

생분해성 고흡수 수지 (Biodegradable Superabsorbent Polymer) 생산 공정 설계에 적용을 위한
물성 예측 패키지 개발

배영찬[†]

한양대학교 화학공학과

(ycbae@hanyang.ac.kr[†])

고흡수성 수지 (SAP) 및 생분해성 수지에 대한 팽윤도 및 분해도 물성 예측 시뮬레이션패키지 개발을 위하여 분자를 구성하는 구조에 대한 기여도를 고려하는 Group Contribution (GC) Method를 도입하였다. GC 계산의 정확도는 사용되는 열역학적 모델의 선택에 크게 의존한다. 그러므로, 본 연구실에서 사용하던 modified double lattice (MDL) 모델을 기본으로 이용하여, 복잡한 형태의 고분자/용매 간의 상호작용 에너지를 고려하기 위해 Sanchez의 association 이론을 결합한 개선된 모델을 개발하였다. Group Parameter들은 개선된 MDL 모델을 이용해 분자 상호작용 에너지 기여도를 계산하고 modified Flory-Rehner 모델을 이용하여 고분자 네트워크의 탄성을 고려해 준 열역학 모델을 기반으로 Homopolymer, Copolymer 젤 시스템에 대한 실험결과로부터 산출되었다. 또한 고흡수성 수지 이용의 주요 변수인 염 (salt)의 영향을 계산하기 위하여, salt-specific 상호작용 parameter를 도입하였다. 위 계산 방법을 이용한 계산 결과는 고흡수성 수지 및 하이드로젤 시스템의 팽윤 실험 결과와 뛰어난 일치성을 보인다.