

Adsorption isotherms prediction of methanol on simulated activated-carbon using GCMC (Grand Canonical Monte Carlo) method

손혜정, 박재남, 임영일*
한경대학교
(limyi@hknu.ac.kr*)

최근 생명공학의 발전과 더불어 중요시되는 단백질과 같은 생물분자의 분리를 위하여 크로마토그래피 흡착공정에 많은 관심이 집중되고 있다. 이에 따라 실험적 규모에서 상업적 규모로의 보다 신속한 공정개발을 위해 공정모사가 요구된다. 하지만 모사에서 필요로 하는 흡착물질의 흡착평형식은 일반적으로 실험을 통해 구해야 한다.

본 연구에서는 분자규모의 모사를 통하여 흡착평형식을 예측한다. 분자규모의 모사는 Accerlys사의 Materials Studio 4.0의 Forcite 모듈을 이용하여 구조를 최적화 시키고, Sorption 모듈을 이용하여 흡착평형식과 분자 사이의 에너지 등을 예측한다. 이때 분자통계역학은 GCMC (Grand Canonical Monte Carlo) 방법으로 계산된다.

이를 통하여 얻은 활성탄에서 메탄올의 흡착평형식의 모사결과는 실험적으로 얻은 값과 일치함을 보여준다.