

Adsorption News

Vol. 27, No. 1 (April 2013)

通巻 No.104

目 次

○卷頭言.....	2
会長就任にあたって	寺岡 靖剛
○研究ハイライト.....	3
高選択的分子吸着機能を有する多孔性金属錯体の設計と合成	
松田亮太郎	
○技術ハイライト.....	11
P S A法による高炉ガスからの炭酸ガス分離技術の開発	
齊間 等	
○会 告.....	16
第27回日本吸着学会研究発表会のお知らせ	
第22回吸着シンポジウム（吸着夏の学校）開催のお知らせ	
編集局移転のお知らせ	
○11 th International Symposium on the Fundamentals of Adsorption (FOA 11) プログラム.....	20
○関連学会のお知らせ.....	36
○維持会員一覧.....	38

日本吸着学会
The Japan Society on Adsorption

卷頭言

会長就任にあたって

九州大学大学院総合理工学研究院

寺岡 靖剛



このたび迫田章義前会長の後任として2013年度、2014年度の日本吸着学会会長を仰せつかりました。学会発展のために微力ではありますが銳意努力する所存ですので、会員の皆様にはご協力、ご支援を宜しくお願ひ申し上げます。

自己紹介も兼ねて、私と吸着学会との係わりを紹介させて頂きます。私は、触媒化学、無機材料化学を専門としています。「触媒反応には吸着がつきものだ」という誘い文句で、実のところは1997年に長崎で開催された第9回吸着シンポジウムのお手伝いをさせていただく機会に本会に入会しました。吸着学会の設立総会が1987年5月29日に開催されていますので、創立10年目に入会したことになります。日本吸着学会15周年という節目の年である2001年に事務局をお引き受けするとともに、長崎で開催されたFOA7では地元スタッフとしてお手伝いさせていただきました。2008年には九州大学筑紫キャンパスで開催された第22回吸着学会研究発表会のお世話をさせていただき、当時運営委員長であった2010年には、会員の皆様の切望であった沖縄での研究発表会の開催をお引き受けし、これは2011年11月10-12日に加納運営委員長（当時）がお世話をされた吸着学会創立25周年記念シンポジウムとともに創立25周年記念大会として開催いたしました。このように見てきますと、私は吸着学会の節目の年に関わらせて頂いていることを改めて認識する次第です。

事務局は、2001-2002年度は長崎大学で、2003年度は九州大学で担当させて頂きました。ご存じの通り、吸着学会は数年ごとの事務局移動方式をとっています。担当開始時、学会発足当初からの吸着学会の歴史ともいるべき膨大な量の事務局資料が届いた時に、移動可能なスリムな事務局体制の継続のために資料量を最低限に減らすことを決意し、実行しました。私以前の事務局担当は学会発足当時あるいは初期から関わっていた先生方でしたが、途中参加した者だからこそ過去にとらわれることなく敢行できたのかもしれません。

吸着学会の歴代会長は吸着科学・技術分野の中心でご活躍された、あるいは現在もご活躍の先生方です。

吸着学会では決して主流派に属さない私が会長を務めることに忸怩たる思いはありますが、亜流派としての視点で会長の責務を果たせばと考えています。批判や叱咤を甘んじて受ける覚悟で、私が吸着学会での活動を通して感じていることを記して、巻頭言を締めたいと思います。吸着の科学と技術を追求する吸着学会のベースの学問は、化学工学、物理化学、材料科学と理解していますが、私が入会して以来の状況を振り返ると、3分野のバランスが保たれていないと感じています。1990年初頭のメソポーラスシリカの発見を契機に、メソ多孔体、有機金属構造体(MOF)に代表される新規吸着剤の開発とそれを用いた規則空間の吸着科学が大きく進展しています。しかし、実用吸着剤としては活性炭、シリカゲルが主流でゼオライトですらまだ新参者です。一方、石油化学工業の成熟に伴い学問、研究としての化学工学が変化しているように感じています。環境問題や省・低エネルギー、省資源の観点から吸着の重要性は益々高まっています。新規吸着剤やその科学を実用化に導くことを始め、21世紀型低エネルギープロセスとしての吸着技術・工学を発信する必要があると強く感じています。近年、吸着学会は若手人材育成に力を入れていますが、真の人材育成には彼らが将来活躍する場としての吸着に関する産業と学術分野の充実・発展が不可欠です。

