

sII 하이드레이트의 수소 저장 용량에 대한 분자모사

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

최근 수소 저장소로써 하이드레이트를 이용하는 방법이 부각되고 있는 가운데 하이드레이트의 수소의 저장용량에 대한 관심이 증가하고 있다. sII 하이드레이트 단위셀의 화학식은 $16X_8Y_{136}H_2O$ 이고, 여기서 X와 Y는 각각 작은 케이지와 큰 케이지에 들어가는 게스트 분자를 의미한다. 따라서 sII 하이드레이트의 수소 저장 용량을 알아보기 위해서 각 케이지당 게스트 분자의 occupancy와 선택도를 관찰할 필요가 있다. 케이지 occupancy와 선택도를 알아보기 위하여 grandcanonical Monte Carlo (GCMC) 모사를 수행하였다. 케이지 구조 틀을 형성하는 물분자들을 강제로 두고 게스트 분자에 대해 GCMC를 수행하여 주어진 온도와 압력에서 각 케이지에 위치하는 게스트 분자수의 변화를 살펴보았다. 각 원자간의 van der Waals와 정전기 상호작용은 Lennard-Jones 퍼텐셜과 Coulomb 퍼텐셜 모델에 의해 계산되었다. 압력이 증가함에 따라 큰 케이지에 수소의 저장량이 늘어나는 것을 확인하였으며, 대부분의 작은 케이지는 수소분자의 단일 occupancy를 갖는 것을 알 수 있었다.