

1,1-Diamino-2,2-Dinitroethylene 결정 성장 습성 예측

심홍민, 김재경, 김현수¹, 구기갑*

서강대학교; ¹국방과학연구소

(koo@sogang.ac.kr*)

1,1-diamino-2,2-dinitroethylene (FOX-7)의 결정 성장 습성을 분자모델링 기법으로 모사하였다. Material Studio 7의 MORPHOLOGY 모듈을 이용하여 FOX-7 분자 간 에너지를 계산하였으며, 2-D nucleation 모델을 도입하여 각 면에서의 step 에너지를 계산하였다. Step 에너지는 결정 면 위에 새로운 step을 만들 때 필요한 에너지로서 그 값이 크면 클수록 해당 면의 성장 속도는 줄어든다. 시뮬레이션 결과 {11-1} 면의 step에너지가 다른 면들에 비해 매우 큰 값으로 계산되었다. 그 결과 FOX-7은 {11-1} 면이 주를 이루는 막대 모양의 결정형으로 예측되었으며, 이는 실험적으로 얻은 FOX-7 결정형과 매우 유사하였다. 각 면에서의 상대적인 step 에너지는 결과적으로 결정 성장 속도에 매우 큰 영향을 끼치는 것으로 보인다.