

분자동역학을 이용한 분리막용 소재로 사용되는 고분자 소재의 신장거동 연구

강 호 성 · 박 치 훈[†]

경상국립대학교 미래융복합기술연구소 에너지공학과

(2022년 1월 31일 접수, 2022년 2월 12일 수정, 2022년 2월 12일 채택)

Elongation Behavior of Polymeric Materials for Membrane Applications Using Molecular Dynamics

Hoseong Kang and Chi Hoon Park[†]

Department of Energy Engineering, Future Convergence Technology Research Institute,

Gyeongsang National University (GNU), Gyeongnam 52725, Republic of Korea

(Received January 31, 2022, Revised February 12, 2022, Accepted February 12, 2022)

요 약: 최근 들어 컴퓨터 및 소프트웨어 기술의 발달로 전산모사 관련 연구가 급격하게 늘어나고 있는데, 특히 원자의 개수 및 모델 크기의 문제로 기존에는 많은 제약을 받던 고분자 관련 다양한 전산모사 결과들이 발표되고 있다. 본 연구에서는 고분자 소재를 필름형태의 분리막으로 활용하기 위한 중요한 특성 중 하나인 기계적 특성을 분자동역학 전산모사를 이용하여 분석하고자 하는 연구를 진행하였다. 이를 위하여 이미 관련 물성이 널리 보고되어 있는 상용 고분자 소재인 polyethylene (PE)과 polystyrene (PS)을 대상으로 선정하여 주쇄길이 차이를 통한 각 고분자들의 인장특성을 비교하였고, 최종적으로 분자동역학 전산모사의 기계적 특성 분석이 적합한지 확인하고자 하였다. 밀도, radius of gyration, scattering 분석을 통해 본 연구에서 제작된 모델이 실제 실험에서 얻어진 기계적 특성 경향과 잘 일치함을 알 수 있었고, 따라서 분자동역학 전산모사를 이용한 기계적 특성 분석이 다양한 고분자 소재들의 분자 구조에 따른 기계적 특성을 예측할 수 있게 해주며, 실제 실험에서는 적용하기 어려운 다양한 변수들을 반영한 기계적 특성 해석도 가능하게 해 줄 것으로 기대된다.

Abstract: Recently, computer simulation research has been rapidly increasing due to the development of computer and software technology. In particular, various computational simulation results related to polymers, which were previously limited by problems of the number of atoms and model size, are being published. In this study, a study was conducted to analyze the mechanical properties, one of the important properties for using a polymer material as a membrane, using molecular dynamics (MD) simulation. To this end, polyethylene (PE) and polystyrene (PS), which are commercial polymer materials with widely reported related properties, were selected as polymer models and the tensile properties of each polymer were compared through the difference in main chain length. Through the density, radius of gyration, and scattering analysis, it was found that the model produced in this study was in good agreement with the mechanical property trends obtained in the actual experiment. It is expected to enable the prediction of mechanical properties of various polymer materials for membrane fabrication.

Keywords: computer simulation, molecular dynamics, mechanical properties, polymer materials

1. 서 론

최근 고성능의 컴퓨터 하드웨어 및 소프트웨어의 발달로 인하여 소재 전산모사, 3D 모델링, 인공지능과 같은

첨단 기술 분야에서의 활용도가 더욱 높아졌다. 특히, 분자동역학 전산모사는 원자와 원자의 화학결합을 스프링과 같은 다양한 움직임으로 해석하여 계산하기 때 문에, 원자들의 개수가 늘어나면 계산량이 급격하게 늘

[†]Corresponding author(e-mail: chp@gnu.ac.kr; <http://orcid.org/0000-0002-5601-065X>)

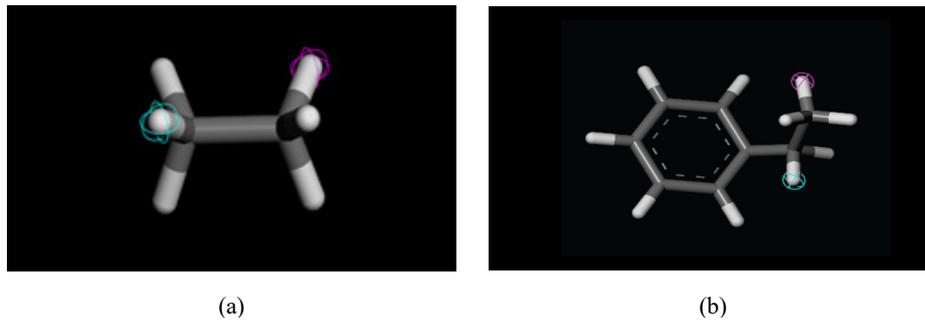


Fig. 1. 3D images of repeat units used in this study. (a) polyethylene (PE) and (b) polystyrene (PS).

어나게 된다[1-3]. 과거에는 분자동역학 전산모사에서 고분자 소재의 분자량을 반영하여 계산을 하게 되면 너무나 많은 시간이 소모된다는 단점이 있었기 때문에 본래의 분자량보다 훨씬 적게 조절하여 계산을 하였고, 이로 인하여 고분자의 특성을 충분히 반영하지 못할 가능성이 있었다. 이러한 상황에서 컴퓨터 하드웨어 성능 향상 및 소프트웨어의 발전은 고분자 분야에서 분자동역학 전산모사 연구가 급격하게 늘어난 배경이 되었다 [4-9].

