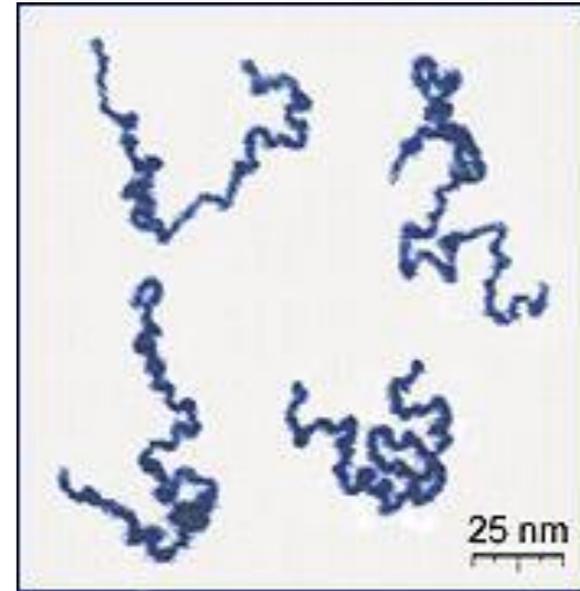
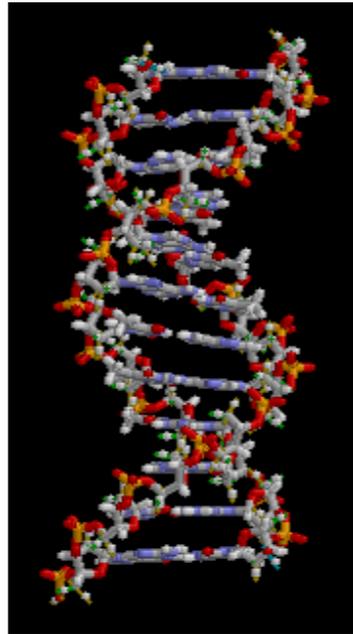
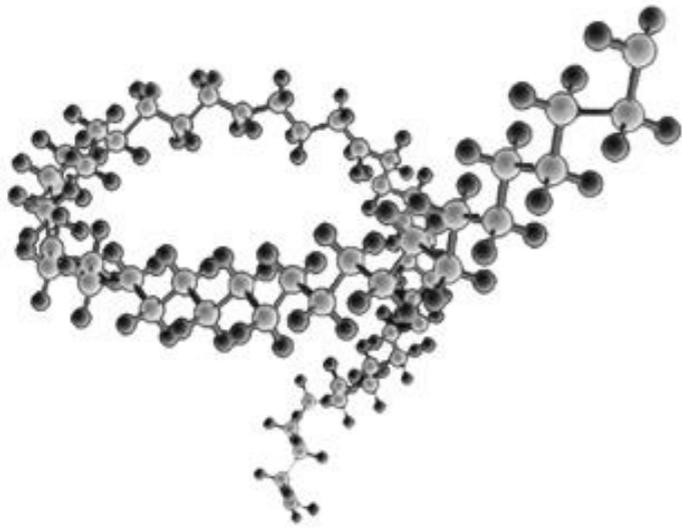


# 고분자의 소개

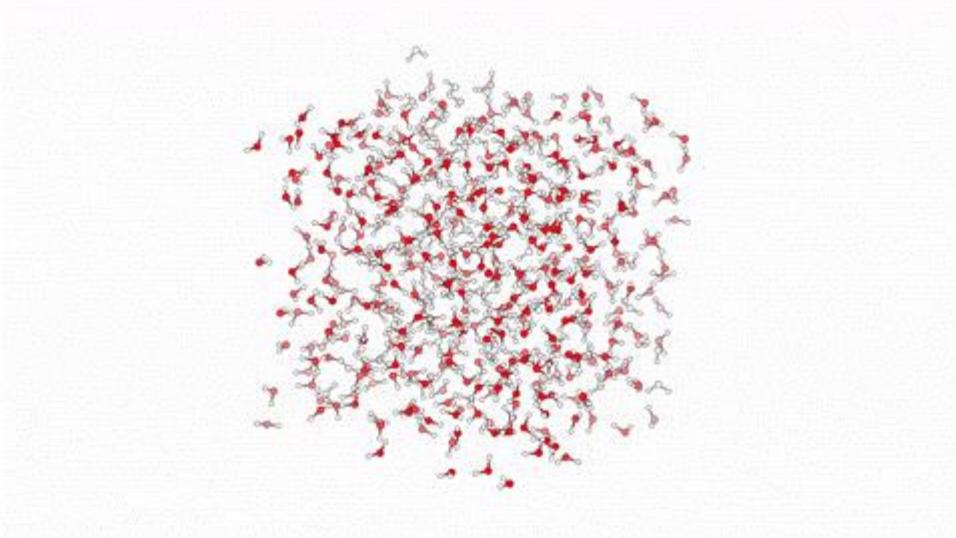
## 고분자(polymer)란 무엇인가?

