

Monte Carlo 모사를 통한 Tetrahydrofuran 하이드레이트의 구조 분석

전동혁, 이태용*
한국과학기술원
(tylee@kaist.ac.kr*)

최근 수소저장소로써 하이드레이트를 사용하는 방법이 부각되고 있다. Tetrahydrofuran(THF)과 수소를 포함하는 이중 하이드레이트의 형성과정은 하이드레이트의 합성 압력을 적절한 수준까지 낮춰 줄 수 있다. 본 연구에서는 일정한 온도, 압력, 분자수 하에서의 Monte Carlo 모사에 의해 THF 하이드레이트의 구조를 분석하였다. Lennard-Jones 퍼텐셜과 Coulomb 퍼텐셜이 분자간의 상호작용을 계산하기 위해 적용되었다. 모사를 통해 얻은 radial distribution function을 분석해 본 결과 THF가 하이드레이트를 형성하는 데에 도움을 주는 것을 확인하였으며, THF와 물분자사이의 물리적 결합은 열적 에너지에 의해 쉽게 분리될 수 있다는 것을 알게 되었다.