고분자를 필름형태의 분리막으로 활용하기 위해서는 고분자 소재의 특성 중 하나인 기계적인 특성이 매우 중요하다. 기계적 특성은 외부에서 응력이 가했을 때 고분자가 늘어나거나 구부러지는 물리적 현상으로 주요 특성은 강도(strength), 연신율(ultimate elongation), 영률(young's modulus)이 있으며, 반결정성 고분자에서 강도(strength)를 포함한 전반적인 기계적 특성에 영향을 미치는 물리적 요인은 분자량(molecular weight), 가교(cross-linked morphology), 결정화도(degree of crystallinity)가 있다[10-12]. 고분자의 기계적 특성 분석 중 가장 많이 사용되어지는 방법은 일축 인장을 통한 인장 강도(tensile strength), 영률 신율(young's modulus elongation) 측정법이 있다. 분자동역학 전산모사에서는 원자와 원자의 화학결합을 다양한 움직임을 정리한 force-field를 통해 계산하기 때문에 외부 응력 하에서 일어나는 분자 구조의 기계적 거동 및 분자 구조를 계산하는데 매우 적합하다. 본 연구에서는 실제 분자동역학 전산모사를 이용하여 고분자의 분자량 및 고분자 주쇄 길이가 기계적 특성에 미치는 영향을 살펴보기 위해, 필름 형태의 막으로 널리 쓰이는 상용 고분자인 polyethylene (PE), polystyrene (PS)[13, 14]를 모사 대상으로 선정하여 기계적 특성을 분석하였으며, 실제 분자동역학 전산모사 기술이 고분자소재의 기계적 특성을 연구하는 데

적합한지 살펴보고자 하였다.

2. 전산모사

2.1. 3D 모델 제작

본 연구에서는 분자동역학을 이용하여 기계적 특성 분석을 위한 3D 모델을 제작하였고, BIOVIA사(Dassault Systemes, USA)의 Materials Studio 소프트웨어를 사용하여 연구를 수행하였다. 모든 계산에서 force-field는 COMPASSIII (Condensed-phase Optimized Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies III)[15-18]를 사용하였다. Fig. 1은 고분자 모델로 사용된 polyethylene (PE)과 polystyrene (PS)의 반복단위 분자구조를 보여주고 있다. 이들 고분자 주쇄 구조를 안정화시키기 위해 geometry optimization을 수행하였고, 안정화된 구조를 바탕으로 분자량 차이 및 주쇄 길이 따른 기계적 특성 변화를 보기 위해 분자량 25,000, 50,000을 갖는 amorphous 3D 모델을 생성하였으며, 분자량 25,000 주쇄 2개로 이루어진 모델과 분자량 7,000 주쇄 7개로 이루어진 모델을 분자량 50,000에 맞추어 제작하였다. 이후 amorphous 3D model의 구조안정화를 위하여 geometry optimization을 수행하여 안정화된 3D amorphous model을 제작하였다. 이렇게 생성된 3D 모델들을 annealing process를 진행하여 최종적으로 기계적 특성을 분석하기 위한 고분자 3D 모델을 얻을 수 있었다. 이후 고분자의 기계적 물성을 분석하기 위하여, 일축 인장 MD 전산모사를 수행하였다. 앞서 제작된 3D 모델들을 Materials Studio의 forcite 모듈을 통해 1ns, NPT 조건에서 진행하였다. 이때 Fig. 2과 같이 한쪽 축으로 인장을 시키면서 이에 따라서 나머지 두 축 방향으로의 압축이 일어날 수 있도록 하였으며, 이를 통하여 실제 실험과 유사하게 고분자의 물리적 변화가 일어날 수 있도록

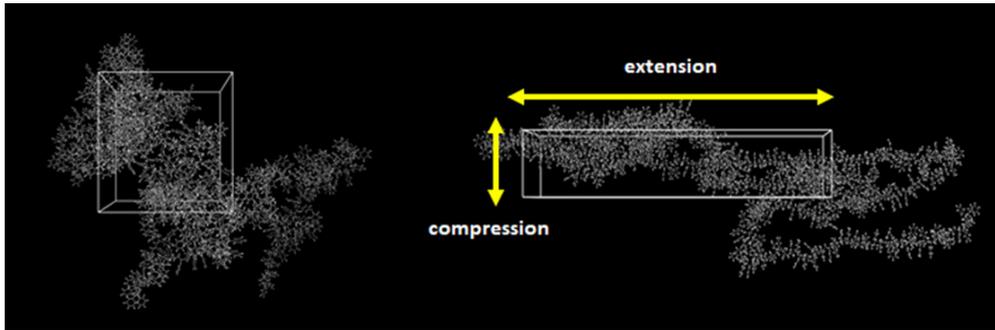


Fig. 2. Tensile simulation method using extension and compression.

록 하였다.

