

## TBAB를 첨가한 수소 하이드레이트의 분자 동역학 연구

\*최 승호, 박 찬수, 김 수민, 우 성민, 신 재호, \*\*김 양도

### The molecular dynamics study of TBAB hydrogen hydrate structure

\*Seungho Choi, Chansu Park, Soomin Kim, Sungmin Woo, Jaeho Shin, \*\*Yangdo Kim

가스 하이드레이트는 낮은 온도와 높은 압력에서 물과 천연가스 분자가 물리적으로 안정한 결합을 하고 있는 결정질의 화합물이다. 현재 130개 이상의 가스분자들이 물분자와 결합하여서 Clathrate 하이드레이트를 형성하는 것으로 보고되어 있다.

수소의 경우 하이드레이트를 형성하기 위해서 약 200MPa 이상의 높은 압력이 필요하다. TBAB는 semi-clathrate 하이드레이트를 형성하는 첨가제로 알려져 있으며 수소 하이드레이트의 형성 압력을 완화시키기 위한 촉진제로서 많은 연구가 수행되고 있다. Wataru Shimada는 XRD 패턴을 사용하여 semi-clathrate 하이드레이트의 특수한 결정 모델을 분석하였다. 이 모델의 경우, 대기압 하에서 TBAB와 물분자의 화학 양론적 비를 1:38로 제시하였다. 이는 처음으로 TBAB 하이드레이트 결정구조를 밝혀냈지만, 분자 동역학적 부분에서는 그 데이터가 정확히 정의 되지 않았다.

본 연구는 Wataru Shimada 모델을 수소 TBAB 하이드레이트의 분자 동역학 연구에 적용시켰으며, 실험에서 나온 데이터를 바탕으로 RDF(Radial Distribution Function)와 MSD(Mean Square Displacement)를 측정했다.

**Key words** : hydrate(하이드레이트), hydrogen(수소), TBAB(Tetra-n-butyl ammonium bromide), molecular dynamics (분자 동역학)

E-mail : \*zzime2000@nate.com, \*\*yangdo@pusan.ac.kr

## THF, TBAB 첨가에 의한 CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> 하이드레이트의 특성 연구

\*하 린, 이 현주, 박 영빈, 신 재호, \*\*김 양도

### Study on thermodynamic and kinetic properties of CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> hydrate with THF, TBAB addition

\*Rin Ha, Hyun Ju Lee, Young Bin Park, Jae Ho Shin, \*\*Yang Do Kim

화력발전 분야에서 CO<sub>2</sub> 분리는 크게 연소전 탈탄소화(pre-combustion capture)와 연소후 포획(post-combustion capture)으로 나누어진다. 연소후 포획은 연료를 연소한 후 발생하는 CO<sub>2</sub>와 N<sub>2</sub>가스에서 CO<sub>2</sub>를 분리하는 기술로 흡수나, 흡착, 막분리 등을 주로 이용한다. 연소전 탈탄소화는 연소 전에 CO<sub>2</sub>가 발생되지 않도록 하는 기술로써, 부분 산화나 개질 및 수성가스 변위반응 등이 포함되며 생성된 H<sub>2</sub>와 CO<sub>2</sub>를 분리하여 수소를 생산하는 기술(CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>분리가 핵심)이다.

우리나라는 대부분 연소후 포획 위주로 많은 연구가 진행되어 왔다. 하지만 최근 고유가 시장이 형성되면서 석탄화력발전 및 복합가스발전(IGCC)에 필요한 연소전 탈탄소화(H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> 가스로부터 CO<sub>2</sub> 회수) 연구에 산업적 관심이 급상승되고 있다. 특히, 연소전 탈탄소화 과정에서는 높은 자체압력(약 2.5 - 5.0MPa)과 비교적 높은 농도의 CO<sub>2</sub>(약 40%)가 발생되기 때문에, 연소전 탈탄소화는 가스하이드레이트 형성/분해 원리가 가장 잘 적용될 수 있는 기술이라 할 수 있다.

본 연구에서는 가스 하이드레이트 형성원리를 이용하여 정온 정압 조건에서 CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> 하이드레이트를 제조하였으며 특히, 하이드레이트 형성 촉진제인 THF(Tetrahydrofuran)와 TBAB(Tetra-n-butyl ammonium bromide)를 첨가하여 각각 0.5, 1, 3mol% 농도에 따른 상평형 및 속도론 실험을 수행 하였다. 또한 라만 분석을 통하여 CO<sub>2</sub> 회수 분리에 대한 연구도 병행하였다. 이러한 연구는 연소전 탈탄소화 기술에서의 CO<sub>2</sub> 회수 분리에 대한 핵심 연구임과 동시에 탄소배출권 규제에 실질적인 기여를 할 수 있을 것으로 사료된다.

**Key words** : Gas Hydrate(가스하이드레이트), post-combustion(연소후 포획), Pre-combustion(연소전 탈탄소화), CO<sub>2</sub> recovery(이산화탄소 회수율)

E-mail : \*speedstar1004@nate.com, \*\*yangdo@pusan.ac.kr