

분자 모델링에 의한 ϵ -HNIW 결정 성장
메커니즘 해석

심홍민, 김왕수, 이현주, 김현수¹, 구기갑[†]

서강대학교; ¹국방과학연구소

(koo@sogang.ac.kr[†])

ϵ -HNIW는 기존 RDX 및 HMX보다 에너지밀도가 높아 차세대 고에너지 물질로 각광을 받고 있는 물질이다. 본 연구에서는 ϵ -HNIW 냉각결정화 공정에서 분자 모델링을 이용하여 용매가 ϵ -HNIW에 미치는 영향을 분석하고, 결정 형상을 제어하기 위한 공정 조건을 제시하고자 한다. 용매 에틸아세테이트와 메탄올에서 생성된 ϵ -HNIW 결정은 각각 다면체 형상과 양추형으로 예측 되었으며 실험 결과와도 잘 일치하였다. 에틸아세테이트와 달리 메탄올은 ϵ -HNIW와 수소결합을 하기 때문에 (101)면에서의 계면에너지가 상당량 감소되며, 이는 결과적으로 이차원 핵생성 메커니즘에 의해 결정 성장이 촉진되어 결정면의 빠른 성장이 유도되는 것으로 해석된다.