

분자 시뮬레이션을 이용한 아세톤 용매가 RDX morphology에 미치는 영향 분석

조형태, 탁경재, 박찬호, 정원복¹, 이근득², 박정수², 문 일*연세대학교; ¹(주) 한화 종합연구소; ²국방과학연구소

(htcho@yonsei.ac.kr*)

무기체계 기술은 고폭 화약 및 추진제의 성능 향상을 통해 발달해 왔다. 고폭 화약 및 추진제의 성능은 폭발 또는 연소 시 최대 효율로 나타낼 수 있으며 이는 원료로 사용되는 에너지 물질의 특성이 매우 중요한 역할을 한다. 고폭 화약은 성능이 우수하면서도 필요한 경우 외부 자극으로부터 둔감한 특성을 지녀 안정성을 가져야 한다. 이런 상반된 두 가지 특성을 만족시킬 수 있도록 새로운 에너지 물질을 개발하거나 기존 에너지 물질의 나노화를 통해 표면적이 크고 균일한 입도 분포를 갖도록 하여 고에너지 물질에 요구되는 특성들을 충족시키고자 하는 연구들이 수행되고 있다. RDX의 나노화는 용액으로부터 결정화 과정을 거쳐 RDX를 생산하면 나노수준의 결정을 얻을 수 있다. 용매와 결정 표면 사이의 상호작용에 의해 결정 성장 속도가 차이가 생기고, 성장 속도 차에 의하여 RDX morphology가 결정된다. 본 연구에서는 원자 스케일 시뮬레이션과 메조 스케일 시뮬레이션을 통하여 RDX와 용매인 아세톤과의 상호작용을 분석하였다. 이를 통하여 아세톤 용매가 RDX morphology에 미치는 영향을 규명하였다.

감사의 글: 본 연구는 (주)한화화과 국방과학연구소의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다. (계약번호: UC120019GD)