寺岡 靖剛

九州大学大学院総合理工学研究院 教授

略歴 1981年3月 九州大学工学部応用化学科卒業
1983年3月 九州大学大学院総合理工学研究科
材料開発工学専攻修士課程修了
1983年4月 九州大学大学院総合理工学研究
科助手
1987年7月 長崎大学工学部講師
1989年4月 長崎大学工学部助教授
1999年4月 長崎大学工学部教授
2001年10月より現職

研究ハイライト

高選択的分子吸着機能を有する 多孔性金属錯体の設計と合成

Design and synthesis of porous coordination polymers with highly selective molecular adsorption functions

京都大学 物質一細胞統合システム拠点
The Institute for Integrated Cell-Material Sciences,
Kyoto University

松 田 亮太郎
Ryotaro Matsuda

1. はじめに

標準環境温度・圧力において気体状態で存在する小分子（以下、気体分子）は、我々の身の回りの環境・エネルギー、物質合成、生命現象に至る様々なところで重要な役割を果たしている。そのため、気体分子を自在に分離、貯蔵、変換するためのテクノロジーや物質の開発は昔から求められているが、持続可能な社会の実現など現代の社会的要請から、今さらにその重要性を増している。多くの気体分子がサブナノメートルオーダーの大きさであるため、それらを包摂あるいは吸着することが可能な、2 nm以下のナノ空間を有するミクロ孔物質は、気体分子の自在制御を行うための中心的役割を果たす物質である¹⁾。活性炭やゼオライトなどの多孔性無機固体は、古くから重要なミクロ孔物質として使われていることはいうまでもないが、一方で近年、新しいミクロ孔物質の開発もめざましく、なかでも金属イオンと有機配位子で作られる多孔性金属錯体（Porous Coordination Polymers / PCPsあるいはMetal Organic Frameworks / MOFs）はその構造多様性と特異な細孔特性から非常に注目されている^{2,3)}。ミクロ孔物質を用い、気体分子を選択的に識別して吸着・分離を行うためには、気体分子の化学的・物理的・幾何学的特徴を詳細に捉え、それらの違いを認識できるミクロ孔物質をデザインし合成することが必要である。代表的な気体分子に関して、沸点と分子サイズ（Kinetic diameter）のそれぞれを横軸と縦軸にプロットした（図1）。気体が凝縮する温度は気体分子間の相互作用の大きさに依るので、沸点は分子間

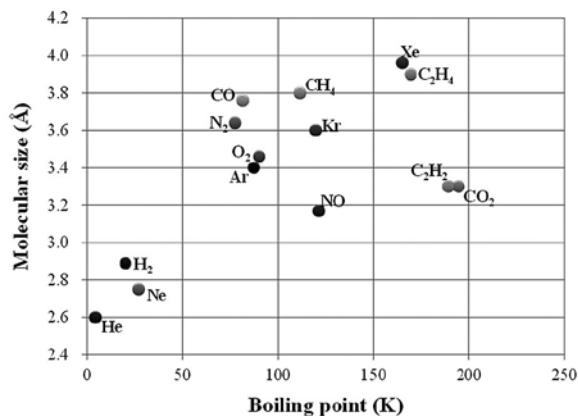


図1. 代表的な小分子の沸点と分子サイズの関係…

相互作用の大きさの指標となる。単純な物理吸着を考えた場合、プロットした点が離れている分子同士は性質が大きく異なっており、それらを分離することは原理的には容易であるが、プロットした点が近接している分子同士は、分子の特性が似通っており、ミクロ孔物質で片方の分子を物理吸着によって選択的に分離することは、通常難しいと考えられる。一方、多孔性金属錯体は有機配位子と金属イオンを組み合わせて合成することから、多様な構造を設計し、構造体を組みあげることが可能であり、有機配位子や金属イオンの配位環境を変化させることにより、細孔の表面の性質、細孔のサイズや形状、フレームワークの動的な特性を様々に変化させることができる。そのため、細孔のサイズや細孔表面の物理的・化学的性質を様々に変化させて構造体を組みあげ、通常では難しい選択的な吸着特性を実現できると期待される。ここでは主に気体分子の選択的な吸着に焦点を置き、多孔性金属錯体の設計と合成から、分子吸着特性までを例を挙げて紹介する。