고분자는 여러 구성 유닛(monomer)들이 연결되어 만들어지는 분자량이 큰 (**macromolecule**) 물질이다.

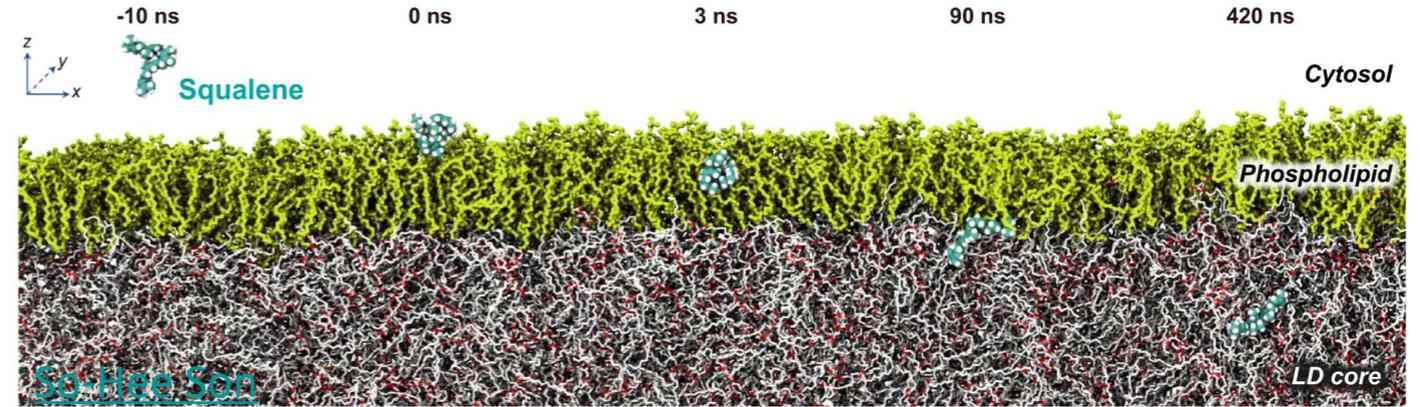


# 고분자 시뮬레이션 방법

1. 원자들을 상자 안에 던져 넣고 분자동역학 (MD) 또는 Monte Carlo(MC) 시뮬레이션을 할 수 있다.



물의 All-atom MD 시뮬레이션 (from Wikipedia)



