

수용액 상에서 과염소산 암모늄의 핵생성에 관한 분자 동역학 시뮬레이션

심홍민, 김재경, 김현수¹, 구기갑[†]서강대학교; ¹국방과학연구소(koo@sogang.ac.kr[†])

고체 추진제는 장기적인 보관과 운반의 용이성 때문에 미사일로 널리 사용되고 있다. 그러나 발사체의 연소 성능이 고체연료를 포함한 산화제의 입도 분포와 충전 밀도 등에 영향을 받기 때문에 결정화 공정을 통한 입도분포 및 형상 제어가 반드시 필요하다. 본 연구에서는 고체 추진제의 산화제로 널리 사용되고 있는 과염소산 암모늄의 (AP)의 수용액 상 핵생성에 관한 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하여 핵생성 메커니즘을 관찰하고 정확한 물리화학적 물성치를 제공하고자 한다. 시뮬레이션 결과 AP의 격자에너지, 수용액의 농도, 확산계수, 동경분포함수 등의 물성치가 실험값과 매우 일치하였다. 수용액 상에서의 AP의 용해과정은 흡열 반응으로 계산되었으며 이는 실제 냉각 결정화에 의해 AP의 엔탈피 준위가 감소되는 것과 실험적으로 일치하였다. 또한, 과포화도 S가 각각 5.1과 6.4인 조건에서 Yasuoka-Mastumoto 방법에 의해 핵생성 속도와 임계핵 크기를 계산한 결과 고전핵생성 이론(CNT)을 적용하여 구한 값들과 높은 일치율을 보였다. Two-step 이론에 의하면 결정의 핵생성 과정은 분자들의 응집에 의한 고밀도 액상 출현이 수반된 다음 결정구조의 핵이 생성된다. CNT는 분자들의 응집체를 핵으로 가정한 것으로 액상에서 결정상으로 자유에너지의 변화가 작은 경우에 해당된다. 실제 작은 크기의 분자들의 경우 고밀도 액상의 출현 없이 핵생성이 일어나는 것으로 관측되며 이는 본 연구에서 수행한 AP 핵생성 시뮬레이션 결과와도 일치한다.