2. アセチレンの高選択吸着

多孔性金属錯体が有する特筆すべき性質の1つは、フレームワークに用いる有機分子の性質を細孔に直接反映させられることである。たとえば、有機分子にヒドロキシル基を導入し細孔表面改質して親水性ゲスト分子の吸着力を上げたり、有機分子に不齊点を導入し、光学活性なゲスト分子に対して片方の光学異性体を選択的に取り込んだり、また不齊触媒反応を行う反応場として用いることなどが試みられている⁴⁾。もう1つ重要な点は、多孔性金属錯体のほとんどは結晶性固体であり、有機分子の官能基も規則的かつ均一に細孔表

面に存在しているということである。もし吸着したゲスト分子と細孔表面の官能基との立体的な配置がうまく合致すれば、細孔空間の立体的な効果と官能基の化学的な効果が相乗的にゲスト分子に対して影響を及ぼし、強くゲスト分子を捕らえられると期待できる。

著者らが Coordination Pillared Layer Structures (CPL-0) シリーズと呼ぶ一連の化合物は $[\text{Cu}_2(\text{pzdc})_2\text{L}]$, (pzdc = pyrazine-2,3-dicarboxylate, L = ピラー配位子) の一般組成を有する多孔性金属錯体である⁵⁻⁹⁾。CPL-0 シリーズは銅(II) と pzdc によってレイヤー構造を形成し、ピラー配位子 L によってそれを連結した構造を有している。また、ピラー配位子は 1 軸方向に関してピラー同士の間隔が非常に近接しているため、レイヤーとピラーで区切られる細孔は 1 次元の空間となっている。また、CPL-0 シリーズはピラー配位子をピラジンや 4,4'-ビピリジン (bpy) など様々に変化させて細孔の大きさを調節できる特徴を有している。これまでに、CPL-0 シリーズの中で $4 \times 6 \text{ \AA}$ と最も小さな細孔断面サイズの 1 次元細孔を有する CPL-1 を用いて、細孔中に酸素分子を 1 次元に並べることが実現されている。また、ラマン分光測定により、この細孔中の酸素分子は固体酸素に約 2 GPa という巨大圧力をかけたのと同程度の圧を感じているということが明らかにされている⁶⁾。この結果から CPL-1 の小さな細孔は 2 原子分子程度の大きさのゲスト分子に対して特別な相互作用がなくとも、非常に強い束縛効果を示すことがわかった。もし分散力以外の水素結合など指向性の相互作用が働くゲスト分子をこの小さな細孔へ吸着させた場合、細孔が有している束縛効果に加えて、付加的な相互作用が相乗的に働き、特異的な吸着を実現できのではないかと考えられた。

合成後の CPL-1 の細孔内には、合成溶媒である水分子が細孔 1 つあたり 2 分子取り込まれている。その水分子は細孔表面に露出しているカルボキシル基由来の塩基性の酸素原子と水素結合しており、チャンネル方向に水分子の 1 次元鎖が形成されている。著者らはこの細孔表面の酸素原子が機能的に働けば、他の酸性もしくは水素結合性のゲスト分子に対しても特異的な吸着を示すのではないかと考え、種々のゲスト分子に対して吸着実験を検討した。その結果、分子両末端に酸性の水素原子を有するアセチレンに対して非常に特異な吸着挙動を示すことを明らかにした。

