

### Molecular simulation on carbon slit pores for CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub> membrane separation

김성희, 임영일\*, [Thanh D.B Nguyen](mailto:Thanh.D.B.Nguyen)

한경대학교

(limyi@hknu.ac.kr\*)

최근 지구온난화의 주범으로 인식되어온 이산화탄소 (CO<sub>2</sub>) 양의 저감을 위해 신재생 에너지에 대한 관심이 높아지고 있다. 본 연구에서는 신재생 에너지 중의 하나인 바이오 가스의 정제 기술 중 분리막 공정에 대하여 기술한다. 바이오 가스의 주성분인 CH<sub>4</sub>에 섞여있는 CO<sub>2</sub>의 분리를 위하여 사용하는 분리막 중의 하나인 CMS (Carbon Molecular Sieve) 에 대한 분자모사를 carbon slit pore 에서 수행하였다. 분자모사 기법에는 흡착제의 구조 최적화를 위하여 COMPASS (Condensed-phase Optimized Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies) force field 가 사용되었고, 등은 흡착식을 예측하기 위하여 GCMC (Grand Canonical Monte Carlo) 방법을 사용하였다. 또한 MSD (Mean Squarer Displacement) 를 통하여 확산계수를 구하고, 흡착값과 확산계수값을 이용하여 CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub> 이성분계에서의 분리 선택도를 계산하였다.