

Tetrahydrofuran과 수소를 포함하는 sII 하이드레이트의 Monte Carlo 모사

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

자원고갈과 환경문제에 대한 대안으로써 수소에너지가 화석연료의 대체에너지로 주목받는 가운데 최근 수소를 저장하기 위한 물질로 하이드레이트를 이용하는 방법이 부각되고 있다. 수소 하이드레이트의 경우에는 형성과정에서 상당한 고압을 필요로 하지만, 그에 비해 tetrahydrofuran(THF)과 수소를 포함하는 이중 sII 하이드레이트는 적절한 수준의 압력에서 합성이 가능하다. 본 연구에서는 Monte Carlo 방법을 통해 THF-H₂ 하이드레이트의 평형상태를 모사하였다. 각 원자간의 van der Waals와 정전기 상호작용은 Lennard-Jones 퍼텐셜과 Coulomb 퍼텐셜 모델에 의해 계산되었다. 여러 가지 온도와 압력에서 THF-H₂ 하이드레이트가 갖는 물성들을 계산하여 온도와 압력이 하이드레이트 형성에 미치는 영향을 검토하였으며, 모사를 통해 얻은 반지름 방향 분포 함수를 분석해 본 결과 THF가 낮은 압력에서도 하이드레이트를 형성할 수 있도록 도움을 주는 것을 확인하였다.