

## sII 하이드레이트의 수소 cage occupancy에 대한 분자모사

전동혁, 이태용\*

한국과학기술원

(tylee@kaist.ac.kr\*)

최근 수소 저장소로써 하이드레이트를 이용하는 방법이 부각되고 있는 가운데 수소의 저장량을 알아보기 위해서 각 cage당 수소의 occupancy를 관찰할 필요가 있다. Cage occupancy를 알아보기 위하여 2단계의 분자모사가 수행되었다. Cage framework을 형성하는 물분자와 이 구조를 유지하게 해주는 tetrahydrofuran (THF) 에 대한 isothermal-isobaric Monte Carlo 모사를 수행하였고, 형성된 cage framework을 rigid body로 두고 이에 대한 수소의 cage occupancy를 grandcanonical Monte Carlo 모사를 통해 알아보았다. 각 원자간의 van der Waals와 정전기 상호작용은 Lennard-Jones 퍼텐셜과 Coulomb 퍼텐셜 모델에 의해 계산되었다. THF 물분자를 변화시키면서 모사를 수행한 결과 일정량의 THF 이하에서는 cage 구조를 유지하지 못하고, 이에 따라 수소의 cage occupancy도 현저히 낮아지는 것을 확인하였다.