2.2. Radius of gyration

고분자는 일반적으로 무한한 수의 공간적 배열 형태를 가질 수 있기 때문에 사슬 구성 형태는 통계적 평균으로 나타낸다. 이 때 사슬 구성을 지정하는 데 사용되는 매개 변수의 두 가지 예는 종단 간 거리의 분포와 모멘트 및 회전 반경이다. 종단 간 거리는 단일 사슬의 경우 다음과 같이 정의할 수 있는 종단 간 벡터 r 의 길이와 같다.

$$r = \sum_{(i=1)}^n l_i \tag{1}$$

여기서 l_i 은 백본 결합 i 를 따라 벡터를 나타내고 n 은 분자의 백본 결합 수를 나타낸다. 회전 반경 s 는 분자의 공통 질량 중심으로부터 분자 원자의 제곱 평균 제곱근 거리 즉, 아래와 같이 표현한다.

$$s^2 = \frac{\sum_{(i=1)}^N m_i s_i^2}{\sum_{(i=1)}^N m_i} \tag{2}$$

여기서 s_i 는 질량 중심에서 원자 i 의 거리를 나타내고 N 은 총 원자 수를 나타낸다[19].

2.3. X-ray scattering analysis

분자동역학 전산모사의 Scattering 분석은 원자 구조의 다양한 측면을 보여줄 수 있다. 전자, X-선 및 중성자의 소스는 파장 $0.01 \text{ \AA} < \lambda < \sim 3 \text{ \AA}$ 에서 사용할 수 있으며 물질의 구조를 분석하는 데 널리 사용된다. 각 방사선 유형을 다르게 선택하더라도, 산란 특성을 설명하는데 사용되는 방식은 유사하다. 원자 산란 능력은

방사선이 산란되는 방향에 따라 달라질 수 있는 원자 산란 인자, f_E, f_X, f_N 에 의해 설명된다. 산란 패턴은 산란 중심의 분포에 따라 달라지는데, 원자 간 간격은 방사선 파장과 비슷하기 때문에, 한 원자로부터 주어진 방향으로의 산란은 분자 또는 확장 구조의 다른 원자에 의해 동일한 방향으로 산란하는 것과 위상 차이가 있다. 측정 가능한 산란은 모든 원자 중심으로부터의 산란 사이의 간섭 패턴을 반영한다. 따라서 주어진 구조로부터의 산란 전산모사는 위상 상호관계에 대한 적절한 정의를 필요로 하며, 따라서 산란벡터 Q 에 대한 각 원자 간 벡터 r_{ik} 의 정의를 필요로 한다. 일반적인 산란 방정식은 다음과 같다[20].

$$I(Q) = \sum_j \sum_k f_j(Q) f_k(Q) \exp(i \underline{r}_{jk} \cdot Q) \tag{3}$$

3. 결과 및 고찰

3.1. 모델 검증

본 연구는 필름형태의 막으로 자주 쓰이는 소재인 상용 PE와 PS를 Fig. 1과 같이 repeat unit으로 설정하여 Fig. 3과 같은 고분자 구조를 만든 후 3D 모델을 만들어 일축 인장의 전산모사를 진행하였다. 이와 같이 제작된 모델들이 적절하게 제작되었는지 확인하기 위해 Scattering-XRD 분석을 통하여 실제 실험결과의 경향과 비교하였다. 3D 모델을 제작할 때 NVT 방식으로 제작을 하였을 때 실험결과를 바탕으로 PE의 밀도는 0.925 g/cm^3 , PS의 밀도는 1.04 g/cm^3 로 각각 설정하였다[21, 22]. Fig. 4는 분자동역학 전산모사를 통해 얻어진 PE와 PS 모델의 Scattering 분석을 통하여 XRD pattern을 나타낸 것으로 본 연구에서 계산된 scattering 결과와 실제 실험에서 얻어진 결과와 상당히 유사한

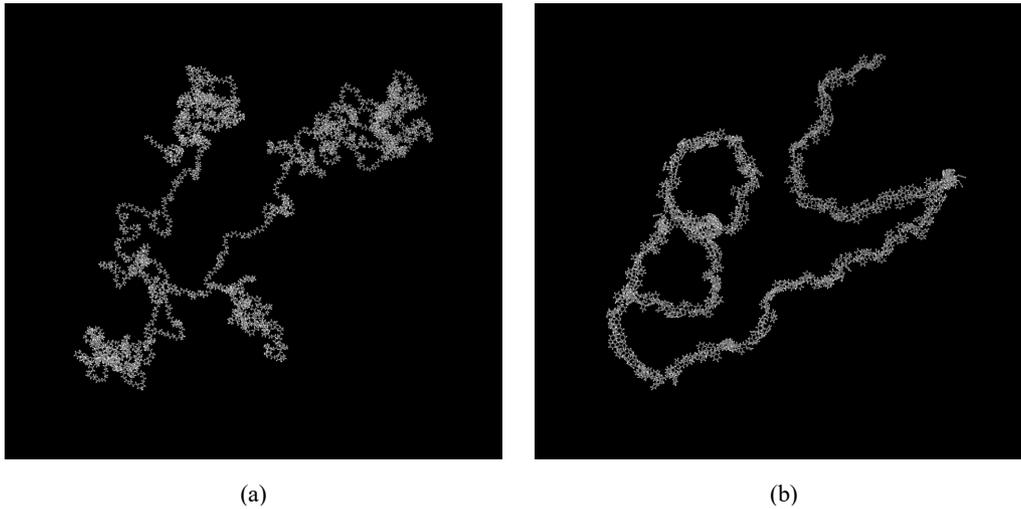


Fig. 3. 3D images of polymer chains used in this study. (a) polyethylene (PE) and (b) polystyrene (PS).

