

트리나이트로이미다졸 치환체들의 화약성능 및 감도 예측 분석

전영진^{1,2)} · 김현수^{1,3)} · 김진석²⁾ · 조수경^{*,1,2)}

¹⁾ 과학기술연합대학원대학교 무기체계공학과

²⁾ 국방과학연구소 제4기술연구본부

³⁾ 국방과학연구소 공용기술센터

Predictive Analysis on Explosive Performance and Sensitivity of 1-Substituted Trinitroimidazoles

Yeongjin Jeon^{1,2)} · Hyoun-Soo Kim^{1,3)} · Jin Seuk Kim²⁾ · Soo Gyeong Cho^{*,1,2)}

¹⁾ Department of Weapon Systems Engineering, University of Science and Technology, Korea

²⁾ The 4th Research and Development Institute, Agency for Defense Development, Korea

³⁾ Common Support Technology Center, Agency for Defense Development, Korea

(Received 3 February 2017 / Revised 11 May 2017 / Accepted 21 July 2017)

ABSTRACT

Various chemical properties including density and heat of formation of 1-substituted trinitroimidazoles (TNIs) were estimated by using density functional theory (DFT). Using chemical properties estimated by DFT, explosive performance and sensitivity of 1-substituted TNIs were analyzed by following the ADD Method-1 procedure. The results were displayed on two-dimensional performance-sensitivity plot, and were compared with those of explosive molecules commonly used in many military systems. Different 1-substituents of TNI made that both explosive performance and impact sensitivity were changed significantly. Methyl substituted TNI became moderately insensitive and slightly less powerful. Amino, fluoro, picryl, and difluoroamino substituted TNIs were highly powerful like RDX and HMX, but greatly sensitive. Nitro substituted TNI was predicted to be extremely sensitive to be handled as a secondary explosive.

Key Words : Explosive(화약), Energetic Material(고에너지물질), Explosive Performance(화약 성능), Sensitivity(민감성), Trinitroimidazole(트리나이트로이미다졸)

1. 서론

군용화약으로 사용되는 고폭화약은 폭발시 높은 폭발 속도와 폭발 압력을 나타내어야 군용으로서의 원하는 목적을 달성할 수 있다. 또한 취급 시에 안전해야 하므로 적절한 둔감성도 갖추어야 한다. 과거 안전하지 못한 화약 사용으로 인해 여러 대형사건, 사고들

* Corresponding author, E-mail: socho11@nate.com

Copyright © The Korea Institute of Military Science and Technology

이 발생하였으며 이에 따른 교훈으로 최근에는 둔감 화약에 대한 필요성을 모든 국가에서 인지하고 있는 실정이다.

현재 군용화약으로 널리 사용 중인 여러 화약분자들로 미루어 추정하면, 대체로 화약 성능이 뛰어난 화약들은 민감한 편이며, 반면 둔감한 화약분자들은 화약 성능이 다소 떨어지는 경향이 있음이 널리 알려진 사실이다. 그럼에도 많은 연구자들이 이런 경향성에서 벗어나 고성능이면서도 취급에 안전할 정도로 둔감한 화약분자들을 개발하기 위해 노력 중이며, 다양한 대상물질들을 합성하고 그 성능과 둔감성을 확인하는 연구들을 진행하고 있다^{1,2}.

하나의 성공적인 화약을 개발하기 위해서는 신약개발과정에 비견 할 만큼 많은 노력을 필요로 한다. 화약 역시 신규화약 후보물질을 탐색하고, 그것을 선별하는 작업을 거친 후 임상시험처럼 합성과 성능확인을 반복하게 되는데 모든 화약 후보물질들을 합성하고 성능을 확인한다는 것은 상당히 많은 노력과 자금을 필요로 하게 되어 불가능에 가깝다고 할 수 있다. 따라서 신규화약 후보물질을 탐색하는 과정에서 해당물질의 대략적인 성능과 둔감도를 예측하여 효과적으로 선별할 수 있다고 한다면 화약 개발 과정에서 불필요하게 소모될 자원을 낭비하지 않을 수 있고, 더 나아가 상당한 수준의 정확도로 성능과 둔감도를 예측할 수 있다면 신규화약을 개발하는데 많은 도움이 될 것으로 생각된다.

이에 국방과학연구소 고폭화약팀은 신규화약후보물질 탐색을 위한 효율적인 방법을 고안하게 되었고, 이를 ADD Method-1이라고 명명하였다¹. 해당 방법을 이용하여 후보물질을 분석하고 평가하는 작업을 진행하였다^{3,4}.