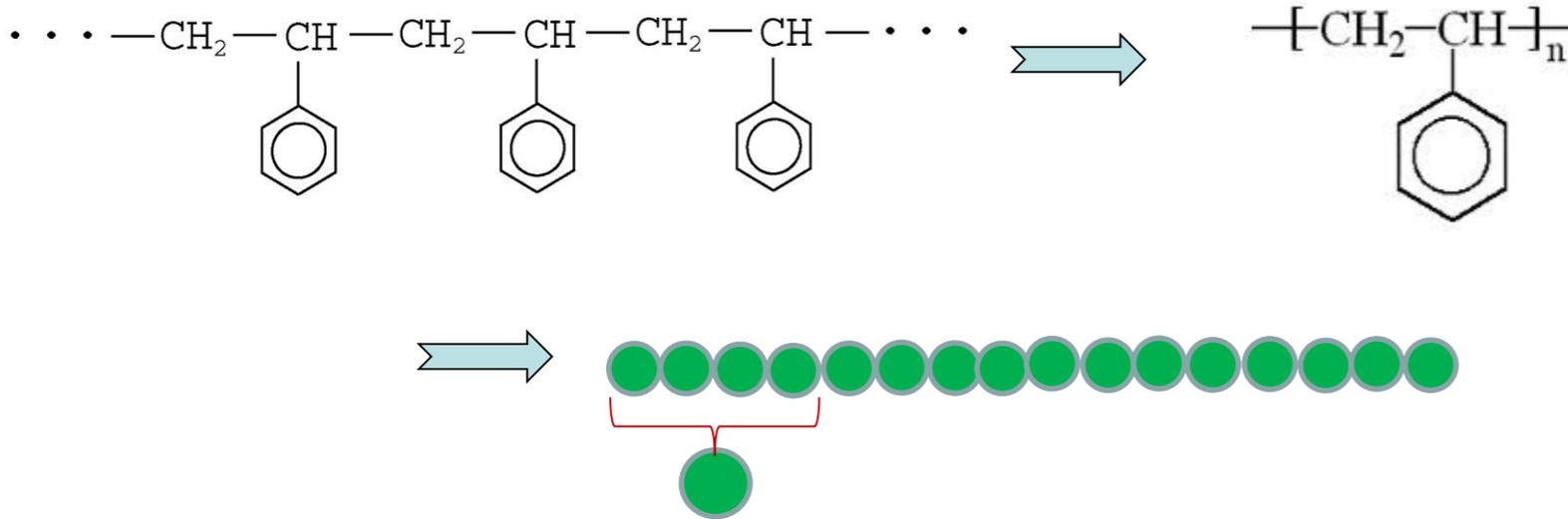
So-Hee Son et. al. Nature Comm., 13, 3612 (2022)

가능한 시뮬레이션 도구들:

GROMACS, AMBER, CHARMM, OpenMM, in-house codes, etc.

# Coarse-Grained Simulation

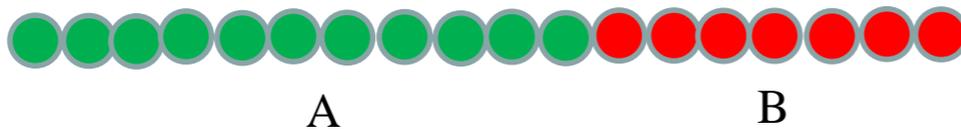
2. 분자를 coarse grain하여 (구형 소?), 스프링으로 연결된 구슬의 시뮬레이션을 수행한다.



- 주요 파라미터
  - $N$ : Polymerization index (segment number)
  - $f$ : Volume fraction of A block
  - $\chi N$ : Incompatibility between A and B block
  - $a$ : Segment length
  - $\rho_0^{-1}$ : Segment volume

하나의 긴 고분자는 많은 모노머들로 이루어져 있다. 각 모노머를 구슬로 표현할 수 있는데, 위에서는 녹색 구슬이 폴리스타이렌(PS) 사슬의 한 스타이렌 모노머를 나타낸다.

몇 개의 모노머를 모아 통계적 조각(segment)으로 취급해서 하나의 고분자를 길이  $a$  인 segment  $N$ 개가 연결된 사슬로 생각할 수 있다.



두 서로 다른 타입의 모노머가 선형으로 연결된 경우 그 고분자를 블록공중합체 (diblock copolymer) 라고 부른다.  $f$ 가 A의 비율,  $1-f$ 가 B의 비율이다.

가능한 시뮬레이션 도구들:  
HOOMD-Blue, LAMMPS,  
in-house codes, etc.

# What's going on at Statistical Physics of Soft Materials Lab?

## 1. 고분자 장이론을 사용한 이론/시뮬레이션 개발.

### Develop Theoretical/Computational Methods in **Polymer Field Theory**

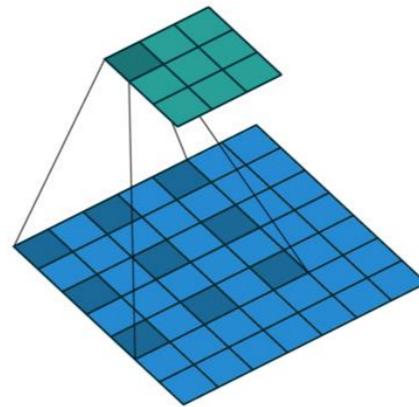
고분자 장이론의 분배함수: 요동하는 field의 범함수  $Z \propto \int \int \exp\left(-\frac{H_f[W_+, W_-]}{k_B T}\right) \mathcal{D}W_+ \mathcal{D}W_-$

2022년 딥러닝을 이용한 시뮬레이션 가속 및 오픈소스 프로그램 발표.

