

RDX 냉각 결정화에서 결정 성장 습성에 대한 분자 모델링

이혜은, 김현수¹, 구기갑*

서강대학교 화공생명공학과; ¹국방과학연구소

(koo@sogang.ac.kr*)

분자 화약인 RDX(cyclotrimethylene trinitramine)의 냉각 결정화 공정에서 용매 cyclohexanone에서는 (200)면이 잘 발달하는 반면 γ -butyrolactone에서 성장할 때는 (210)면을 주요한 면이 된다. 이와 같은 RDX 결정 성장 습성에 대한 용매의 영향을 분자 모델링으로 해석하였다. RDX 분자를 구성하는 작용기들은 다양한 각도를 가지고 있고, RDX 결정의 Unit cell은 서로 다른 방향성을 갖는 8개의 RDX분자로 구성되어 있기 때문에 다양한 성장 층(growth layer)을 갖는다. 이와 같은 다양한 표면과 용매 분자 사이의 상호 작용 에너지를 계산하여 비교 평가해 본 결과 특정 용매에 의한 특정 면의 성장 층(growth layer)의 성장이 크게 방해 받고 있음을 확인할 수 있었다.