새로운 화약을 개발하기 위하여 질소를 가지고 있는 작용기를 추가하거나, 고리형 탄화수소에 질소를 치환한 화약들에 대해서 지속적으로 관련연구가 진행되고 있다⁵⁻⁹. 질소를 치환할 경우에 생성열 증가가 예측되어 성능 향상에 이점이 있을 것으로 예상된다. 이에 연구 대상 물질로 이미다졸 계열의 화합물을 선정하였다. 이미다졸 계열 물질은 기본골격이 고리형태를 가지고 있기 때문에 상당히 안정할 것으로 예상되고, 여기에 추가적으로 나이트로기를 치환하여 기본적인 형태보다 전체적인 에너지가 큰 폭으로 상승하여 성능이 우수한 화약후보물질일 것으로 기대된다.

트라이나이트로이미다졸(Tritnitroimidazole, TNI)은 자

체적으로 상당한 화약 성능을 발휘할 수 있는 군용화약 후보물질이다. 특히 나이트로기 치환이 고리에 C-결합으로 이루어져 있는데, 이 경우 N-결합이나 O-결합보다 상대적으로 열적 안정성이 높고, 충격감도와 속감도가 상대적으로 안정적이라고 알려져 있다¹⁰⁻¹³. 하지만 1번 질소 위치의 수소는 매우 강한 산성을 띠고 있어 주변의 염기성 물질과 쉽게 반응할 가능성이 있어 구조적으로 안정성이 부족하다. 그러므로 1번 위치의 수소는 다른 안정된 치환체로 대체되어야 실질적으로 응용 가능한 군용화약이 될 것으로 추정된다. 본 연구에서는 TNI의 1번 위치에 적절한 치환체를 부착하여 군용화약으로 실용 가능한 물질을 설계하는 작업을 수행하였다. 여기에 치환체로는 Fig. 1에 도시한 바와 같이 메틸기, 불소기, 아민기, 다이플루오르아민기, 나이트로기, 페닐기, 피크릴기를 사용하였다.

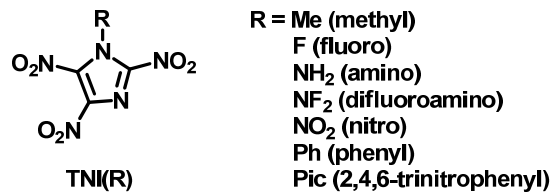


Fig. 1. Chemical structure and naming scheme for 1-substituted TNIs studied in this work

2. 삼차원 분자구조

물질의 화학적 특성을 예측하는 과정에서 가장 먼저 수행해야 할 작업은 물질의 가장 안정된 구조를 확보하는 일이다. 모든 분자들은 가장 안정된 에너지 형태의 구조에서 존재하기 때문이다¹⁴. 삼차원 분자구조를 획득하는 작업은 가우시안-03 프로그램에서 밀도함수 이론(Density Functional Theory, DFT)인 B3LYP/6-31G* 수준의 이론에서 계산을 수행하였다¹⁵. B3LYP/6-31G* 계산으로 획득한 다양한 TNI 치환체들의 가장 안정된 삼차원적 분자구조는 Fig. 2에 도시하였다.

본 연구에서 골격이 되는 이미다졸은 질소 원자가 2개 포함된 방향성 헥테로고리 화합물로 6개의 파이 전자들이 비편재화(delocalize)되어 벤젠처럼 평면 구조를 형성한다¹⁶. 또한 나이트로나 페닐처럼 파이전자들을 가진 치환체들이 단일결합(single bond)으로 부착되는 경우에도 이들의 파이전자간의 중첩(overlap)을

최대로 하기 위해 동일한 평면 구조를 형성하는 것이 가장 안정된 구조이다. 하지만 TNI 유도체와 같이 다수의 치환체가 부착되는 경우에는 유도체간의 구조적 응력 및 전자력 때문에 평면 구조에서 변형이 된다.

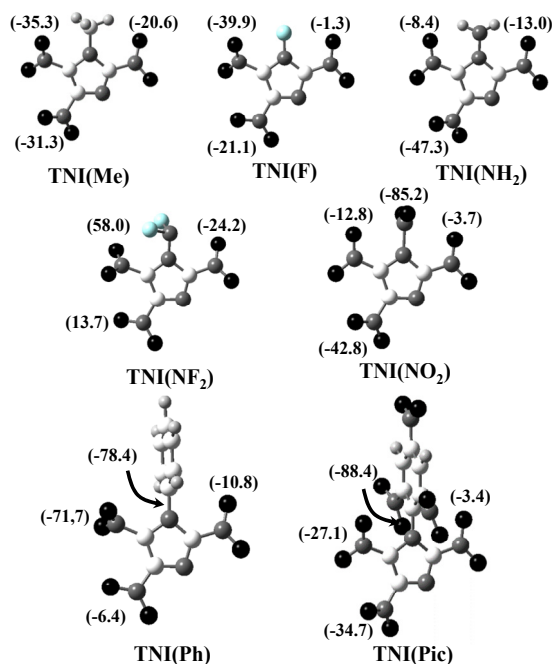


Fig. 2. 3D-structures of 1-substitued TNIs. The values in parentheses are torsional angles of attached groups

TNI(Me)의 경우 3개의 니트로기들이 약 20~30도 정도 비틀린 것을 확인할 수 있었다. 전체적으로 모든 치환체들이 이웃하고 있으며, 또한 이웃하는 니트로기의 전기음성적인 산소 원자들끼리의 척력도 작용한 결과로 생각할 수 있다. TNI(F)의 경우는 TNI(Me) 보다 작은 치환체이어서 구조적 응력이 작은 편이다. 2 위치의 니트로기가 이미다졸 고리와 거의 동일 평면을 이루고 있다.