이미지의 의미 있는 영역을 찾아내는 용도로 개발된 fully convolutional한 인공신경망을 고분자 시뮬레이션 연구에 이용하였다.

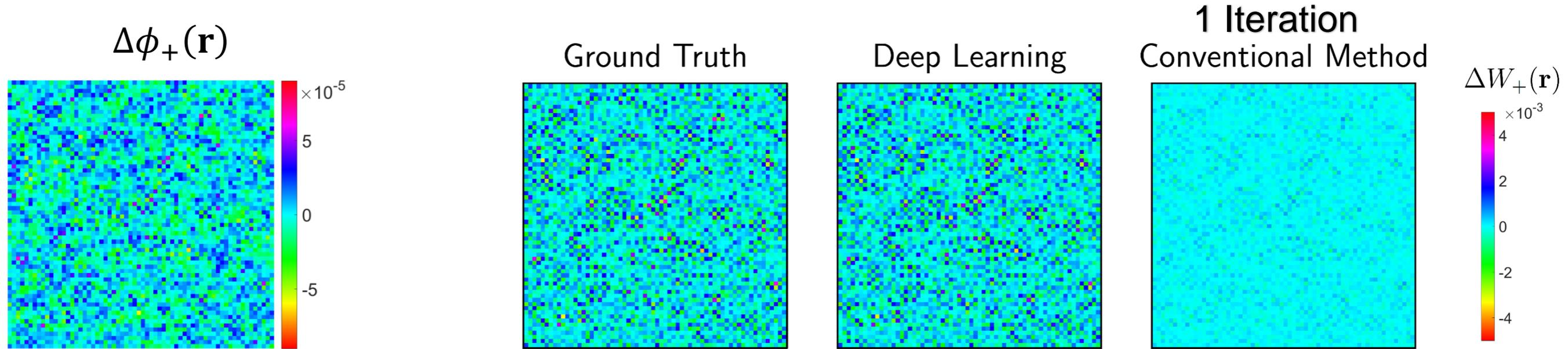


Semantic Segmentation(의미적 분할)의 예.  
<https://pytorch.org/>



Atrous/dilated Convolution

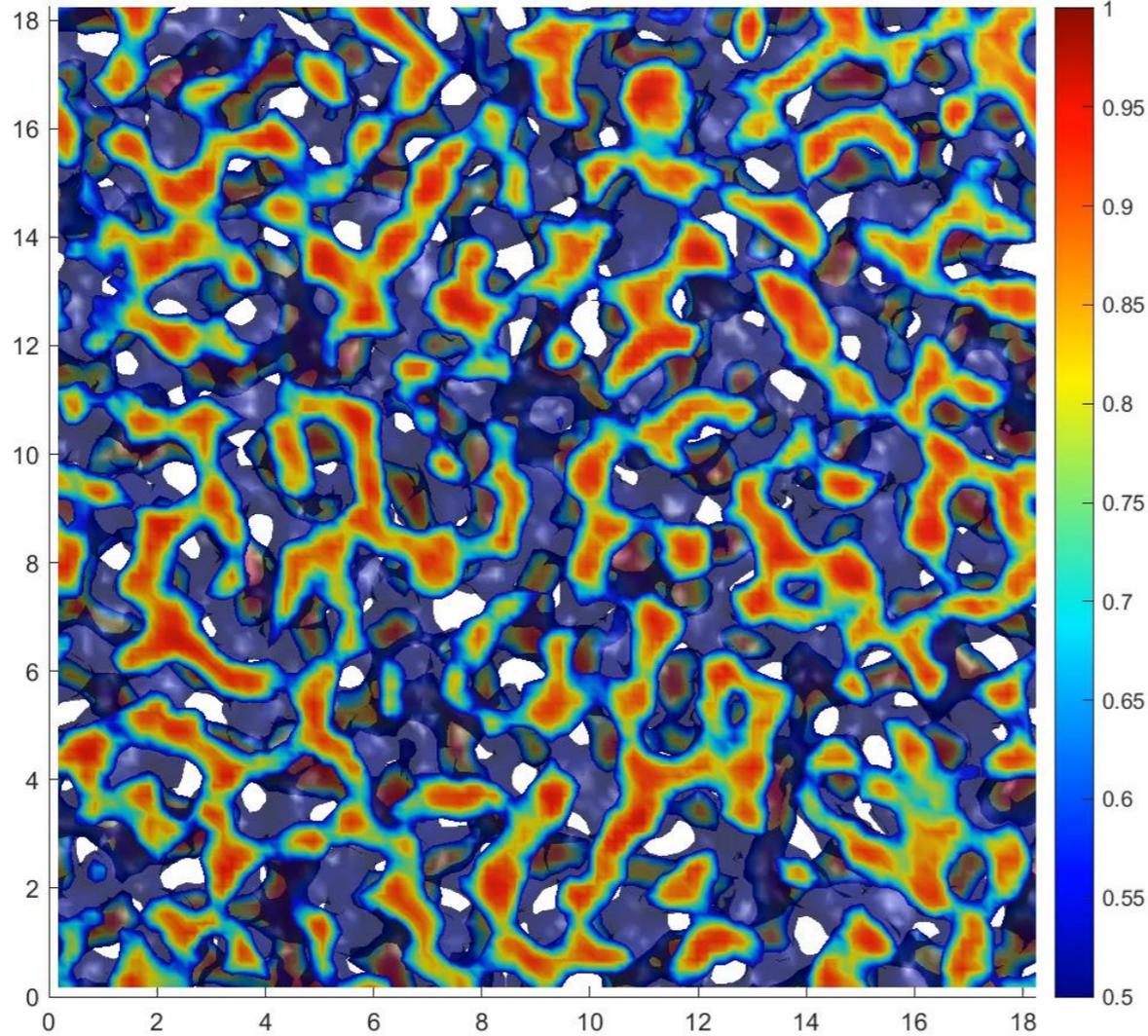
훈련된 인공지능망은 매우 높은 정밀도로 고분자장의 포텐셜 값을 계산해 내었고 인공지능망의 연속사용으로 정확한 계산을 수행할 수 있게 되었다.



- 훈련 이후 DL을 이용한 L-FTS 시뮬레이션을 수행하였다.
- 대체적으로 6배 정도의 속도 향상이 있었다.

Morphology	Speedup	Iterations Reduction
