

용매에 따른  $\epsilon$ -HNIW의 결정 습성에 대한  
분자 모델링

심홍민, 김재경, 한상근<sup>1</sup>, 채주승<sup>2</sup>, 이근득<sup>2</sup>, 구기갑<sup>†</sup>  
서강대학교; <sup>1</sup>(주)한화 종합연구소; <sup>2</sup>국방과학연구소  
(koo@sogang.ac.kr<sup>†</sup>)

상대적으로 높은 에너지 밀도와 생성열을 가지는 hexanitrohexaazaisowurtzitane (HNIW)는 기존 HMX보다 20% 이상의 성능 향상을 기대할 수 있는 물질로 각광받고 있지만, 낮은 충격 감도로 인한 비의도적 폭발을 야기할 수 있어 HNIW의 둔감화 연구가 반드시 필요하다. 본 연구에서는 HNIW의 충격 감도에 영향을 끼치는 물리적 성질 중 하나인 결정 습성을 제어하기 위한 이론적 해법을 분자 모델링을 이용해 제시하고자 한다. 결정 형상은 결정 면의 상대적인 성장 속도에서 기인하며 계면 에너지에 의해 큰 영향을 받는다. 그러므로 적절한 용매의 선정은 결정 면 위에 존재하는 kink의 농도를 근본적으로 변하게 하여 특정 면으로의 성장을 촉진 및 억제할 수 있다. 본 연구에서는 에틸아세테이트와 에탄올 두 용매에서 성장하는  $\epsilon$ -HNIW를 분자 수준에서 모델링하여 용매에 따른 kink 농도의 변화를 계산 후 결정 습성을 예측하였다. 그 결과 상대적으로 낮은 polarization 에너지를 갖는 에틸아세테이트의 경우,  $\epsilon$ -HNIW는 {11-1}, {011}, {002}, {101}, {10-1} 면들로 이루어진 결정화 습성을 확인하였다. 그러나 HNIW의 산소 분자와 수소 결합이 가능한 에탄올의 경우 에틸아세테이트보다  $\epsilon$ -HNIW의 polarization 및 Coulombic 에너지에 큰 영향을 끼쳤으며,  $\epsilon$ -HNIW의 {11-1} 면과 {011} 면의 상대적인 성장 속도가 매우 낮아져 bipyramid형으로 성장함이 확인되었다.