TNI(NH₂)의 경우는 1 위치의 아미노기와 이웃하는 2,5 위치의 니트로기 사이에 수소결합을 통한 상당한 인력이 작용하고 있음을 구조형태에서 알 수가 있다. 이런 이웃하는 아미노기와 니트로기 사이의 수소결합을 통한 안정성은 이미 2,4,6-트라이아미노벤젠-1,3,5-트라이아미노벤젠(TATB)에서 확인된 바가 있다^[17]. TNI(NF₂)의 경우 5 위치의 니트로기가 상당히

비틀려 있고, TNI(NO₂)의 경우 1 위치의 니트로기가 이미다졸 고리에 거의 수직한 형태로 위치하며 이웃한 2,5 위치의 니트로기는 이미다졸 고리에 거의 평면으로 존재한다.

페닐기를 치환체로 둔 TNI(Ph)이나 TNI(Pic)의 경우에도 주변의 니트로기 때문에 페닐기가 이미다졸 고리와는 전혀 전자적 중첩을 할 수 없는 90도 정도의 이면각 형태를 유지하고 있다. 이는 페닐기의 이면각 회전에너지가 니트로기의 회전에너지에 비해서 낮은 편이어서 구조적 응력을 잘 해소할 수 있는 형태인 것으로 추정된다.

3. 화학적 특성

ADD Method-1 절차에 따르면 화약 성능을 예측하기 위해 필요한 화학적 특성은 생성열과 밀도이며, 충격감도를 예측하기 위해 필요한 화학적 특성은 매우 간단한 위상학적 분자설명인자들이다^[1]. 위상학적 분자설명인자들은 쉽게 인지가 가능하지만 전혀 정보가 없는 상태에서 생성열과 밀도를 정확하게 예측하는 작업은 매우 어려운 예측 과정이다.

밀도 예측 작업에는 DFT 방안으로 계산한 분자표면에서의 전자전위 포텐셜(Molecular Surface Electrostatic Potential, MSEP)을 이용하여 부피 및 밀도를 추정하였다. MSEP 방안으로 계산한 화약물질들의 밀도는 다른 방안에 비해서 매우 정확한 예측력이 있음을 확인되었다^[18]. 생성열 예측 작업은 DFT BP86/6-31G** 계산을 기초로 하고 결합 형태에 대한 실험적 보정치를 추가한 폴리처 방안을 적용하여 계산 작업을 수행하였다. 대부분의 화약분자들이 상온에서 고체 상태로 존재하기 때문에 승화열을 보정하는 작업에서 상당한 오차를 포함된다. 하지만 생성열의 오차가 화약 성능 계산 작업에 미치는 영향력은 비교적 미미하므로 큰 문제가 되지 않는 것으로 확인하였다.

TNI 유도체들의 밀도 계산 결과를 Fig. 3에 도시하였다. 예측 결과, 가장 낮은 밀도를 지닌 분자는 TNI(Ph)로 1.693 g/cc이다. 이는 일반 탄화수소인 페닐기가 고밀도 유도체인 TNI에 결합되어 있으므로 다소 낮은 밀도를 지닐 것으로 예측할 수 있다. 다음으로 낮은 밀도는 TNI(Me)로 1.830 g/cc이다. 그 외의 물질들은 1.926~1.976 g/cc로 매우 높은 밀도 값을 보여줄 것으로 예측되었다. 현재 군용화약으로 널리 사용되는

옥토겐(octogen, HMX)이 1.903 g/cc, 헥소겐(hexogen, RDX)이 1.82 g/cc 이므로, **TNI(Ph)**를 제외한 나머지 치환체의 밀도가 매우 높은 수치임을 알 수 있다.