Spheres	5.97	9.09
Cylinders	6.19	9.37
Gyroid	6.19	8.64
Lamellae	5.99	8.44

# 라멜라를 만드는 블록공중합체 박막 시뮬레이션



Discrete Chain Model

$$\chi N_b = 15, \chi N = 14.3355, f_A = 0.50$$

$$\Delta x = 0.1689,$$

$$[L_x, L_y, L_z] = [18.24, 18.24, 2.02665] \approx [12R_0, 12R_0, \frac{4}{3}R_0]$$

$$ds = 0.01, \bar{N} = 10^5$$

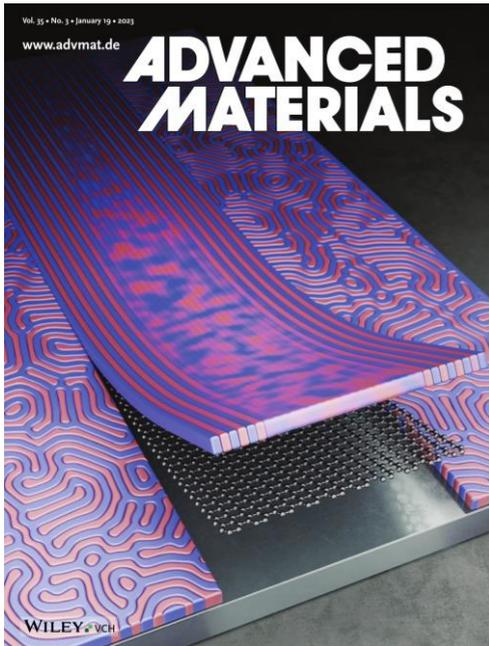
# What's going on at Statistical Physics of Soft Materials Lab?