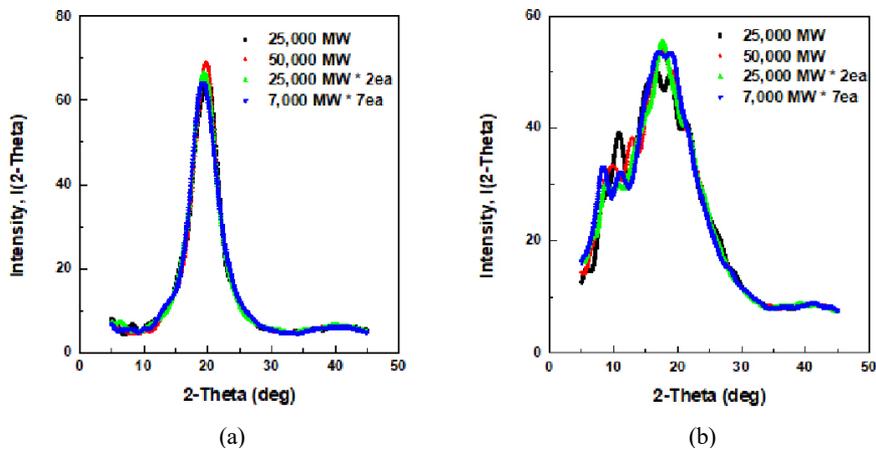


Fig. 4. Scattering-XRD patterns of (a) polyethylene (PE) and (b) polystyrene (PS).

peak가 나타났다[23, 24]. PE의 경우 주쇄에 따로 도입된 작용기가 없기 때문에, 벤젠링이 주쇄에 작용기로 달려있는 PS에 비하여 상대적으로 높은 패킹 효율을 나타내고 따라서 훨씬 좁은 폭의 XRD 패턴을 보였으며, 이러한 결과는 실험에서 얻어진 결과와 일치하였다. 다만, 실제 실험에 비하면 상대적으로 작은 고분자 주쇄의 길이 및 모델 크기로 인하여 매끈하지 못하고 불규칙한 노이즈 패턴이 일부 관찰이 되었으며, 이는 작용기가 도입되어 있는 PS에서 더 두드러지게 나타났다. 그러나, 전체적인 경향으로 판단했을 때, 밀도 수치와 scattering 분석을 통해 얻어진 결과는 본 연구에서 일축 인장 전산모사를 위해 제작된 한 PE와 PS 모델이 적합하다는 결론을 내릴 수 있었다.

3.2. 기계적 특성 전산모사

우선 인장강도 전산모사 진행 중에 외부응력이 변화됨에 따라 밀도가 어떻게 변하는지 살펴보았다. Fig. 5에서 PE 모델에 일축 인장이 가해짐에 따라 각 step마다 밀도가 어떻게 변하는지 관찰하였다. 초기에는 인장이 가해짐에 따라 밀도 값이 큰 변화 없이 유지하는 것을 관찰할 수 있었는데, 이는 초기 PE 모델의 분자들이 인장 대하여 적절하게 재배열이 되며 이 구간에서는 내부에 빈공간이 생기거나 끊어지는 mechanical failure가 나타나지 않는 것을 알 수 있었다. 그러나, 이러한 밀도 유지상태는 50번째 frame 전후로 유지가 되다가 급격히 감소하는 경향을 나타내는데, 이는 PE 소재 모델 내부의 분자들이 응력을 더는 견뎌내지 못하고 mechanical failure 현상이 생기기 시작하는 것으로 파악된다.

