 할 수 있을 것이라 사료된다.

## 후 기

본 연구는 한국수력원자력(주)에서 재원을 부담하여 수행한 연구결과입니다(No. 23-Tech-04). 그리고 양영재단에서 지원한 연구비로 수행된 것이며, 지원에 대해 진심으로 감사드립니다.

## REFERENCES

- Reddy, M.R., "Effect of Low Earth Orbit Atomic Oxygen on Spacecraft Materials," *Journal of Materials Science*, Vol. 30, 1995, pp. 281-307.
- Hansen, R.H., Pascale, J.V., De Benedictis, T., and Rentzepis, P.M., "Effect of Atomic Oxygen On Polymers," *Journal of Polymer Science Part A: General Papers*, Vol. 3, No. 6, 1965, pp. 2205-2214.
- Minton, T.K., Wright, M.E., Tomczak, S.J., Marquez, S.A., Shen, L., Brunsvold, A.L., Cooper, R., Zhang, J., Vij, V., Guenther, A.J., and Petteys, B.J., "Atomic Oxygen Effects on POSS Polyimides in Low Earth Orbit," *ACS Applied Materials & Interfaces*, Vol. 4, No. 2, 2012, pp. 492-502.
- Verker, R., Grossman, E., and Eliaz, N., "Erosion of POSS-polyimide Films under Hypervelocity Impact and Atomic Oxygen: The Role of Mechanical Properties at Elevated Temperatures," *Acta Materialia*, Vol. 57, No. 4, 2009, pp. 1112-1119.
- Yokota, K., Tagawa, M., Fujimoto, Y., Ide, W., Kimoto, Y., Tsuchiya, Y., Goto, A., Yukumatsu, K., Miyazaki, E., and Imamura, S., "Effect of Simultaneous N<sub>2</sub> Collisions on Atomic Oxygen-induced Polyimide Erosion in Sub-low Earth Orbit: Comparison of Laboratory and SLATS Data," *CEAS Space Journal*, Vol. 13, 2021, pp. 389-397.
- Kumar, S.K.S., Ankem, V.A., Kim, Y.H., Choi, C., and Kim, G.G., "Polybenzimidazole (PBI) Coated CFRP Composites as a Front Bumper Shield for Hypervelocity Impact Resistance in Low Earth Orbit(LEO) Environment," *Composites Research*, Vol. 31, No. 3, 2018, pp. 83-87.
- de Groh, K.K., Banks, B., Guo, A., Ashmead, C.C., Mitchell, G. G., and Yi, G.T., "MISSE 6 Polymers Atomic Oxygen Erosion Data," *National Space & Missile Materials Symposium (NSMMS)*, 2010.
- De Groh, Kim K., and Bruce A. Banks, *Atomic Oxygen Erosion Data from the MISSE 2-8 Missions*. No. NASA/TM—2019-219982, 2019.
- Rahnamoun, A., and Van Duin, A.C.T., "Reactive Molecular Dynamics Simulation on the Disintegration of Kapton, POSS Polyimide, Amorphous Silica, and Teflon During Atomic Oxygen Impact Using the ReaxFF Reactive Force-field Method," *The Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 118, No. 15, 2014, pp. 2780-2787.
- Zeng, F., Peng, C., Liu, Y., and Qu, J., "Reactive Molecular Dynamics Simulations on the Disintegration of PVDF, FP-POSS, and Their Composite during Atomic Oxygen Impact," *The Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 119, No. 30, 2015, pp. 8359-8368.
- Jung, J., An, J., Kwon, S., and Yun, G.J., "Erosion Simulations and Quantification of the Temperature Effect by Atomic Oxygen on Polymer Matrix," *Composites Research*, Vol. 37, No. 5, 2024, pp. 426-421.
- Ashraf, C., Vashisth, A., Bakis, C.E., and Van Duin, A.C., "Reactive Molecular Dynamics Simulations of the Atomic Oxygen Impact on Epoxies with Different Chemistries," *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 123, No. 24, 2019, pp. 15145-15156.
- Rahmani, F., Nouranian, S., Li, X., and Al-Ostaz, A., "Reactive Molecular Simulation of the Damage Mitigation Efficacy of POSS-, Graphene-, and Carbon Nanotube-loaded Polyimide Coatings Exposed to Atomic Oxygen Bombardment," *ACS Applied Materials & Interfaces*, Vol. 9, No. 14, 2017, pp. 12802-12811.
- Cui, Z., Zhao, J., He, L., Jin, H., Zhang, J., and Wen, D., "A Reactive Molecular Dynamics Study of Hyperthermal Atomic Oxygen Erosion Mechanisms for Graphene Sheets," *Physics of Fluids*, Vol. 32, No. 11, 2020, 112110.
- Goverapet Srinivasan, S., and van Duin, A.C., "Molecular-dynamics-based Study of the Collisions of Hyperthermal Atomic Oxygen with Graphene Using the ReaxFF Reactive Force Field," *The Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 115, No. 46, 2011, pp. 13269-13280.
- Cui, Z., Zhao, J., Yao, G., Li, Z., and Wen, D., "Molecular Insight of the Interface Evolution of Silicon Carbide under Hyperther-

- mal Atomic Oxygen Impact,” *Physics of Fluids*, Vol. 34, No. 5. 052101, 2022.
17. Morrissey, L.S., Rahnamoun, A., and Nakhla, S., “The Effect of Atomic Oxygen Flux and Impact Energy on the Damage of Spacecraft Metals,” *Advances in Space Research*, Vol. 66, No. 6, 2020, pp. 1495-1506.
  18. Jeon, I., Lee, S., and Yang, S., “Hyperthermal Erosion of Thermal Protection Nanocomposites under Atomic Oxygen and N<sub>2</sub> Bombardment,” *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 240, 2023, 107910.
  19. BIOVIA, Dassault Systèmes. Materials Studio. R2 (Dassault Systèmes BIOVIA, San Diego, 2017.
  20. Sun, H., Mumby, S.J., Maple, J.R., and Hagler, A.T., “An ab Initio CFF93 all-atom Force Field for Polycarbonates,” *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 116, No. 7, 1994, pp. 2978-2987. (PCFF)
  21. Amsterdam Density Functional, Scientific Computing & Modelling, <http://www.scm.com>.
  22. Lele, A., Krstic, P., and Van Duin, A.C., “ReaxFF Force Field Development for Gas-phase hBN Nanostructure Synthesis,” *The Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 126, No. 4, 2022, pp. 568-582.
  23. Evans, D.J., and Holian, B.L., “The Nose-hoover Thermostat,” *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 83, No. 8, 1985, pp. 4069-4074.
  24. Jensen, B.D., Wise, K.E., and Odegard, G.M.. “The Effect of Time Step, Thermostat, and Strain Rate on ReaxFF Simulations of Mechanical Failure in Diamond, Graphene, and Carbon Nanotube,” *Journal of Computational Chemistry*, Vol. 36, No. 21, 2015, pp. 1587-1596.