## 2. 고분자 나노구조 시뮬레이션

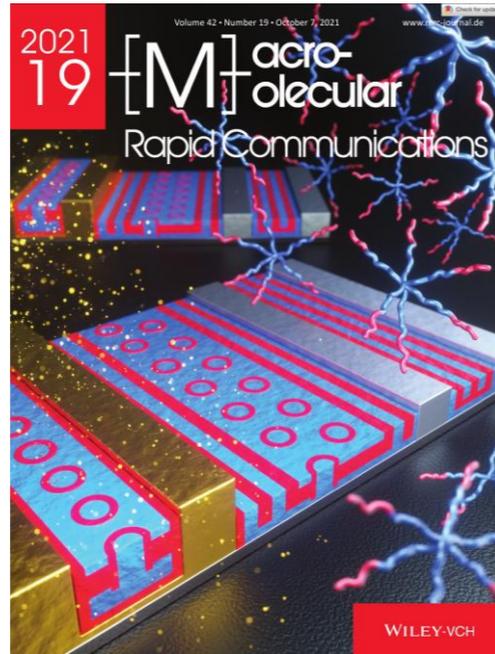
### Simulation of Polymeric Nanostructure

세상에서 가장 빠른 고분자장 시뮬레이션 수행.

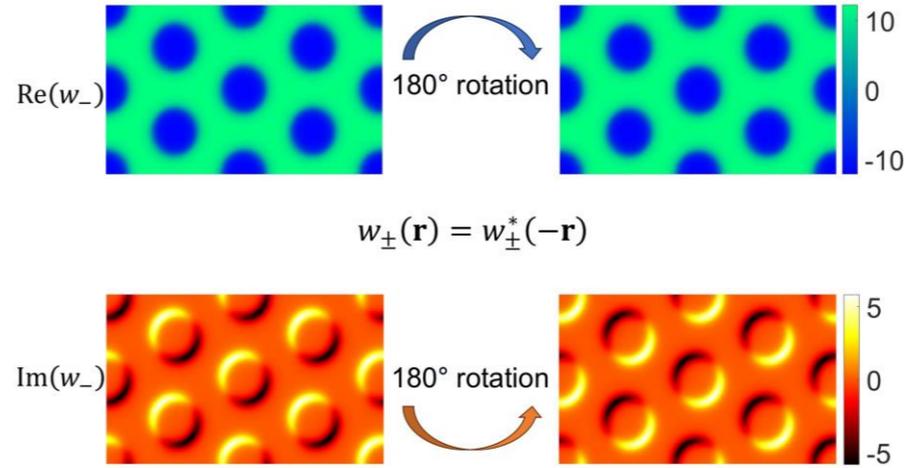
고분자가 만드는 다양한 나노구조와 상전이(phase transition) 연구,  
박막의 구조결함 제거 연구, 광결정 응용 가능한 Frank-Kasper 상 연구.



Adv. Mater., **35**, 2207338 (2023)



Macromol. Rapid Commun.,  
**42**, 2100411 (2021)



Macromolecules, **57**, 3850–3861 (2024)

2024년 고분자 평균장이론의 복소해를 처음으로 발견하여 발표.

CPU server: "Polymer" Node 01 ~ 07

GPU server: "AMD" Node 01 ~ 07

GeForce RTX 4090: 12

GeForce RTX 3090: 24

NVIDIA Titan V: 3

Geforce RTX 3080: 3

은퇴시킨 워크스테이션과 GPU들은 개인 컴퓨터로 사용

## 랩의 특징

고분자장 시뮬레이션을 오픈소스화하여 빠르게 배워 연구를 시작할 수 있음.

실험그룹과의 협력연구를 통해 논문 쓰기 좋은 연구주제를 발굴.

과제와 무관하게 통계물리학, 생물물리학, 연성물질물리학의 다양한 주제에 대해 본인이 하고 싶은 연구를 수행할 수 있는 환경.

