

멀티스케일 모델링 기법을 이용한 고분자 mixed-matrix membrane 연구

박치훈[†]

경남과학기술대학교

(chpark@gntech.ac.kr[†])

멀티스케일 모델링 기법은 서로 다른 시간 및 크기 척도를 갖는 서로 다른 모델링 기술을 서로 접목하여 기존에 개별적인 모델링 기법을 통하여 얻어진 결과에 비하여 더 큰 모델을 더 오랜 시간 더 정확하게 관찰할 수 있는 기법으로서 2013년 노벨상을 수상하면서 기존 모델링 기술의 한계를 뛰어 넘을 수 있는 획기적인 기술로서 다시 한번 주목을 받았다. 본 연구에서는 이러한 멀티스케일 모델링 기법 중 하나인 분자동역학-메조스케일 시뮬레이션 기술을 이용하여, 기존 분자동역학에서 모델링하기에는 너무 큰 크기를 가지고 있는 탄소나노튜브가 고분자 분리막 내부에 어떻게 분산이 되는지를 예측하고, 이를 통하여 다양한 mixed-matrix membrane(MMM)을 제조하기 위한 연구를 진행하였다. 특히, 탄소나노튜브의 분산성을 향상시키기 위한 표면 개질이 실제 분산 및 MMM의 최종 모폴로지에 어떠한 영향을 미치는지를 모델링을 통해 예측하고, 이러한 계산 결과가 실제 실험을 통하여 제조된 MMM의 모폴로지와 거의 동일한 것을 확인할 수 있었으며, 추가적으로 탄소나노튜브의 함량에 따른 영향도 매우 정확하게 예측할 수 있었다. 따라서, 이를 통하여 실제 실험 결과를 통해서만 얻을 수 있는 고분자 분리막의 최종 모폴로지 및 특성을 trial and error 과정 없이 모델링을 통해 예측할 수 있다는 것을 증명할 수 있었다.