

에너지 물질의 Force Field 개발

탁경재, 박찬호, 권희용, 정원복¹, 심정섭², 이근득², 김현수², 문 일*
연세대학교; ¹(주)한화 종합연구소; ²국방과학연구소
(kjtak@yonsei.ac.kr*)

고에너지 물질은 성능이 우수하면서도 필요한 경우 외부 자극으로부터 둔감한 특성을 지녀 안정성을 가져야 한다. 이런 상반된 두 가지 특성을 만족시킬 수 있도록 새로운 에너지를 개발하거나 기존 에너지 물질의 나노화를 통해 표면적이 크고 균일한 입도 분포를 갖도록 하여 고에너지 물질에 요구되는 특성들을 충족시키고자 하는 연구들이 수행되고 있다. 에너지 물질의 위험성으로 인해 합성 단계가 5단계를 넘지 않아야 하고 합성 조건에 대한 실험적인 제약이 많아 에너지 물질을 개발하고 상용화하는데 어려움이 많다. 따라서 이론 및 여러 실험 결과들을 바탕으로 에너지 물질의 물성 및 물리화학적 특성을 예측하고 분석하는 연구가 선행되어야 한다. 이를 통해 시간과 비용을 절감하고 실험 횟수를 줄여 효과적이고 안전한 에너지 물질 개발 연구가 가능하다. 본 연구에서는 에너지 물질의 물성 및 물리화학적 특성 예측을 위한 분자 모델링의 바탕으로 되는 에너지 물질의 Force Field를 개발하고, 에너지 물질의 전하 분포를 계산하였다. 에너지 물질인 HMX, RDX, HNIW에 대해서 Hatree-Fock 방법, 밀도범함수 이론(B3LYP, PBE), Moller-Plesset 섭동 이론을 통한 양자계산을 수행하였다. 문헌과의 비교를 통해 알고리즘에 따른 계산의 특징과 정확성을 비교분석하고 에너지 물질에 적합한 알고리즘을 선정하였다.