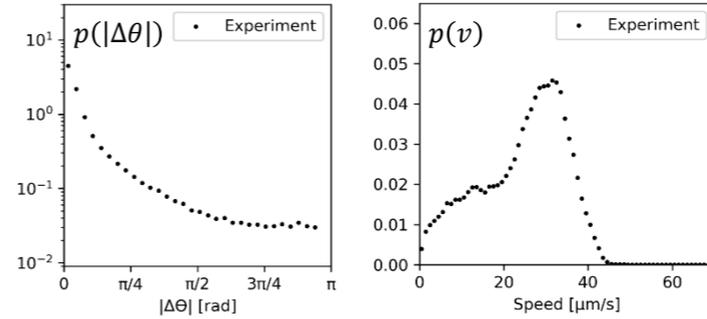
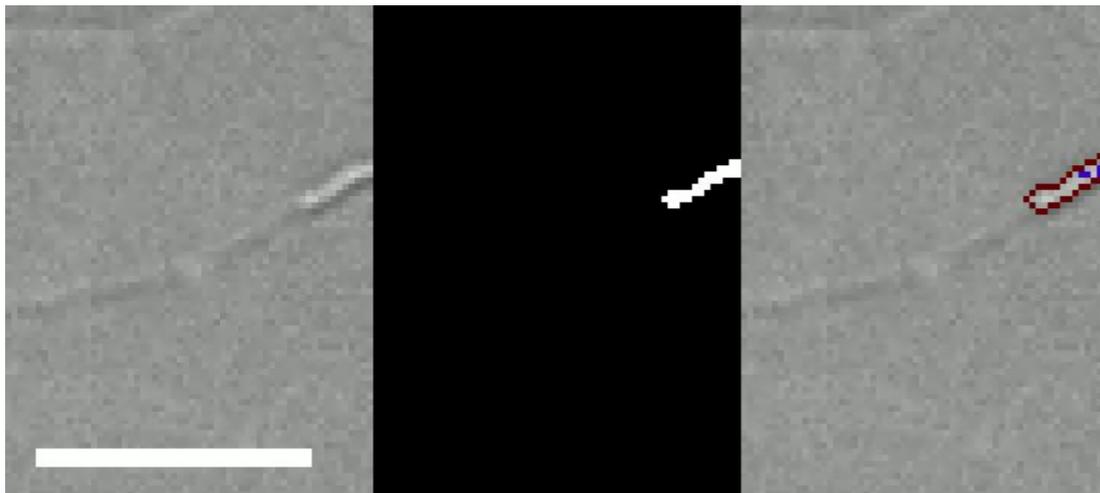
대학원 지원까지 시간이 있는 학생은 (학기중/여름/겨울) 인턴십 환영.



# 다른 연구주제들

## 박테리아의 움직임 tracking

Tracked multiple bacteria



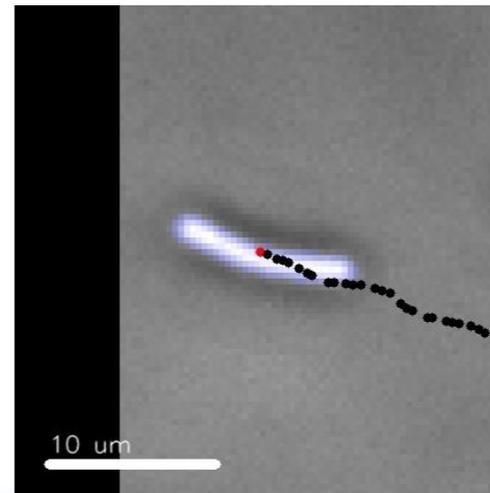
## Parameters in the RT model

- $D_T$  Translational diffusion coefficient (native and/or environmental)
- $D_R$  Rotational diffusion coefficient (tumble)
- $v_0$  Running speed

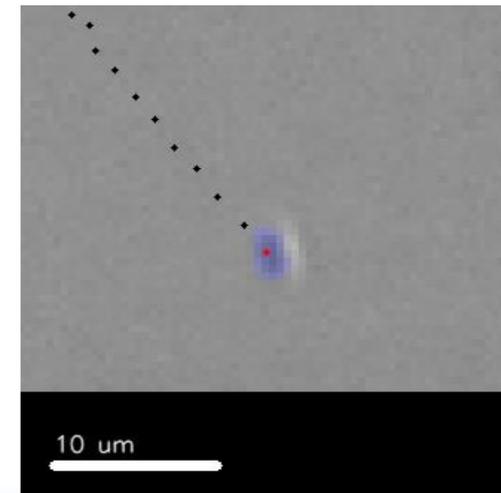
Understanding biological response of bacteria for the environment