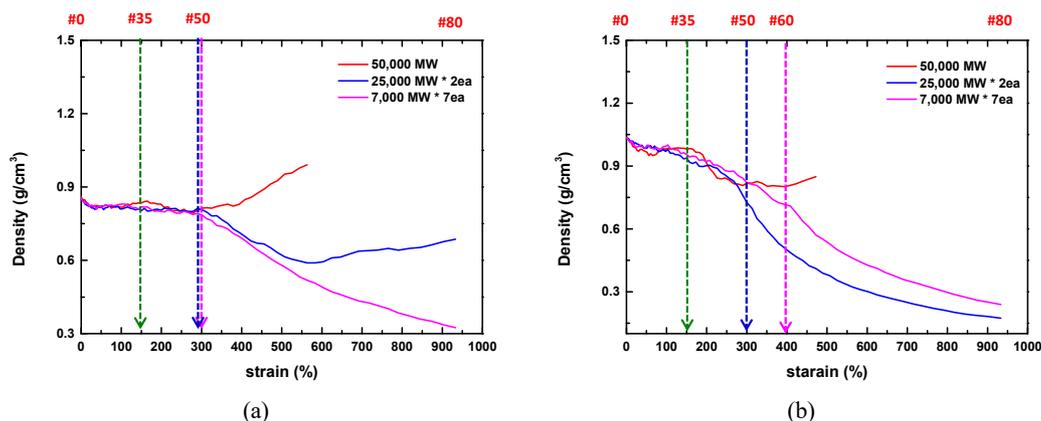
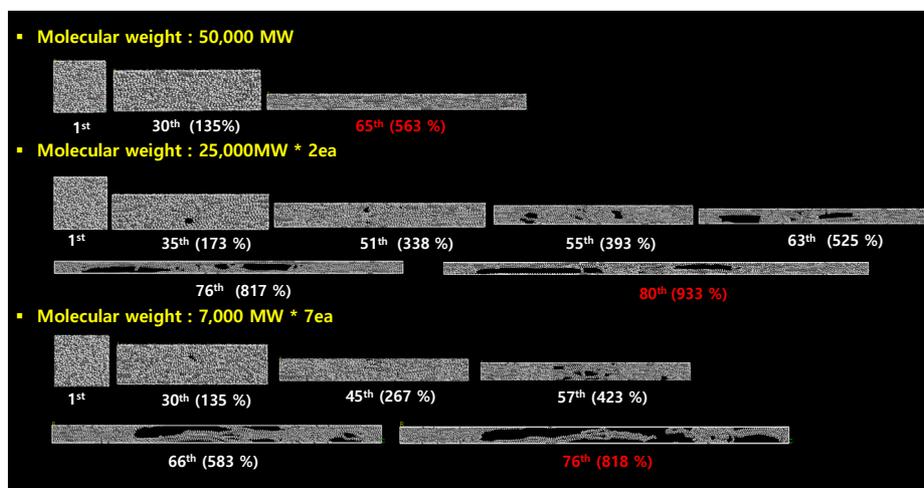
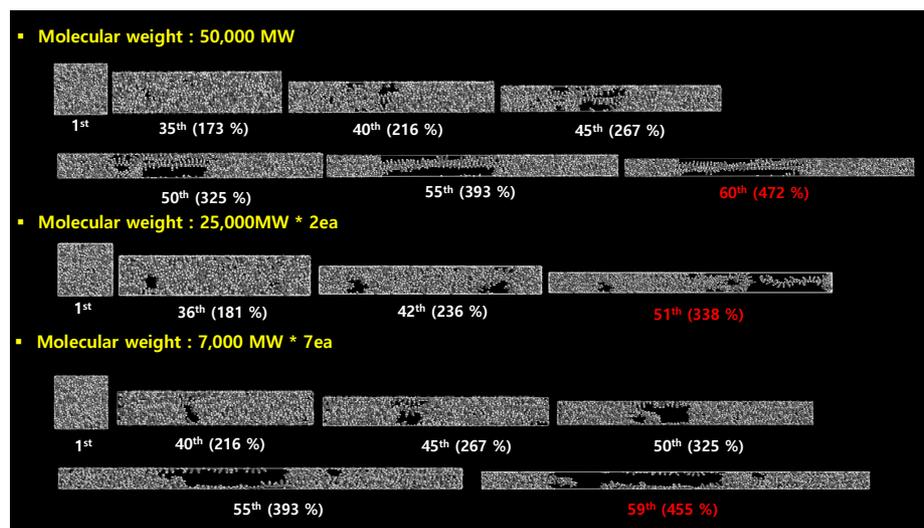


Fig. 5. Density profiles of (a) polyethylene (PE) and (b) polystyrene (PS) during elongation simulation. The frame number is written in red color on the top.



(a)



(b)

Fig. 6. Tensile simulation images of (a) polyethylene (PE) and (b) polystyrene (PS) during elongation simulation.

그러나 분자량 50,000의 PE 모델의 경우 오히려 밀도가 증가하는 비정상적인 거동을 관찰할 수 있었는데, 이는 한 개의 주쇄로만 이루어졌기 때문에 3D 모델 내부의 분자들이 압력에 대해 변형이 일어나는 중에도 실제 고분자에서 일어날 수 있는 주쇄 간의 벌어짐, 즉 내부 공간 생성 및 끊어지는 현상이 일어나지 못하고 오히려 packing된 상태로 계속 눌러지지만 하다가, 65 frame 이후로는 분자들이 더 이상 재배열조차 불가능해 분자의 내부 에너지가 비정상적으로 증가하면서 인장이 종료된 것으로 분석되었다. 이는 실제 고분자 소재에서는 발생하기 어려운 비정상적인 결과이며, 따라서 인장 거동 전산모사와 같은 기계적 특성을 분석하기 위한 모델의 경우 하나의 주쇄로만 이루어진 모델은 적절치 않으며 3D 모델 크기가 커지더라도 주쇄의 개수를 증가시켜야만 정확한 결과를 얻을 수 있다는 결론을 얻을 수 있었다. PS의 경우[Fig. 5(b)], 밀도가 30번째 frame 전후로 유지가 되다가 급격히 감소하는 경향이 나타났으며, 이 역시 PS 모델 내부의 분자들이 외부 응력을 버티지 못하고 mechanical failure가 일어난 것이 관찰되었다. PE와 마찬가지로 PS 모델 역시 한 개의 주쇄로 이루어진 분자량 50,000 모델에서 50번째 frame 이후 밀도가 증가하는 비정상적인 거동을 볼 수 있었으며 이는 PE와 동일하게 외부응력에 대해 분자들이 배열되는 것이 불가능하여 비정상 종료된 것으로 판단된다.

