

객체 분자의 구조에 따른 $C_4H_8O + CH_4$
하이드레이트 결정 격자의 열적 팽창 거동 분석

민주원, 안윤호, 백승준, 신규철¹, 차민준², 이재우[†]

한국과학기술원; ¹경북대학교; ²강원대학교

(jaewlee@kaist.ac.kr[†])

클러스레이트 하이드레이트란, 물 분자의 수소결합으로 이루어진 격자 내부에 객체 분자들이 포접되어있는 결정질 화합물을 뜻한다. 하이드레이트 결정의 온도를 증가시키게 되면 분자의 진동이 활발해지기 때문에 격자가 팽창하며, 객체 분자의 특성에 따라 그 정도가 달라진다. 본 연구에서는, 구조-II 하이드레이트의 큰 객체 분자가 이러한 열적 팽창에 미치는 영향에 대해 분석하였다. 선형과 고리형 구조의 경우를 비교하기 위해서, C_4H_8O 의 분자식을 가지는 이성질체인 Cyclobutanol과 Butyraldehyde를 새로운 하이드레이트 촉진제로써 사용했다. 각 하이드레이트 결정의 온도에 따른 격자 상수를 비교하여 Butyraldehyde 하이드레이트의 열적 팽창 정도가 Cyclobutanol 하이드레이트에 비해 확연히 큰 것을 확인했다. 이러한 차이를 분자 동역학 시뮬레이션으로 분석한 결과, 고리형 분자의 팽창정도나 분자 운동 및 진동이 선형 분자에 비해 제한되기 때문에 동공 내 점유공간이 더 적었고, 이로 인해 주체 격자에 가하는 스트레스에 차이가 나타났다. 각 하이드레이트의 동공 부피를 계산한 결과, 선형 객체 분자가 포접된 큰 동공의 부피 차이가 확연했고, 이와 면을 공유하는 작은 동공의 부피 차이 역시 수반됨을 확인했다. 이러한 하이드레이트의 열적 팽창 거동은 결정 격자를 정밀하게 제어하는 데에 유용할 것이라고 판단된다.