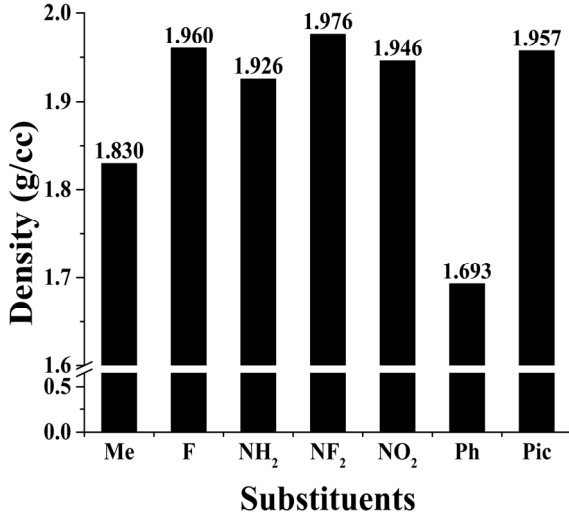


Fig. 3. Density of 1-substituted TNIs

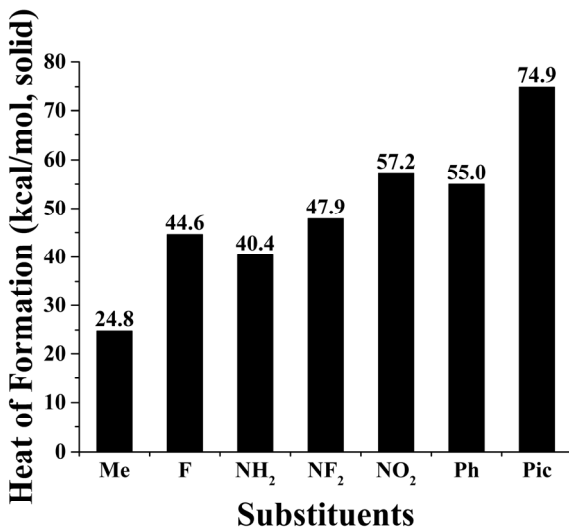


Fig. 4. Heat of formation of 1-substituted TNIs

생성열 계산 결과는 Fig. 4에 도시하였다. 생성열은 모두 양(positive)의 값을 지닌다. 생성열 자체만으로 화약 성능의 영향력을 평가하기는 불가능하지만 같거나 유사한 물질 간에서는 높은 양의 값을 지닌 물질이 높은 화약 성능을 주는 것은 사실이다. 또한 질소 헤테

로고리 화합물의 경우에는 유사한 탄화수소물 보다 높은 생성열을 지니고 있다고 알려져 있다. 본 연구에서 계산한 물질들 중에서도 이미다졸 고리나 치환기에 추가적인 치환이 많을수록 증가하는 경향이 있다. 본 계산에 사용된 물질 중에서는 **TNI(Me)**가 24.8 kcal/mol로 가장 낮은 수치를 나타내며, **TNI(Pic)**가 74.9 kcal/mol로 생성열이 가장 높았다.

산소평형은 인공지능신경망을 이용한 충격감도 산출에 필요한 인자이며, 화약물질 내부에 포함된 산소가 자체적으로 완전 연소하기에 충분한 양이 있는지 나타내는 지표이다. 음의 값을 가지면 완전연소에 필요한 산소가 부족하다는 의미이다. 경향성을 보면 **TNI(NO₂)** (12.9) > **TNI(F)** (0) = **TNI(NF₂)** (0) > **TNI(NH₂)** (-7.3) > **TNI(Me)** (-25.8) > **TNI(Pic)** (-27.0) > **TNI(Ph)** (-83.1)와 같다.

4. 화약성능 및 충격감도 분석

4.1 화약성능 분석

화약의 성능을 나타내는 지표로 매우 다양한 특성들이 사용되지만, 가장 많이 언급되는 수치는 폭발속도(detonation velocity)와 Chapman-Jouguet(C-J) 압력이다¹⁹⁾. 본 연구에서는 화약물질의 반응에 대한 자유에너지를 최소화하여 폭발속도와 C-J 압력을 예측하는 프로그램인 EXPLO5²⁰⁾를 사용하였다. 화약의 성능은 실제 충전한 화약 밀도에 상당히 종속적이므로 이론적인 밀도를 사용하면 그 성능을 과다하게 예측하게 된다. 그러므로 본 연구에서는 MSEP로 예측한 결정 밀도의 97 %로 압축한다는 가정 하에서 계산을 수행하였다.

EXPLO5로 계산한 폭발속도와 C-J 압력 결과를 Fig. 5와 6에 각각 도시하였다. Fig. 5에 도시된 폭발속도 결과에 따르면, **TNI(NH₂)**가 9.335 km/sec로 다른 치환체에 비하여 상당히 높은 성능을 보인다. 그 뒤로 **TNI(NO₂)**, **TNI(F)**가 8.882 km/sec, 8.856 km/sec, **TNI(Pic)**, **TNI(NF₂)**가 8.686 km/sec, 8.667 km/sec, **TNI(Me)**가 8.468 km/sec, 마지막으로 **TNI(Ph)**가 6.831 km/sec로 가장 낮은 폭발속도를 보일 것으로 예측하고 있다. 이들 예측 결과를 현용 군용화약들과 비교해 보면, **TNI(NH₂)**는 현용 군용화약 중 최상급에 속하는 HMX(폭발속도 = 9.110 km/sec) 보다도 더 높은 수치를 보인다. **TNI(NO₂)**, **TNI(F)**, **TNI(Pic)**, **TNI(NF₂)**는 핵

