

# 컴퓨터 모사에 의한 축합중합 반응계의 해석

장승순, 하완식

서울대학교 섬유고분자공학과

에스테르계 축합중합 반응계 내에서는 중합반응 외에도 end attack, bond flip, back bite의 에스테르 교환반응과 열분해 등에 기인한 chain scission이 일어난다. 크기가  $50 \times 50 \times 50$ 인 simple cubic lattice model 가운데에서 연쇄운동으로서 reptation을 허용하고 위의 각종 반응을 활성화 에너지에 따라 일어나도록 하는 dynamic Monte Carlo 법을 통해 축합중합 반응계를 고찰하였다.

중합계에 있어서 분자량분포와 분자량 증가 속도 등의 특성은 위의 반응들의 활성화 에너지의 상대적 비에 의해 영향받게 되므로 반응 활성화 에너지의 다양한 조합과 반응조건의 변화에 대한 컴퓨터 모사를 통해 그 영향과 정도를 해석하였다.

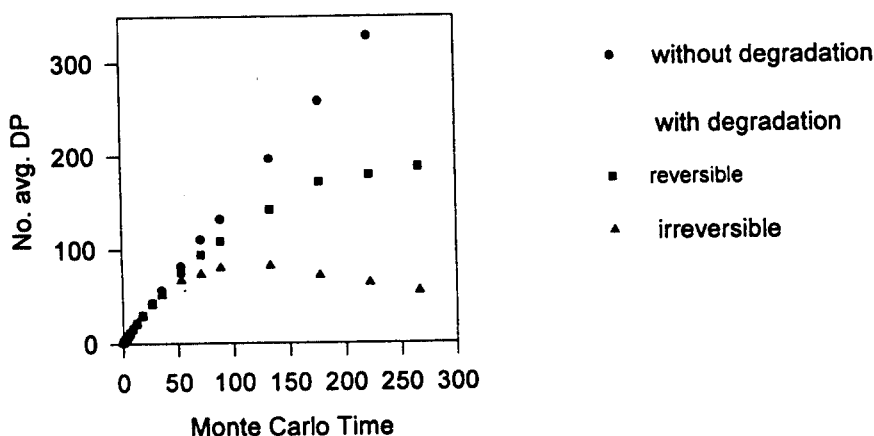


Fig.1. The change of the number average DP with Monte Carlo time.