일축 인장에 따른 분자들의 재배열은 Fig. 6을 확인하면 명확하게 알 수 있다. PE의 경우 각 모델들은 인장 전에 3D구조를 유지하다가, 일축 인장이 진행되면서 한쪽 방향으로 분자구조가 늘어나기 시작한다. 분자량 25,000의 주쇄 2개로 구성된 PE 고분자 모델은 35번째 frame에서 작은 빈공간이 생기는 것을 제외하고는 밀도의 변화가 거의 없는 50 frame까지는 높은 신장율에도 불구하고 내부의 분자구조에 큰 변화가 관찰되지 않았다. 그러나, 밀도 감소가 시작된 후의 50번째 frame에서는 PE 모델 내부에 여러 곳의 빈공간이 생성되는 것이 명확히 관찰되었다. 최종적으로 밀도가 초기의 50% 이상 감소한 60 frame 이후 내부에 형성된 빈공간이 뚜렷하게 관찰이 되었다. 이는 이 단계에 이르러서는 PE 고분자 소재의 크레이징 및 파단 현상이 발생한다는 것을 MD 전산모사 상에서 명확히 보여주고 있다. 이러한 현상은 분자량 7,000의 주쇄 7개로 구성된 PE 고분자 모델에서도 동일하게 확인할 수 있는데 밀도가 감소하는 frame은 약간의 차이가 나타났다. 그러나 분

자량 50,000의 주쇄 1개로 구성된 PE의 경우에는 외부 응력이 가해짐에 따라 주쇄가 늘어나는 것을 관찰할 수 있었지만 65번째 frame까지 packing된 구조를 일정하게 유지했으며 빈공간이 나타나는 현상이 일어나지 않았다. 이는 앞서 설명한 바와 같이 하나의 주쇄로 구성된 모델에서는 파단 현상이 일어나기 힘들다는 것을 보여주는 결과이다.

또한 PS에서도 각 모델들은 인장 전에는 구조를 유지하고 있다가, 일축 인장이 진행되면 한쪽 방향으로 분자구조가 변형되기 시작한다. 분자량 25,000의 주쇄 2개로 구성된 PS 고분자 모델은 밀도의 변화가 거의 없는 35번째 frame까지는 내부의 분자구조에 큰 변화가 관찰되지 않았다. 그러나, 밀도 감소가 시작된 후의 36번째 프레임에서는 PS 모델 내부에 빈공간이 생성되는 것이 관찰되었다. 최종적으로 밀도가 초기의 60% 이상 감소한 51 frame 이후부터 주쇄가 끊어지는 현상을 관찰할 수 있었으며, 이는 이 단계에 이르러서는 PS 고분자 소재의 파단 현상이 발생한다는 것을 MD 전산모사 상에서 명확히 보여주고 있다. 이러한 현상은 분자량 7,000 MW 7개로 구성된 PS 고분자 모델에서도 동일하게 확인할 수 있는데 밀도가 감소하는 frame은 약간의 차이가 있으나, 분자량 50,000의 주쇄 1개로 구성된 경우에는 외부응력이 가해짐에 따라 주쇄가 늘어나는 것을 관찰할 수 있었지만 밀도가 감소하더라도 파단이 나는 현상을 관찰할 수 없었다.

이러한 고분자 소재의 일축 인장 전산모사는 기존 실험결과[25, 26]와 비교 시 매우 유사한 경향을 나타내는 것을 알 수 있다. PE의 경우 실험에서 측정된 tensile strain이 약 1,200%였는데 본 연구의 PE 모델들도 인장 전 모델 대비 strain이 약 950%까지 늘어나는 것을 관찰할 수 있었고, PS의 경우 실험에서 측정된 tensile strain은 약 6%까지 늘어났는데, 전산모사 결과의 경우 PS의 경우 매우 초반 3 frame (6.09%) 이후 밀도가 감소하다가 PE에 비해 매우 빠른 약 35번째 frame (173%) 이후부터 밀도 값이 급격하게 감소하는 것을 관찰할 수 있었다. 이를 통하여, 정확한 일축 인장율 %에는 다소 차이가 있지만, 전산모사 결과와 실제 고분자의 tensile stain 실험 결과가 유사한 경향을 갖는 것을 확인했으며, 이러한 결과는 Radius of gyration 분석을 통해서도 추가로 확인할 수 있었다. Fig. 7에서 PE의 radius of gyration은 strain (%)가 늘어남에 따라 계속 증가하는 경향을 나타내는데 이는 PE 모델의 경우