소겐(hexogen, RDX, 폭발속도 = 8.700 km/sec)보다 우수하거나 비슷한 수치를 보이고 있다. **TNI(Me)**는 RDX에 약간 못 미치는 것으로 예측된다. 반면 **TNI(Ph)**는 다른 치환체들에 비해 매우 낮아 트라이나이트로톨루엔(Trinitrotoluene, TNT, 폭발속도 = 6.930 km/sec)에도 미치지 못하는 값을 보인다.

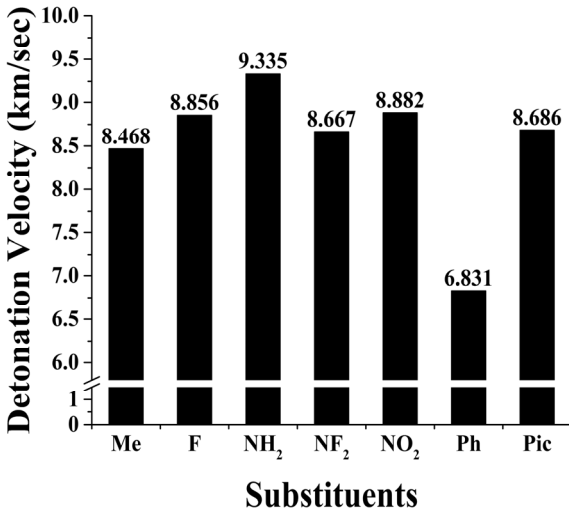


Fig. 5. Detonation velocity of 1-substituted TNIs

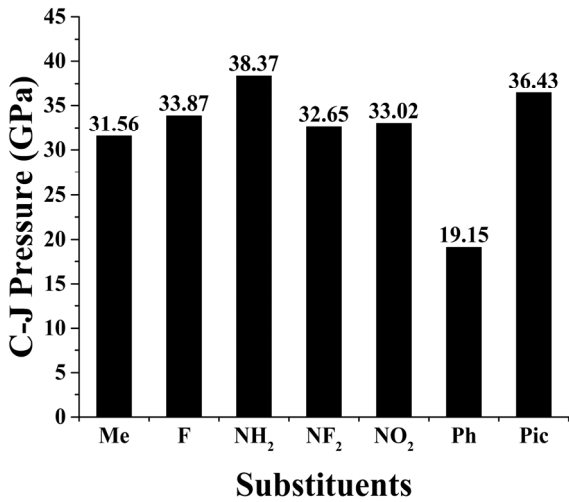


Fig. 6. C-J pressure of 1-substituted TNIs

C-J 압력에서도 **TNI(NH₂)**가 38.37 GPa로 다른 치환체에 비해 우수한 성능을 보인다. 그 뒤로 **TNI(Pic)**, **TNI(F)**, **TNI(NO₂)**, **TNI(NF₂)**, **TNI(Me)** 순으로 예측되고

있다. 여기에서도 **TNI(Ph)**는 가장 낮은 19.15 GPa로 예측된다. 기존 군용화약들과 비교해 보면 **TNI(NH₂)**와 **TNI(Pic)**는 HMX(C-J 압력 = 39.40 GPa)에 살짝 미치지 못하는 값을 보이고, **TNI(F)**는 RDX(C-J 압력 = 33.70 GPa)과 거의 동등한 결과를 보이고 있다. **TNI(NO₂)**, **TNI(NF₂)**, **TNI(Me)**는 RDX에 비해 약간 낮은 수치를 보이고 있다. **TNI(Ph)** 치환체는 역시나 TNT(C-J 압력 = 21.00 GPa)에도 미치지 못하는 값을 보인다.

EXPLO5에서 계산한 폭발속도와 C-J 압력의 예측 결과는 매우 유사한 결과들을 제공하였다. 폭발속도의 경향성은 **TNI(NH₂) > TNI(NO₂) > TNI(F) > TNI(Pic) > TNI(NF₂) > TNI(Me) > TNI(Ph)**의 순서이다. C-J 압력은 **TNI(NH₂) > TNI(Pic) > TNI(F) > TNI(NO₂) > TNI(NF₂) > TNI(Me) > TNI(Ph)**의 순서이다. **TNI(Pic)**를 제외한 나머지 치환체의 위치는 거의 동일함을 알 수 있다. 또한 기존의 군용화약과 비교하였을 경우에도 매우 유사함을 확인할 수 있었다.

