

냉각 결정화에 의한 ADNBF 형상 제어: 공용매의 영향 및 분자모델링

이혜은¹, 구기갑^{1,2,*}

¹서강대학교 화공생명공학과; ²서강대학교 바이오융합기술
(koo@sogang.ac.kr*)

둔감 분자 화약 ADNBF의 입도 및 형상을 제어하고자 3종의 공용매(NMP/acetonitrile, NMP/chloroacetone, NMP/methanol)를 이용하여 냉각 결정화 실험을 수행하였다. 공용매의 용매비에 따라 ADNBF 결정 형상은 규칙적인 변화를 보였다. 이 현상을 분자모델링 기법을 이용하여 attachment energy model을 기본으로 ADNBF 결정면과 용매 분자들 간의 상호 작용 에너지를 계산하여 결정 형상을 모사한 결과 ADNBF 결정의 (010)면이 가장 안정하며, 따라서, (010) 면이 넓은 판상으로 성장함을 알 수 있었다.