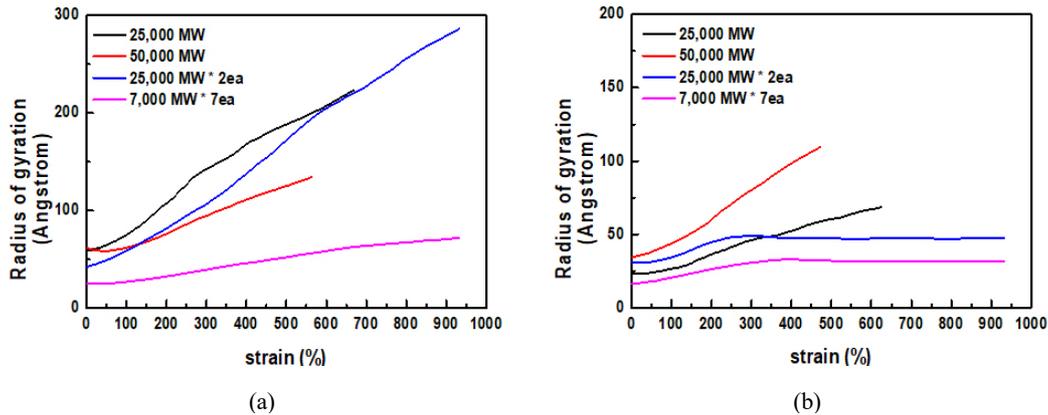


Fig. 7. Radius of gyration of (a) polyethylene (PE) and (b) polystyrene (PS) during elongation simulation.

80번째 frame 이상 일축 일장 전산모사가 가능했기 때문이다. 그러나 PS의 radius of gyration은 약 300~400 %까지 늘어나지만 이후부터는 strain이 늘어나더라도 radius of gyration의 변화가 더 이상 없었다. 이는 PS 고분자 모델이 일정 strain 이후로 고분자 구조의 파단이 일어나면서 더 이상 radius of gyration이 커지지 않았기 때문으로, 이러한 밀도 분석과 radius of gyration 분석을 토대로 일축 일장 전산모사와 실험의 tensile strain 측정법을 비교해보았을 때, 각 고분자별 경향을 분석하기에는 충분한 것으로 판단되었으며, 아직 개선의 여지가 있지만 고분자 소재의 기계적 특성 분석에 있어서 분자동역학 전산모사 그 활용가치가 매우 높다고 결론 내릴 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 필름형태의 분리막 소재로 사용되는 상용 고분자인 PE 와 PS의 기계적 특성 중 인장강도에 대한 특성을 분자동역학 전산모사 기술을 이용하여 밀도, radius of gyration, scattering-XRD 분석을 통하여 분석하였다. 먼저, 본 연구에서 제작된 분자동역학 모델에서 XRD 패턴을 분석해 본 결과, 실험에서 측정된 XRD 패턴과 유사한 결과를 얻을 수 있었으며, PS에서 고분자 주쇄에 도입된 페닐기로 인하여 PE에 비하여 상대적으로 넓게 분포하는 XRD 패턴 결과가 잘 반영되어 있음을 알 수 있었다. 최종적으로 분자동역학을 통해 수행한 기계적 특성 전산모사에서 얻어진 결과는 기존 실험에서 얻어진 경향과 매우 유사하게 나타났으며, PE의 경우 PS에 비하여 인장에 따른 내부 분자구

조 변화가 상대적으로 적고 따라서 더 높은 인장율을 나타낼 수 있음을 알 수 있었다. 추가적으로 기계적 특성 분석을 위한 분자동역학 전산모사에서는 주쇄를 하나만 넣을 경우 파단이 잘 일어나지 않기 때문에 인장에 따른 밀도 변화가 비정상적인 값을 현상이 관찰되었으며, 따라서 모델 제작 시에 분자량과 주쇄의 개수 선택이 매우 중요함을 알 수 있었다. 결론적으로 분자동역학 전산모사 기술을 활용한 기계적 특성 분석은 다양한 고분자 소재들의 분자 구조에 따른 기계적 특성을 예측할 수 있게 해주며, 분자 및 원자 수준에서 이러한 현상의 원인에 대한 해석을 할 수 있게 해줄 수 있을 것으로 기대된다. 특히, 실제 실험에서는 적용하기 어려운 다양한 온도 및 압력, 기타 특수한 조건을 전산모사에 적용할 수 있기 때문에 실험적으로 명확하게 규명이 이루어지지 못하고 있는 현상들에 대한 이해를 분자동역학 전산모사 기술이 증진시켜줄 수 있을 것으로 기대된다.

감 사

이 논문은 2020~2021년도 경상국립대학교 대학회계 연구비 지원에 의하여 작성되었음

Reference

1. H. Kang and C. H. Park, "Investigation of gas transport properties of polymeric membranes having different chain lengths via molecular dynamics (MD)", *Membr. J.*, **28**, 67 (2018).