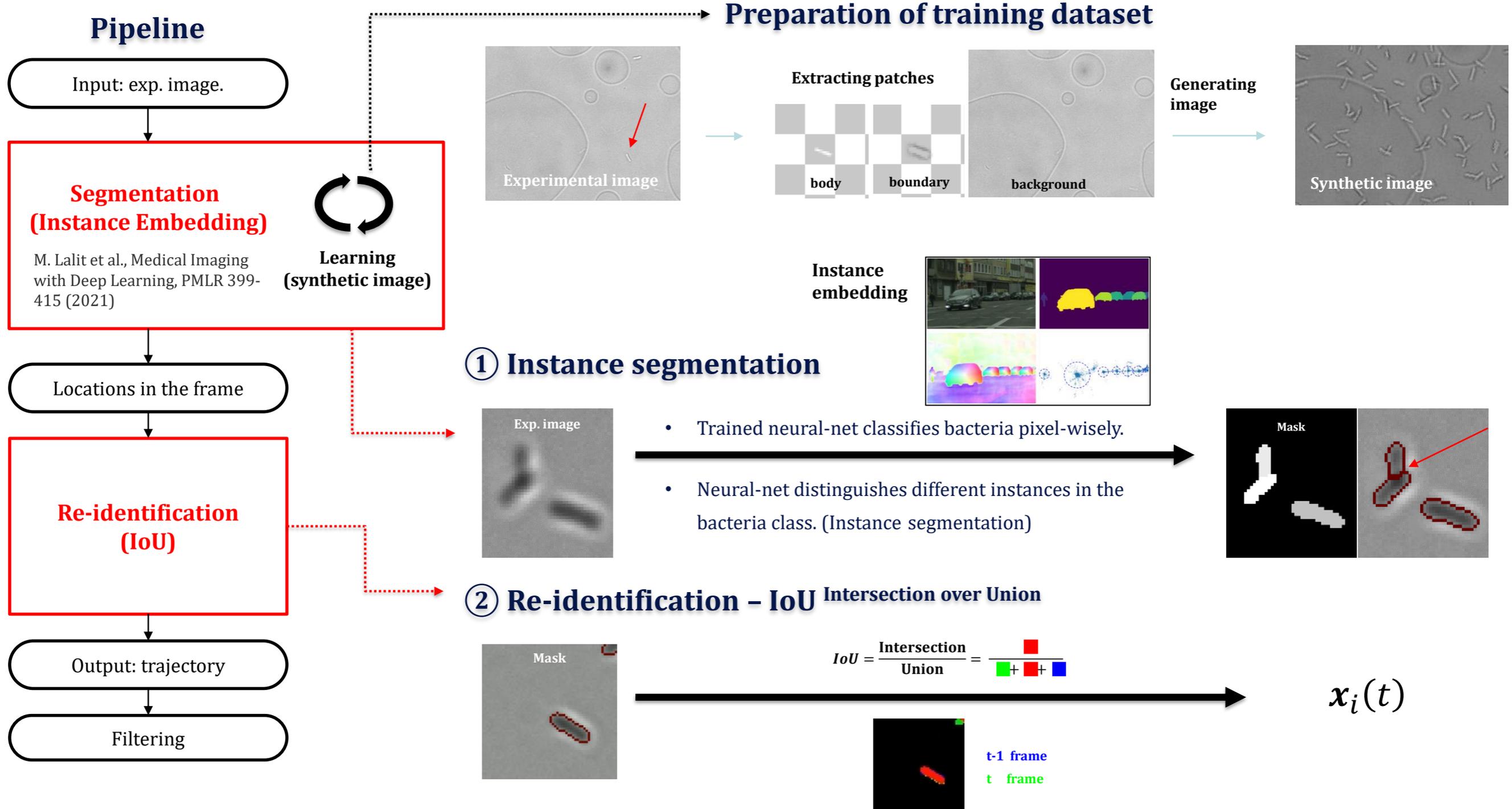
Cell overlapping



Tumbling motion



# Deep-learning based object tracking



# 다른 연구주제들

## 케이크 나누기

Fair Division? (공정한 분배?)



## 레이팅 시스템

ELO, MMR, 피타고리안 승률 등