

POLYMER SCIENCE and TECHNOLOGY

전산모사를 통한 고분자/유기 시스템의 이해

(Understanding Polymer/Organic Systems through Computational Modeling)



이태경(Tae Kyung Lee)

2014 울산과학기술원 화학공학과 (학사)
 2020 울산과학기술원 화학공학과 (박사)
 2022 한국에너지기술연구원 선임연구원
 현재 경성국립대학교 나노신소재융합공학과 조교수



황혜림(Hyerim Hwang)

2009 고려대학교 화공생명공학과 (학사)
 2011 한국과학기술원 생명화학공학과 (석사)
 2016 Harvard University 응용물리학과 (박사)
 2020 한국표준과학연구원 박사후연구원
 현재 이화여자대학교 화공신소재공학과 조교수

현대의 컴퓨터 성능과 다양한 시뮬레이션 기법의 발전으로 인해 전산모사는 단순히 이론 및 실험 검증을 위한 보조적 도구에서 벗어나 독립적인 연구 분야로 자리 잡게 되었습니다. 이에 따라 계산을 통한 예측 영역이 점진적으로 확대되고 있으며, 이러한 발전은 다양한 분야에서의 응용 가능성을 넓혀가고 있습니다. 특히, 넓은 범위의 시간/공간 스케일과 복잡한 상호작용으로 인해 모델링 및 전산모사가 어려운 고분자에 대해서도 다양한 시뮬레이션의 조건 확립을 통해 현상의 구현과 높은 정확도의 성능 예측이 가능해졌으며, 이에 실험적인 구현 또는 직접 관찰이 어려웠던 현상들에 대한 메커니즘 이해에 보다 더 접근할 수 있게 되었습니다. 거시 물성 데이터 기반의 현상학적 추론에 의존할 수 밖에 없었던 현상들에 대한 원자·분자 단위에서의 거동 분석을 통해 핵심 메커니즘을 규명할 수 있게 되었습니다. 이러한 발전은 미래에 더욱 정교한 시뮬레이션과 예측 기술을 통해 다양한 분야에서의 혁신적인 발전을 이끌어 낼 것으로 기대됩니다.

본 특집에서는 다양한 고분자/유기 재료의 전산모사 연구 중에서도 최근 주목 받고 있는 생체고분자와 리튬이온 이차전지용 전해질 연구에 대해 소개드리고자 합니다. 이와 더불어, 고분자 시스템 모델링을 위한 독특한 방법의 예로서 Materials Studio와 콜로이드를 활용한 연구에 대해서 소개하고자 합니다.

본 특집이 전산모사를 통한 다양한 고분자/유기 시스템의 이해에 관심이 높은 연구자들에게 유용한 자료가 될 수 있기를 바랍니다. 마지막으로, 바쁜 일정에도 본 특집을 위해 귀중한 원고를 집필해주신 저자분들께 깊은 감사의 마음을 전합니다.