4.2 충격감도 분석

화약성능은 신규 화약분자 개발의 매우 중요한 지표이지만, 안전도 또한 매우 중요하다. 화약분자의 안전도를 예측할 수 있는 지표 중에 충격감도는 소규모 안전도 실험의 매우 중요한 자료이다. 충격감도는 정해진 무게 추를 소량의 화약 샘플에 떨어뜨려 폭발이 50 % 확률로 일어나는 높이를 설정하여 그 높이나 에너지를 지표 수치로 측정한다. 이런 충격감도 실험은 화약분자의 특징적인 감도 특성 외에도 물질의 물리적 특성, 특히 입자 형상과 크기, 압축 정도나 내부 공극(hot spot), 순도에 따라서 실험 결과에 변동이 있을 수 있다. 또한 온도, 습도 등 실험 상태에 따라 변화하기도 해서 이들 결과로부터 화약분자의 감도 특성만을 도출해 내기는 어려운 실정이다. 하지만 현재로서는 이들 결과 외에 화약의 안전성을 설명할 수 있는 지표를 도출하기 어려운 실정이므로 대부분의 경우 충격감도를 사용하여 안전도를 설명하고 있다.

충격감도의 예측 작업 또한 실험 못지않게 어려운 실정이다. 많은 예측 연구를 수행한 바가 있지만 그 상관관계를 과학적인 근거에 따라 도출하지 못하고 있는 실정이며, 다양한 화약물질 형태에 적용하기 어려운 실정이다. 그러므로 ADD Method-1에서는 인공지능경망을 사용한 지식 기반적 방안으로 추정을 하였다²¹⁾. 본 실험에서도 기존 국과연에서 수행한 인공지능경망 방안으로 수행하였으며, 17-2-1의 최적

화된 인공지능 구조를 통하여 예측하였다. TNI 유도체 예측 결과는 Fig. 7에 도시하였다.

인공지능신경망으로 예측한 TNI 유도체들의 충격감도는 **TNI(Ph)**와 **TNI(Me)**를 제외하고는 대부분 상당히 민감한 경향성을 보이고 있다. **TNI(NH₂)**는 7.2 J로 HMX(7.3 J)와 유사하며, **TNI(F)**, **TNI(NF₂)**, **TNI(Pic)**의 경우 4.2~5.9 J로 RDX(6.5 J)에 버금갈 정도이거나 이보다 민감한 수치이며, **TNI(NO₂)**는 2.5 J로 상당히 민감하게 예측되었다. 대부분의 고성능 화약분자들이 민감한 것과 유사한 경향성이다. **TNI(Me)**는 14.5 J로 RDX나 HMX 보다는 훨씬 둔감한 편이며, **TNI(Ph)**는 45.5 J로 TNT(40 J)보다도 둔감한 것으로 예측되었다.

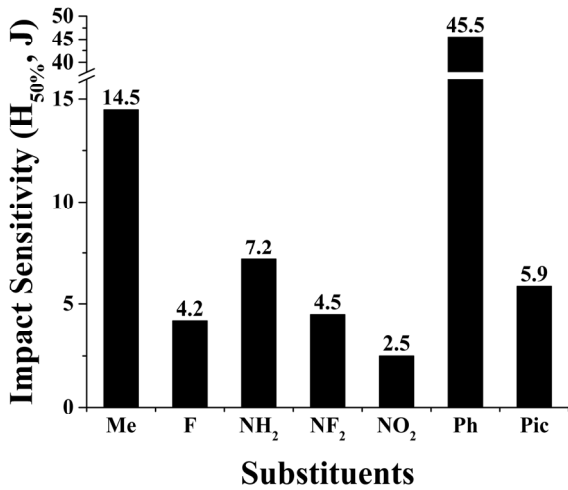


Fig. 7. Impact sensitivity of 1-substituted TNIs

5. 이차원 성능-감도 그래프 분석

앞에서도 언급한 바가 있지만 일반적으로 화약분자들의 특성이 화약성능과 둔감 성향이 서로 상반되는 경향을 갖고 있는 것으로 추정된다. 그러므로 화약분자의 전체적인 특성은 이들 두 중요한 특성들을 파악하고 종합적으로 판단하여야 할 것이다. 그러므로 국과연에서는 화약성능과 감도의 이차원 그래프를 도시하여 분석하는 작업을 수행하고 있다.

Fig. 8은 화약성능과 둔감도의 관계를 정량적으로 도시한 내용이다. 화약성능의 지표인 폭발속도나 C-J 압력을 X축, 안전도의 지표인 충격감도를 Y축으로 하여 작성하였다. 여기에 기존에 널리 알려졌거나 중요

한 최신 화약분자들의 실제적 수치를 참고 자료로 기입하고 본 연구에서 획득한 다양한 TNI 유도체를 그 그래프에 나타내어 새로 예측한 화약들의 유용성이나 성능-감도 전체적인 사용처들을 미리 파악할 수 있다.

