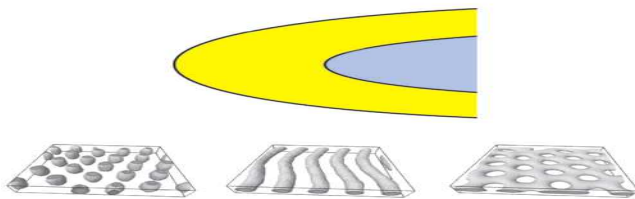


에너지-환경 분야용 분리막의 Mesoscale Simulation 동향 연구

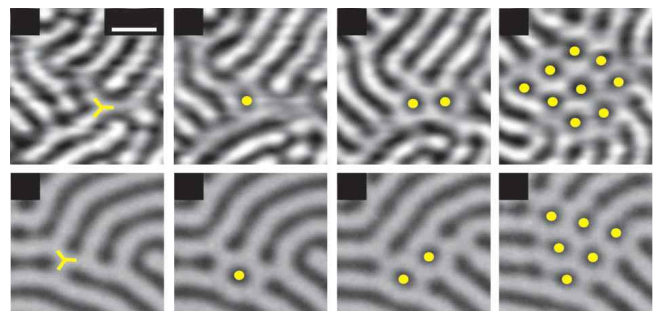
Mesoscale simulation은 원자의 그룹을 묶어서 하나의 단위로서 계산을 수행하는 전산모사 기술로 ns~ μ s의 시간 및 nm~ μ m의 크기까지 모사가 가능하다. 이러한, mesoscale simulation에는 (1) 입자 자체의 움직임을 계산하여 시스템을 모사하는 particle-based mesoscale, (2) 입자의 움직임이 아닌 chemical potential field나 density field 등의 변화를 계산하여 시스템을 모사하는 field theory 등의 방법 등이 있는데, 두 방법 모두 고분자의 거시적 특성을 살펴보기 위한 강력한 전산모사 기술로서, 에너지-환경 분야용 고분자 분리막의 다양한 응용분야에서 활용되고 있다. 기존에는 주로 블록 공중합체 분야에서 연구결과들이 보고되었으나, 최근 들어 실제 고분자 분리막의 제조 조건 등을 모사한 연구 결과와 같이 좀 더 응용 분야에 가까운 다양한 에너지-환경용 고분자 분리막 관련 연구가 진행되고 있다. 이온 교환막의 경우에는 이온 전달 채널 형성을 분석 및 예측하기 위한 다양한 mesoscale simulation 결과들이 발표되고 있고, 최근에는 CNT, graphene 등의 나노 첨가물 소재에 대한 연구도 활발히 진행되고 있다. 본 총설에서는 mesoscale simulation 관련 연구에 대한 동향을 정리하고, 어떤 분야에서 유용하게 활용 가능한지 제시하며, 에너지-환경 분야에 종사하는 분리막 연구자들이 mesoscale simulation 기술에 좀 더 쉽게 다가갈 수 있는 기회를 제공하고자 한다

키워드

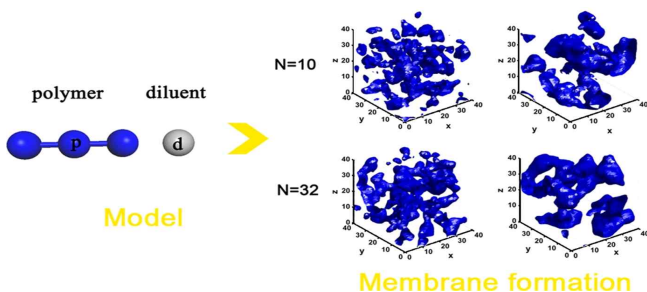
Energy & Environment, Polymeric membranes, Molecular simulation, Mesoscale simulation



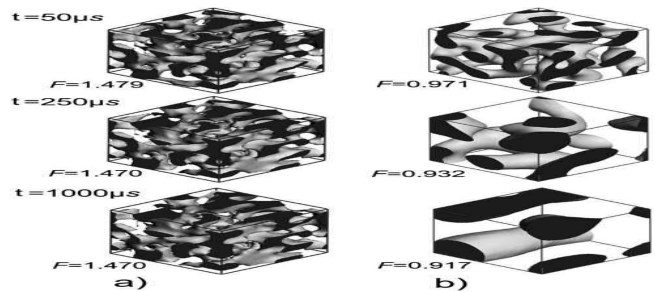
[폴리스티렌-블록-폴리부타디엔-블록-폴리스티렌 블록 공중합체의 막상 상도]



[천공 라멜라 상을 형성하는 천공 클러스터의 핵 생성 및 성장(상부: SFM 이미지로부터의 스냅샷, lower: 중간 규모 시뮬레이션 결과의 영상)]



[DPD 시뮬레이션에 의한 상이한 고분자 사슬 길이에 따른 형태학적 변화]



[DDFT 실험 중 수분 함유 sPEK-60(왼쪽 열)과 Nafion(오른쪽 열)의 구조적 진화를 보여주는 스냅샷]

원 제 목	에너지-환경 분야용 분리막의 MesoScale Simulation 동향 연구
출 처	Membrane Journal
원 저 자	박 치훈, 남 상웅