

DPD 기법을 이용한 고분자 코팅물질의
점도 계산 및 압출공정으로의 적용

조형태, 박찬호, 정원복¹, 이근득², 박정수², 문 일[†]
연세대학교; ¹(주) 한화 종합연구소; ²국방과학연구소
(htcho@yonsei.ac.kr[†])

고폭 화약은 성능이 우수하면서도 무기 제조를 위하여 외부 자극에 둔감한 안정성을 가져야 한다. 나노 수준의 RDX결정은 넓은 표면적으로 인하여 표면 에너지가 크기 때문에 표면 코팅 과정이 필요하다. 따라서 EVA (ethylene vinylacetate) 고분자를 이용한 RDX 입자 코팅 공정 모델 개발 연구가 진행 중이며, 공정 모델링에 필요한 고분자의 점도 또는 고분자와 particle 혼합물의 점도를 분자 모델링을 통해 계산 후 공정 모델링에 적용 하고자 한다. 본 연구에서는 굵은 입자 모델을 이용하는 중규모 동역학 (coarse-grained dynamics, CGD) simulation과 소산성 입자 동역학 (dissipative particle dynamics, DPD) simulation을 통하여 EVA 고분자의 점도를 계산하였다. DPD는 분자들을 CGD단위체로 슈퍼입자(구슬, bead) 모델화하여 상호작용 간소화를 통해 MD의 시공간을 마이크로 수준까지 비약적으로 증대한 방법으로, 분리 현상, 상평형 및 상변이의 직접적인 관찰이 가능하고, 유체의 유변학적 거동연구가 용이하다. 이를 통하여 실험에 의한 측정이 어렵고 신뢰성이 떨어지는 범위에서의 점도를 계산하여 점도 모델을 구축하고 코팅 공정 모델링에 적용하여 공정 모델링의 신뢰성을 높이고자 한다.
감사의 글: 본 연구는 (주)한화와 국방과학연구소의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사 드립니다. (계약번호: UC120019GD)