메탄과 고리 화합물을 포함하는 이원 수화물의 열역학적, 분광학적 성질

<u>백</u>승준, 차민준¹, 이 흔, 이재우* KAIST; ¹The City College of New York (jaewlee@kaist.ac.kr*)

본연구는 현재까지 수화물 형성체로 알려지지 않은 두가지 고리 화합물에 관한 수화물 형성을 메탄하에서 수화물이 처음으로 관찰되는 것을 보여주고 있다. 이 종 고리식 유기 화합물인 5분자 고리의 Pyrrole (C4H4NH, PRL)과 6분자 고리의 Pyridine (C5H5N, PRD)는 클래스레이트 하이드레이트에 메탄 가스와 함께 이원 수화물로 포접될 수 있다. 두 이종 고리식 유기화합물을 포접하는 이원 수화물 (pyrrole + CH4, pyridine + CH4)의 분말 X선 회절 실험 결과 격자 크기는 pyrrole이 첨가된 수화물이 작았지만 두 이원 수화물 모두 입방 Fd3m 구조 II를 가지는 것을 확인했다. 라만 분광실험 역시 구조 II 수화물의 작은 격자에 메탄, 큰 격자에 각 방향족 고리 화합물이 존재함을 명확하게 보여주었다. 두 이원 수화물의 열역학적 평형조건은 high-pressure micro-differential scanning microcalorimetry를 사용하여 순수 메탄 수화물의 평형조건과 비교하여 두 방향족 고리 화합물이 포접 수화물 환경에서 어떤 역할을 하는지 밝혀내었다. 위의 두 이종 고리식 화합물은 수화물을 억제하는 작용기를 가지고 있지만 메탄-물 환경에서 수화물 생성을 촉진하는 역할을 하는 것을 알아내었다.