2. C. H. Park, S. Y. Nam, and Y. T. Hong, "Molecular dynamics (MD) study of proton exchange membranes for fuel cells", *Membr. J.*, **26**, 329 (2016).
3. J. M. Haile, I. Johnston, A. J. Mallinckrodt, and S. McKay, "Molecular dynamics simulation: elementary methods", *Comput. Phys.*, **7**, 625 (1993).
4. C. H. Park, E. Tocci, S. Kim, A. Kumar, Y. M. Lee, and E. Drioli, "A simulation study on OH-containing polyimide (HPI) and thermally rearranged polybenzoxazoles (TR-PBO): relationship between gas transport properties and free volume morphology", *J. Phys. Chem. B*, **118**, 2746 (2014).
5. C. H. Park, E. Tocci, Y. M. Lee, and E. Drioli, "Thermal treatment effect on the structure and property change between hydroxy-containing polyimides (HPIs) and thermally rearranged polybenzoxazole (TR-PBO)", *J. Phys. Chem. B*, **116**, 12864 (2012).
6. Y. Jiang, F. T. Willmore, D. Sanders, Z. P. Smith, C. P. Ribeiro, C. M. Doherty, A. Thornton, A. J. Hill, B. D. Freeman, and I. C. Sanchez, "Cavity size, sorption and transport characteristics of thermally rearranged (TR) polymers", *Polymer*, **52**, 2244 (2011).
7. P. V. Komarov, I. N. Veselov, P. P. Chu, and P. G. Khalatur, "Mesoscale simulation of polymer electrolyte membranes based on sulfonated poly(ether ether ketone) and Nafion", *Soft Matter*, **6**, 3939 (2010).
8. S.-T. Kao, Y.-H. Huang, K.-S. Liao, W.-S. Hung, K.-S. Chang, M. De Guzman, S.-H. Huang, D.-M. Wang, K.-L. Tung, and K.-R. Lee, "Applications of positron annihilation spectroscopy and molecular dynamics simulation to aromatic polyamide pervaporation membranes", *J. Membr. Sci.*, **348**, 117 (2010).
9. K.-S. Chang, Y.-H. Huang, K.-R. Lee, and K.-L. Tung, "Free volume and polymeric structure analyses of aromatic polyamide membranes: A molecular simulation and experimental study", *J. Membr. Sci.*, **354**, 93 (2010).
10. W. D. Callister Jr. and D. G. Rethwisch, "Callister's materials science and engineering", John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey (2020).
11. K. Balani, V. Verma, A. Agarwal, and R. Narayan, "Biosurfaces: a materials science and engineering perspective", John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey (2015).
12. A. K. Bhowmick, "Mechanical properties of polymers", *Materials Science And Engineering-Volume I*, **5**, 156 (2009).
13. Y.-W. Kim, D.-H. Cho, S.-Y. Bae, and H. Kumaawa, "Sorption and diffusion of carbon dioxide in polystyrene membrane", *Membr. J.*, **3**, 79 (1993).
14. J.-S. Ryu, T.-B. Jeon, J.-H. Kim, and K.-Y. Chung, "Processing characteristics of the condensed wastewater resulting from food waste disposal using a submerged polyethylene hollow fiber membrane", *Membr. J.*, **20**, 127 (2010).
15. J. H. Lee and C. H. Park, "Effect of force-field types on the proton diffusivity calculation in molecular dynamics (MD) simulation", *Membr. J.*, **27**, 358 (2017).
16. H. Sun, "COMPASS: An ab initio force-field optimized for condensed-phase applications overview with details on alkane and benzene compounds", *J. Phys. Chem. B*, **102**, 7338 (1998).
17. H. Sun, Z. Jin, C. Yang, R. L. Akkermans, S. H. Robertson, N. A. Spensley, S. Miller, and S. M. Todd, "COMPASS II: extended coverage for polymer and drug-like molecule databases", *J. Mol. Model.*, **22**, 1 (2016).
18. H. Sun, P. Ren, and J. Fried, "The COMPASS force field: parameterization and validation for phosphazenes", *Comput. Theor. Polym. Sci.*, **8**, 229 (1998).
19. M. Fixman, "Radius of gyration of polymer chains", *The Journal of Chemical Physics*, **36**, 306 (1962).
20. G. Beaucage, "Approximations leading to a unified exponential/power-law approach to small-angle scattering", *J. Appl. Crystallogr.*, **28**, 717 (1995).
21. S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, A. Zubkiewicz, J. Subocz, R. Stanik, and J. Szczepaniak, "Enhanced Functional properties of low-density polyethylene

- nanocomposites containing hybrid fillers of multi-walled carbon nanotubes and nano carbon black”, *Polymers*, **12**, 1356 (2020).
22. S. A. Reemas, and R. Maheswaran, “Effect of EPS volume fraction in buoyancy characteristics of expanded polystyrene/epoxy sandwich composites”, *Int. J. Mater. Eng.*, **8**, 146 (2017).
 23. F. Marinkovic, D. Popovic, J. Jovanovic, B. Stankovic, and B. Adnadjevic, “Methods for quantitative determination of filler weight fraction and filler dispersion degree in polymer composites: Example of low-density polyethylene and NaA zeolite composite”, *Appl. Phys. A*, **125**, 1 (2019).
 24. J. Fang, Y. Xuan, and Q. Li, “Preparation of polystyrene spheres in different particle sizes and assembly of the PS colloidal crystals”, *Sci. China Technol. Sci.*, **53**, 3088 (2010).
 25. E. Franco-Urquiza, N. Camacho, and M. L. Maspocho, “Tensile properties of LDPE/electrical cable waste blends prepared by melt extrusion process”, *Afinidad*, **74**, (2017).
 26. M. Ionita, A. M. Pandele, L. E. Crica, and A. C. Obreja, “Preparation and characterization of polysulfone/ammonia-functionalized graphene oxide composite membrane material”, *High Perform. Polym.*, **28**, 181 (2016).