

고리형 알코올과 메탄올이 포집된 크러스레이트 하이드레이트(불화 암모늄/물)의 구조 분석 연구

김동현, 차민준[†], 박기훈

강원대학교

(minjun.cha@kangwon.ac.kr[†])

이 연구에서는 불화 암모늄 (NH_4F)과 물 (H_2O)로 주체 구조를 형성한 크러스레이트 하이드레이트의 구조 분석 연구를 수행하였다. 동공에 포집된 객체 분자는 고리형 알코올의 일종인 사이클로부탄메탄올 (cyclobutanemethanol)과 사이클로펜탄메탄올 (cyclopentanemethanol), 그리고 메탄올 (methanol)로 알코올의 포집과 상호작용으로 인한 하이드레이트의 구조적인 특징을 리트벨트 구조분석 (Rietveld refinement)을 통해 확인해보았다. 구조 분석 결과 하이드레이트는 입방정계 (cubic)의 결정구조와 $\text{Fd}3\text{m}$ 의 공간군 (space group)을 나타내고 있으며, 사이클로부탄메탄올과 사이클로펜탄메탄올은 구조 II (structure II) 하이드레이트의 큰 동공, 메탄올은 구조 II 하이드레이트의 작은 동공에 포집되는 것을 확인하였다. 사이클로부탄메탄올, 사이클로펜탄메탄올, 메탄올의 알코올 분자들은 주체 구조의 (불화 암모늄/물) 분자와 수소 결합을 통해 하이드레이트의 격자를 형성하는데 기여하는 것으로 분석되었다.

KEYWORDS Clathrate hydrate, Rietveld refinement, alcohol guest, hydrogen bonding