

1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocane (HMX)의
결정 습성 및 분자 모델링

심홍민, 이은애, 김왕수, 김재경, 한상근¹, 채주승², 이근득², 구기갑[†]
서강대학교; ¹(주)한화 종합연구소; ²국방과학연구소
(koo@sogang.ac.kr[†])

1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocane (HMX)은 니트로 계열의 고폭 화약으로 무기체계에 적용되어 널리 사용되고 있다. HMX는 폭발성능은 뛰어나지만 외부 충격에 민감한 화약이기 때문에 입도분포나 결정형상에 의해 외부 충격에 대한 둔감화 연구가 많이 수행되고 있다. 본 연구는 HMX의 결정 형상을 제어하기 위한 이론적 해법을 결정 성장 메커니즘을 적용한 분자 모델링을 이용해 제시하고자 한다. 본 연구에서는 증발 결정화로 HMX의 결정들을 성장시켰으며 용매의 증발 속도가 빠를수록 HMX의 중형비가 증가하는 것을 관찰하였다. 증발 속도는 용액 내 과포화도를 결정짓는 중요한 변수로, HMX의 결정형 제어를 위해서는 반드시 고려되어야 한다. 근본적으로 결정 면의 성장은 단일 층 스텝 (monolayer step)의 형성과 이동으로 설명되며 이 스텝은 2차원 핵생성 (2D nucleation)에 의해 이루어진다. 2차원 핵생성 속도는 결정 면마다 다르며 결정 면을 구성하는 용질 분자들 간 결합 에너지의 의해 결정된다. 또한 면마다 나선형 (spiral) 성장에서 2차원 핵생성 메커니즘으로 변하는 과포화도가 서로 다르기 때문에 동일한 메커니즘으로 결정 면의 성장을 모사할 수 없다. 본 연구는 결정 성장의 기본 메커니즘을 기반으로 상기 변수들을 고려한 HMX결정 성장 모델링을 수행하고 이를 제어하기 위한 실험적 조건을 제시하고자 한다.