二酸化炭素はアセチレンとサイズおよび沸点などの物理化学的性質が酷似しているため、通常の吸着剤で

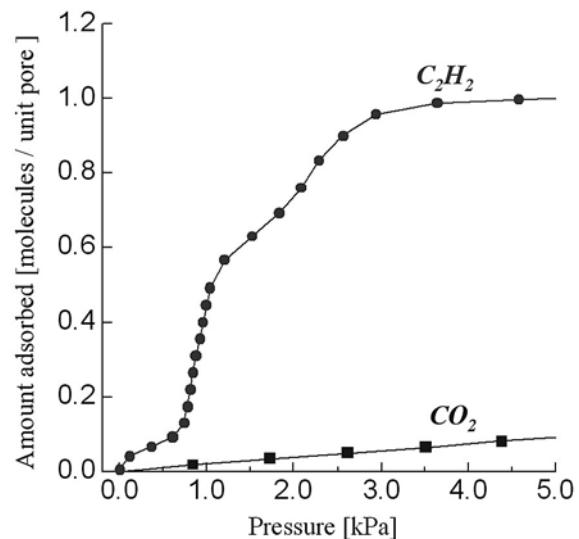


図 2. 270K における CPL-1 の C_2H_2 と CO_2 の吸着等温線

は同様の吸着挙動を示す。したがって二酸化炭素とアセチレンの吸着挙動を比較すれば、CPL-1 の細孔壁に露出する酸素原子の効果を検討できる。図 2 は 270K における CPL-1 へのアセチレンと二酸化炭素の吸着等温線である。二酸化炭素は 5 kPa までの低压領域でほとんど吸着しないが、アセチレンは低压で急激に吸着が起こり 4 kPa でほぼ飽和に達している。そのためアセチレンと二酸化炭素の吸着量の差は最大で 26 倍量にもなった。さらに等量吸着熱もアセチレンの方が 10 kJ/mol も大きく、吸着によるアセチレンの安定化が顕著に示される結果であった。また、吸着量が細孔 1 つに対して 1 分子であることは吸着されたアセチレン分子が 1 次元細孔中で、細孔の規則性と整合性のとれた構造体を形成していることを示唆していた。

そこでこのアセチレンの吸着現象を構造的に解明することを目指し、放射光を用いた粉末 X 線回折測定と MEM (Maximum Entropy Method) / Rietveld 法^{10,11)} を用いて、吸着前後における細孔構造を明らかにした。吸着前の構造では水分子が取り除かれ、空孔には何も存在していないが、吸着後はアセチレンが細孔の中心に 1 つ取り込まれていることがわかった。興味深いことに、棒状のアセチレン分子はその向きを細孔壁の酸素原子へ向け、あたかも酸素原子に抱えられているような構造であった (図 3)。構造解析の結果を用いて、MEM による細孔の電子密度分布を計算してみると、アセチレンの水素原子と細孔の酸素原子の間に $0.21 \text{ e}/\text{\AA}^3$ の電子密度が観測され、細孔壁とゲスト分子の間の電子的な相互作用が直接的に確認された。

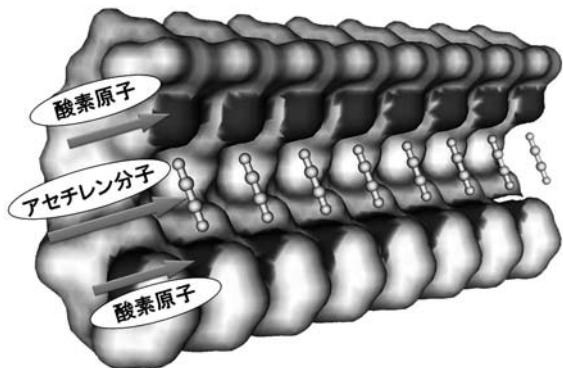


図3. アセチレンを吸着したCPL-1の構造

また細孔内部の空孔では、アセチレン分子は極めて高密度に存在し、通常の気相では起こりえない状態であることもわかった。アセチレンは非常に反応活性な分子で、たった2気圧の加圧で分解爆発の危険性のある気体であることが知られている。CPL-1の細孔1つあたりの細孔容積は99.7 Å³であり、その空孔にアセチレンが1つ入っているので、その空間充填密度は0.44 g / cm³となる。一方、2気圧に加圧したときのアセチレンの気体密度は0.0021 g / cm³である。つまり、CPL-1の細孔内部のアセチレン密度は爆発限界の約200倍もの密度に濃縮されているという状態であることがわかった。これは、アセチレンのような爆発性の気体でも細孔中において、決まった配向で整然と配列して吸着すれば、爆発的な反応を阻害して分子を吸着することが可能であることを示す結果であった⁸⁾。