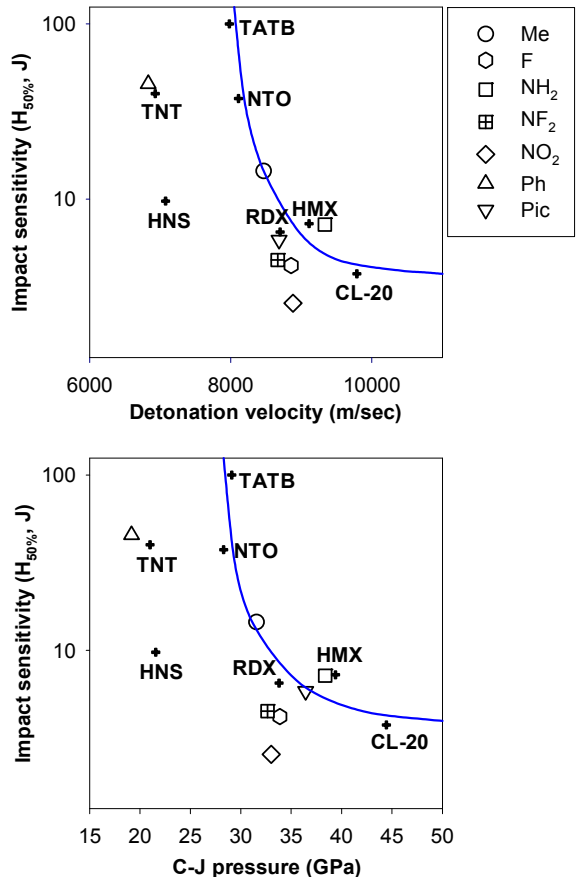


Fig. 8. 2D-plots between explosive performance (detonation velocity (top) and C-J pressure (bottom)) and impact sensitivity of 1-substituted TNIs

TNI(Pic), **TNI(NF₂)**, **TNI(F)**는 RDX와 성능은 비슷하지만 다소 민감하다고 할 수 있으며 복합화약과 같은 둔감화 과정을 통해 사용할 수 있을 것이다. **TNI(NO₂)**의 성능은 RDX보다 뛰어난 것으로 예측되지만 매우 민감하여 특별히 둔감화 과정을 거쳐야만 사용할 수 있을 것으로 보인다. 마지막으로 **TNI(Ph)**는 성능이 다른 치환체에 비해 상대적으로 낮지만, 매우 둔감한 특성을 보이고 TNT와 비슷한 특성을 보이는 것을 확인

할 수 있다. 따라서 필요에 따라 용융점이 낮은 경우 TNT를 대체할 수 있을 것이다.

추가적으로 두 그래프를 비교하여 보면 매우 유사한 것을 알 수 있다. 각 치환체들의 위치를 보았을 때 커브 우측에 있는 **TNI(NH₂)**가 HMX 정도의 성능과 둔감도를 보이는 우수한 화약이라고 할 수 있다. **TNI(Me)**는 곡선에 걸쳐있고, RDX와 비슷한 성능을 나타내면서 우수한 둔감도를 보여서 특정 목적에 따라 추구해볼 만한 가치가 있는 화약이라고 할 수 있다.

6. 결론

고성능 군용화약이 될 것을 예측되는 TNI의 1-유도체들에 대한 화약성능과 안전성을 이론적 연구를 통하여 합성하기 전 미리 스크리닝 작업을 수행하였다. 1-유도체로는 화약성능을 많이 희생하지 않으면서 안전성을 높일 수 있을 것으로 추정되는 메틸, 플루오로, 아미노, 다이플루오로아미노, 나이트로, 페닐, 그리고 피크릴기를 고려하였다. 이들 유도체에 대해 DFT 계산을 통해 가장 안정된 구조를 분석하였으며, 그 구조 하에서 화학적 특성치들을 계산하였다. 계산된 화학적 특성치들을 이용하여 화약성능의 지표인 폭발속도 및 C-J 압력을 예측하였으며, 인공지능신경망 방안으로 안전도 지표인 충격감도를 예측하였다. 또한 이차원 성능-감도 그래프 분석을 통하여 TNI 유도체들의 군용화약으로서 적용 가능성을 추정하였다.

분석 결과에 의하면 **TNI(Me)**는 RDX 보다는 다소 낮은 화약성능을 나타내지만 적절한 감도를 나타내고 있어 고성능화약군과 둔감화약군 중간 정도의 사용처가 필요한 경우 매우 적절한 후보물질이 될 것으로 추정된다. 반면 **TNI(NH₂)**, **TNI(F)**, **TNI(Pic)**, **TNI(NF₂)**의 경우 고성능 화약분자로 사용 가능할 것으로 추정되나 취급에 상당히 조심해야 하며 실제 합성되었을 경우 그 안전성에 성패 여부가 달려 있을 것으로 추정된다. 특히 **TNI(NO₂)**의 경우에는 충격감도가 매우 민감한 것으로 예측되어 일반화약보다는 기폭화약으로서의 응용성이 있을 것으로 추정된다.

