

컴퓨터와 고분자

특집 기획 방 대 석

언뜻 생각하기에 컴퓨터와 고분자는 서로 무관하리라 여겨지지만, 사실 많은 고분자 관련 연구 분야에서 컴퓨터는 유용한 도구로 사용되고 있다.

고분자 물성분야 연구에서의 컴퓨터 모사에 의한 분자 모델링은 고분자 물질의 분자적 견지에서 미시적 정보를 계산을 통하여 얻어내고, 이를 통계역학적 방법을 사용하여 해석함으로써 최종적으로 물질의 거시적 성질(기계적 성질, permeability, 3차원구조정보, miscibility/compatibility 등)에 대한 정보를 얻어낼 수 있으며 아울러 원하는 성질을 갖는 물질을 설계할 수 있게 한다. 이는 시간과 경비를 크게 줄이면서 실제 실험 결과를 체계적으로 해석하는데 커다란 도움을 주며, 새로운 현상을 예측할 수 있게 한다. 컴퓨터 모사에 의한 분자 모델링은 초기 단계에는 학계나 일부 선진 연구그룹에서 개별적으로 이용되어 왔으나, 현재에는 상품화된 소프트웨어의 개발을 통하여 수많은 연구원들이 손쉽게 이용할 수 있게 되었다.

고분자 가공분야인 사출성형은 가장 널리 사용되는 고분자 물질의 가공 방식으로 국내외에서 제품을 개발하기 위한 많은 인적 물적 경비와 시간을 투자하고 있다. 이에 수반하여 사출성형에 컴퓨터를 이용한 CAE(Computer Aided Engineering)의 적용으로 기존의 비효율적인 방식보다 시행착오를 최소화할 수 있고, 최적 설계를 통한 제품의 품질과 신뢰성을 향상시킬 수 있게 되었다. 한편 압출공정에서도 컴퓨터 모델링에 의한 스크류 디자인 등을 통하여 공정을 향상시키기 위한 연구가 활발히 진행되고 있으며, 현재 많은 상용 소프트웨어들이 개발되어 사용자들이 손쉽게 이용할 수 있다.

컴퓨터를 이용한 연구는 간단한 조작을 통하여 비교적 결과를 손쉽게 분석, 예측할 수 있으며, 시행착오 방식에 의존하는 많은 실험빈도를 줄일 수 있고, 시간, 비용 및 인력을 절약할 수 있으므로, 상기 고분자 관련 분야 뿐만이 아니라 다양한 학문 분야에서 활발히 응용되고 있다. 현재 과학 및 공학 문제를 컴퓨터를 이용하여 수치적으로 풀아가는 이른바 계산 과학 및 공학 분야의 연평균 성장률은 약 30~50%로 급성장하고 있으며, 이는 컴퓨터를 이용한 연구 자체가 갖는 생산성과 경제성이 주목받고 있음을 반영하는 것이라 할 수 있다. 따라서 아직까지 고분자 관련 연구에서 컴퓨터 모사의 활용이 미진한 국내 상황을 비추어 볼 때 앞으로 학계와 고분자 산업체의 많은 관심이 요망된다.

끝으로 본 특집을 위해 원고를 집필해 주신 여러분께 진심으로 감사드리며, 이 분야에 관심이 있는 분에게 좋은 참고자료가 되기를 바란다.



방대석

1987 연세대학교 화학공학과(학사)
1989 Univ. of Detroit 화학공학과(석사)
1996 The Univ. of Akron 고분자공학과(박사)
1996~ 금오공과대학교 고분자·섬유디
현재 자인공학부 전임강사