

## 분자 시뮬레이션을 이용한 RDX 코팅 모델링

탁경재, 권휘웅, 이호연<sup>1</sup>, 심정섭<sup>2</sup>, 이근득<sup>2</sup>, 김현수<sup>2</sup>, 문 일\*  
연세대학교; <sup>1</sup>(주)한화 종합연구소; <sup>2</sup>국방과학연구소  
(kjtak@yonsei.ac.kr\*)

무기체계 기술은 고퍽 화약 및 추진제의 성능 향상을 통해 발달해 왔다. 고퍽 화약 및 추진제의 성능은 폭발 또는 연소 시 최대 효율로 나타낼 수 있으며 이는 원료로 사용되는 에너지 물질의 특성이 매우 중요한 역할을 한다. 에너지 물질에 대한 연구는 크게 두 가지로 구분된다. 첫 번째는 HNIW, NTO, ADNBF, FOX-7과 같은 새로운 에너지 물질 개발이고, 두 번째는 RDX, HMX와 같은 기존 에너지 물질의 나노화이다. 나노 수준의 에너지 물질은 넓은 표면적으로 인하여 표면 에너지가 크기 때문에 효과적인 사용을 위해서는 표면 성질을 조절해 주어야 한다. 이를 위한 방법 중의 하나가 자기 조립 분자막 기술을 이용한 표면 코팅이다. PEI (poly ethylene imine)와 같은 전해질 고분자를 이용하여 나노화된 RDX 입자의 표면 개질이 가능하다. 이는 표면의 대전된 전하 특성에 따라 분자들이 자기 조립을 하는 특성을 이용하는 것으로, 구체적인 메커니즘 분석을 위하여 원자 및 분자 수준의 모델링이 필요하다. 본 연구에서는 원자 스케일 시뮬레이션과 메조 스케일 시뮬레이션을 통하여 RDX와 코팅 물질인 고분자와의 상호작용을 분석하였다. 이를 통하여 RDX에 고분자가 자기조립을 통한 분자막을 형성하는 메커니즘을 규명하였다.

감사의 글: 본 연구는 (주)한화와 국방과학연구소의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다. (계약번호: UC120019GD)