References

[1] S. G. Cho, "A Systematic Procedure to Predict

Explosive Performance and Sensitivity of Novel High-Energy Molecules in ADD, ADD Method-1," In : Handbook of Material Science Research(Rene. C, Turcotte. E, Eds), Nova Publishers, 2010.

[2] H. S. Kim, "Basic Technologies for the Development of High Explosives," Korean Chem. Eng. Res, Vol. 44, No. 5, 435-443, 2006.

[3] C. K. Kim, B. J. Lee, C. H. Oh, H. W. Lee, K. H. Chung, K. J. Kim, C. H. Kim, and S. E. Park, "Final Report, the 2nd Stage, Design and Synthesis Laboratory, High Energy Material Research Center," Agency for Defense Development Report, ADDR-407-091115, 2009.

[4] S. G. Cho, E. M. Goh, "A Study on Generating a Database and Deriving an Efficient Methodology to Predict Heat of Formation of High-Energy Molecules," Agency for Defense Development Report, TEDC-519-021438, 2002.

[5] Y. F. Li, X. W. Fan, Z. Y. Wang and X. H. Ju, "A Density Functional Study of Substituted Pyrazole Derivatives," THEOCHEM, 896, 96-102, 2009.

[6] L. Türker, T. Atalar, S. Gümüş and Y. Çamur, "A DFT Study on Nitrotriazines," J. Hazard. Mat., 167, 440-448, 2009.

[7] L. Xiaohong, Z. Ruizhou and Z. Xianzhou, "Computational Study of Imidazole Derivative as High Energetic Materials," J. Hazard. Mat., 183, 622-631, 2010.

[8] X. Su, S. Cheng and S. Ge, "Theoretical Investigation on Structure and Properties of 2,4,5-Trinitroimidazole and Its Three Derivatives," THEOCHEM, 895, 44-51, 2009.

[9] P. Ravi, G. M. Gore, S. P. Tewari and A. K. Sikder, "Theoretical Studies on Amino- and Methyl-Substituted Trinitrodiazoles," J. Energ. Mat., 29, 209-227, 2011.

[10] Z. Yu, E. R. Bernstein, "On the Decomposition Mechanisms of New Imidazole-Based Energetic Materials," J. Phys. Chem. A, 117, 1756-1764, 2013.

[11] J. Li, "Relationships for the Impact Sensitivities of Energetic C-Nitro Compounds Based on Bond Dissociation Energy," J. Phy. Chem B, 114, 2198-

- 2202, 2010.
- [12] H. Chen, X. Cheng, Z. Ma and X. Su, "Theoretical Studies of C-bond Dissociation Energies for Chain Nitro Compounds," THEOCHEM, 807, 43-47, 2007.
- [13] X. Su, X. Cheng, C. Meng and X. Yuan, "Quantum Chemical Study on Nitroimidazole, Polynitroimidazole and Their Methyl Derivatives," J. Hazard. Mat., 161, 551-558, 2009.
- [14] W. J. Hehre, L. Radom, P. v. R. Schleyer, and J. A. Pople, "Ab Initio Molecular Orbital Theory," Wiley, New York, 1986.
- [15] M. J. Frisch, et al., "Gaussian 03, Revision D.02," Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2004.
- [16] A. R. Katritzky and A. F. Pozharskii, "Handbook of Heterocyclic Chemistry," Pergamon, Amsterdam, Netherland, pp. 91-140, 2000.
- [17] A. V. Kimmel, P. V. Sushko, A. L. Shluger and M. M. Kuklja, "Effect of Molecular and Lattice Structure on Hydrogen Transfer in Molecular Crystals of Diamino-dinitroethylene and Triamino-trinitrobenzene," J. Phys. Chem. A, 112, 4496-4500, 2008.
- [18] C. K. Kim, S. G. Cho, C. K. Kim, H.-Y. Park, H. Zhang and H. W. Lee, "Prediction of Densities for Solid Energetic Molecules with Molecular Surface Electrostatic Potentials," J. Comput. Chem., 29, 1818-1824, 2008.
- [19] J. Akhavan, "The Chemistry of Explosives," The Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, pp. 49-62, 2004.
- [20] M. Suceca, "EXPLO5 User's Guide," 2010
- [21] S. G. Cho, K. T. No, E. M. Goh, J. K. Kim, J. H. Shin, Y. D. Joo and S. Seong, "Optimization of Neural Networks Architecture for Impact Sensitivity of Energetic Materials," Bull. Korean. Chem. Soc., 26, 399-408, 2005.