

RDX의 냉각 결정화에 있어서 BCF 모델을 이용한 결정 형상 예측

심홍민, 김재경, 김현수¹, 구기갑*

서강대학교; ¹국방과학연구소

(koo@sogang.ac.kr*)

아세톤에서 성장하는 RDX의 결정 형상을 Burton-Cabrera-Frank (BCF) 모델을 적용하여 분자 모델링하였다. Material Studio 7의 MORPHOLOGY 모듈을 이용하여 RDX 분자 간 에너지를 구하였으며, attachment energy (AE) 모델로 구한 F-faces에 관해 각각 상대적인 결정 성장 속도를 예측하였다. 시뮬레이션 결과 BCF로 예측된 결정형상은 {210} 면과 {111} 면으로 이루어졌으며 이는 실험적으로 얻은 결정형상과 매우 유사하였다. 그 이유는 {210}면과 {111}면에서 layer의 확산 속도가 다른 면들에 비해 상대적으로 느리기 때문이다. 결과적으로 BCF 모델을 이용하여 기존 AE 모델이 다룰 수 없었던 결정 면 위에서의 layer성장을 고려하여 보다 정확한 결정형상을 예측할 수 있었다.