

# 컴퓨터 모사에 의한 폴리에스테르 블렌드 계에서의 에스테르 교환반응의 해석

장승순, 하완식

서울대학교 섬유고분자공학과

크기가  $80 \times 80 \times 80$ 인 simple cubic lattice model을 설정하고, 연쇄의 운동을 reptation, 연쇄간의 반응을 end attack 및 bondflip으로 하여 고분자 연쇄의 운동과 반응을 모사한 Monte Carlo 법을 도입하여 이종의 폴리에스테르의 용융 블렌드 계를 고찰하였다. 축합중합에 의하여 생성되는 중합체의 분자량이 최확분포를 한다는 Flory의 이론과 이 연구에서의 모사 결과와 비교함으로써 사용한 모델의 적합성을 판정하였다. 평균 분자량 및 혼합비를 달리한 이종의 폴리에스테르 간의 에스테르 교환반응을 컴퓨터로 모사하여 수평균 시퀀스 길이와 랜덤화도의 변화를 계산하였고, 이를 통하여 분자량 및 혼합비가 생성 공중합체의 성질에 미치는 영향을 고찰하였다.