

金属有機構造体 MIL-101(Cr)を用いた高炉ガスからの CO₂ 分離・回収技術に関する理論的研究

(千葉工業大学¹) ○米津 直弥¹・山本 典史¹

Theoretical Study on CO₂ Separation and Capture Technology from Blast Furnace Gas using Metal-Organic-Framework MIL-101 (¹Chiba Institute of Technology)
○Naoya Yonetsu,¹ Norifumi Yamamoto¹

Metal-organic-Frameworks (MOFs) are functional nanoporous materials that can be utilized for CO₂ Capture, Utilization and Storage (CCUS). MIL-101 is one of the MOFs that exhibit thermal stability, high porosity, chemical stability and high moisture resistance, but its behaviour under high temperature conditions has been unclear. In this study, the adsorption and diffusion behaviors of CO₂ gas in MIL-101 were theoretically investigated by using the grand canonical Monte Carlo (GCMC) simulation. Based on the results of the GCMC simulations, we clarified that the amount of adsorbed CO₂ gas in MIL-101 decreased significantly under a high-temperature condition (423 K) compared to a room temperature condition (298 K). For example, under the conditions of blast furnace gas (423 K, 250 kPa), the difference between the adsorbed amounts of CO₂ and N₂ on MIL-101 is 1.7 cm³/gr, indicating a very low separation. When using MIL-101 to separate CO₂, it is necessary to cool the gas sufficiently.

Keywords: Molecular Simulation; Metal-organic-Framework; Adsorption isotherm; diffusion coefficient; CCUS

CO₂ の回収・利用・貯蔵 (CCUS) の基盤技術として、多孔質材料である金属有機構造体 (MOF) が注目を集めている。MIL-101 は、優れた熱安定性・高気孔率・化学的安定性・高耐湿性を示す MOF のひとつであるが、高温条件下での振る舞いが明らかではなかった。本研究では、分子シミュレーションに基づいて、MIL-101 中における CO₂ ガスの吸着・拡散挙動を解析した。得られた吸着等温線を解析した結果、高温条件 (423 K) では、室温条件 (298 K) に比べて、MIL-101 への吸着量が大きく減少することが明らかになった。具体的には、高炉ガスの温度と圧力下 (423 K, 250 kPa) では、CO₂ と N₂ の吸着量差が 1.7 cm³/gr 程度と非常に小さいため、MIL-101 を用いて CO₂ を分離する場合には、排ガスを十分に冷却する必要があると考えられる。

