

분자 모형설계(molecular modeling) 방법을 이용한 ADNBF(7-amino-4,6-dinitrobenzofuroxan)의 냉각 결정화시 결정형상에 미치는 공용매 영향력 예측

이혜은¹, 이재욱¹, 김현수², 구기갑^{1,3,*}

¹서강대학교 화공생명공학과; ²국방과학연구소;

³서강대학교 바이오융합기술협동과정

(koo@sogang.ac.kr*)

ADNBF를 이용하여 공용매가 결정의 형상에 미치는 영향을 알아보기 위해 분자 모형설계(molecular modeling) 방법을 이용하여 용액 내에서 자란 결정 형상을 예측하고 이를 실험을 통해 얻어진 형상과 비교하였다. 분자의 고유한 내적 성질로부터 결정 형상을 예측하는 고전적인 방법인 부착 에너지 모델이(attachment energy model) 용액 내에서 결정화된 결정 형상과 잘 맞지 않는 것이 판단되어 이를 해결하기 위해서 변형된 부착 에너지 모델을 고려하게 되었다. 이 모델에서는 용매분자들이 결정 표면과 상호작용 할 수 있는 정도를 고려하였고, 해당하는 온도에 따른 용해도 데이터를 바탕으로 몰 비를 고려, 마지막으로 결정 표면에 있는 작용기들을 고려하여 통합시켜 줌으로써 분자와 분자 간 상호작용 이외에도 환경에 따른 영향력을 추가적으로 고려하였다. 이러한 방법을 통하여 실험을 통해 얻어진 결정형상과 유사한 모양을 얻을 수 있었다. ADNBF 결정 분자들의 층간 에너지는 (001)면이 가장 안정한 면으로 나타났으나 용액 내에서 결정화가 되면서 용매 분자들이 결정 성장을 방해하게 되어 NMP/acetonitrile의 경우에는 (010)면이, NMP/chloroacetone의 경우에는 (001)면이 가장 불안정한, 즉 성장이 억제되는 면으로 나타났다.