

Modified attachment energy model을 이용한 용매의 ADNBF 결정 형상에 미치는 영향 예측

의혜은, 이재욱, 김현수¹, 구기갑*
서강대학교 화공생명공학과; ¹국방과학연구소
(koo@sogang.ac.kr*)

일반적으로 용액 결정화에 의한 ADNBF(7-amino-4,6-dinitrobenzofuroxan) 결정은 판상의 형상을 보인다. 이와 같은 ADNBF 결정 습성을 Modified attachment energy model을 이용하여 분자레벨에서 특정 면에 미치는 분자들의 영향력을 고찰하였다. 결정 면과 용매 사이의 상호 작용 에너지를 분자 모델링 기법(Quench 방법, Material Studio 4.3)을 이용하여 용액과 결정의 접촉 면에서 용매의 영향력을 비교 평가하였다. 또한 ADNBF 각 표면들의 결합 가능한 위치를 확률적으로 고려하였다. Attachment energy model에 의한 ADNBF결정은 {001}면의 성장이 가장 빠른 것으로 예측되나 용매들의 영향을 고려한 modified attachment energy model로 예측된 결정 형상은 {001}면의 성장이 가장 억제된 것으로 예측되었다. 실험적으로 공용매가 {110}면의 성장에 큰 영향을 미침을 확인하였으며, 이와 같은 공용매 분자들의 역할에 대한 이론적 설명을 분자 수준에서 시도하였다.