Geometric effect of Taylor vortex on polymorphic nucleation

<u>박선아</u>, 김우식* 경희대학교 화학공학과 (wskim@khu.ac.kr*)

Taylor vortex는 고리 쌍 모양의 와류로써 서로 반대방향으로 맞물리는 계면에서 강한 elongational motion을 유도하는 독특한 유체흐름이다. Elongational motion을 이용하면 일 정한 방향으로의 분자 배열이 손쉽게 가능해지므로 동질이상인 polymorph의 핵생성과 상전 이 현상에 효과적인 영향을 줄 것으로 예상한다. 따라서 본 연구에서는 다형체 간의 용해도 차가 매우 작아서 100% 안정상을 얻기 어려운 L-histidine을 목표 물질로 하여, 다형 결정에 대한 Taylor vortex의 Geometric effect를 증명하고자 하였다. Couette-Taylor(CT) 결정화 기의 독특한 유체흐름이 다형체의 핵생성과 상전이에 미치는 영향을 알아보기 위해 교반속 도, 용매조성, 냉각속도, 내부/외부 원통 사이의 gap size를 변수로 설정하였으며, 고온의 포 화 용액으로부터 냉각을 통해 결정화를 유도하였다. 결정화기의 Geometric effect를 고려하 여 핵생성은 상대적 핵생성 속도와 유체소실에너지로써, 상전이 현상은 물질전달계수와 Tavlor 수 및 Reynolds 수의 상관관계식을 이용하여 해석하였다. 전반적인 실험결과로부터 CT 결정화기의 기하학적 구조 차이에 의한 효과를 증명할 수 있었고, CT 결정화기가 Mixing Tank(MT) 결정화기보다 높은 분율의 안정상 생성에 매우 효과적임을 확인할 수 있 었다. 또한 본 연구에서의 실험적 측정과 이론적 예측이 합리적으로 부합하므로 Taylor vortex가 L-histidine 다형체의 분자배열을 효과적으로 유도하여 안정상의 핵생성 및 물질 전달을 촉진한다고 설명하였다.