

ϵ 형 HNIW의 생산을 위한 Anti-solvent 결정화기의 해석

정우영, 전락영, 이건희, 김준형¹, 김광주, 오민[†]

한밭대학교; ¹국방과학연구소

군사용 화약인 고성능 추진제 및 폭약에는 고에너지물질인 나이트라민계 산화제가 주로 사용된다. 그 중에서도 HNIW는 외부 열로부터 RDX, HMX보다 높은 안정성을 보유하고 있다. HNIW는 4가지 결정구조를 가지고 있으며, 고에너지 및 고밀도 특성을 가지는 결정구조는 ϵ 형 HNIW이다. 이러한 결정구조와 결정의 크기 및 형상을 제어하기 위해서는 결정화 최적화가 이루어져야 하며, 결정화 공정의 해석이 필요하다. 본 연구에서는 결정화 최적화를 위해 전산유체역학(CFD) 기법을 사용하여 결정화 공정을 해석하였다. 결정화기의 구조는 Semi-batch 형태의 파이롯 규모 설계하였고, 결정 생성 및 성장을 해석하기 위해 Population balance의 QMOM 모델이 사용되었다. 결정 생성 및 성장 kinetics는 공동연구팀이 실험값으로 얻어낸 Solubility 결과를 근거로 작성되었다. 결정화기를 해석함으로써 내부 용매의 거동, 속도장, 평균 입도, 입자 분포를 확인하여 실험결과와 비교하였으며, 결정 성장에 영향을 미치는 교반기 속도, 용매의 비율, 유입속도에 변화를 주어 사례연구를 실시하였다.