3. 柔軟骨格を有する多孔性金属錯体

1990年代から2000年代初頭までの多孔性金属錯体の研究は、堅牢な骨格を有する物質を設計し合成することが目標であった。しかしその後、物理的・化学的刺激に応答して結晶構造を変化可能な動的構造体を構築できることがわかってきた³⁾。これらの構造変換プロセスでは、(1)配位結合の開裂・生成^{7,12,13)}、(2)水素結合の開裂・生成^{14,15)}、(3)有機分子の回転や配向の変化¹⁶⁻¹⁸⁾を伴うものが多く見出されている。我々は動的な構造変換可能な構造体を設計し、ゲスト吸着特性変化させることを試みてきた。本項ではその一例を示す。

2次元あるいは3次元の骨格構造を有する多孔性金属錯体の一部は構造体が絡み合った相互貫通（インターペネットレーション）構造をとることが知られている。一般に相互貫通の多重度が上がると細孔容量が小

さくなり、その結果構造体が固く安定になり、その反対に多重度が下がると細孔容量が大きくなり構造体が柔軟になる。著者らは同じ構築素子を用いながら、多重度の異なる多孔性金属錯体を合成することに成功した¹⁹⁾。Zn(NO₃)₂ · 6 H₂O、bpy およびジチオフェンジカルボン酸(dtbc)をDMF中で混合すると [Zn₂(btdc)₂(bpy)]（錯体1）の組成を有するジャングルジム型の3次元骨格が3重に相互貫通構造をした物質を得る事ができる。一方、合成溶媒に分子サイズの大きなベンゼンを反応溶液に加えDMF/ベンゼンの混合溶媒中で合成すると、全く同じ組成であるが2重に相互貫通した化合物（錯体2）が得られた（図4）。これらの化合物の195Kにおける二酸化炭素吸着等温線を測定すると、錯体1は低圧で急激に吸着量が増大するI型の等温線を示すが、錯体2は低圧の急激な立ち上がりに加え、相対圧0.3付近で変曲点を示し、吸着量が不連続に増大するプロファイルを示した。詳細な粉末X線回折測定の結果、錯体1は剛直な骨格であるため、吸着過程において構造変化を示さないのに対して、錯体2は不連続点で構造の拡大が起こっていることが明らかとなった。本物質は選択的な吸着を示すものではないが、多孔性金属錯体の骨格柔軟性が特異な吸着特性を発現させることを示す代表的な例である。

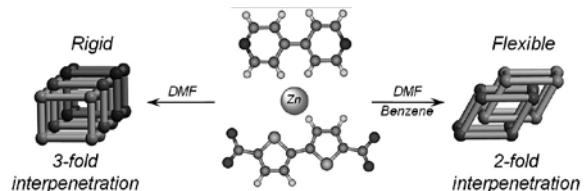


図4. 相互貫通の多重度の異なるPCPの合成スキーム…

4. 水素結合でゲートを開閉する多孔性金属錯体

本項では、細孔表面の水素結合能と骨格柔軟性が複合的に機能し、細孔の開閉が可能な多孔性金属錯体について紹介する²⁰⁾。著者らは新しい配位子L = 2,5-ビス(2-ヒドロキシエトキシ)-1,4-ビス(4-ピリジル)ベンゼンを合成した。この配位子は中心のベンゼン環の1,4位に配位サイトとして2つの4-ピリジル基がついており、中心のベンゼン環が回転できるようになっている。また、2つの2-ヒドロキシエトキシ基は水素結合性のゲスト分子と相互作用できると共に、ベンゼン環の回転運動のしやすさを変化させるアンカーとしての役割を果たすものと期待した。この配位子LとH₂pzdc およびCd (NO₃)₂をエタノール / 水の

混合溶液中で反応させ、 $\{[\text{Cd}_2(\text{pzdc})_2\text{L}(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 5(\text{H}_2\text{O}) \cdot (\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH})\}_n$ (CPL-201)を得た。単結晶構造解析の結果、CPL-201はCPL-0シリーズと同様に金属イオンとpzdcで2次元レイヤー状構造を形成し、その2次元シートを配位子Lが連結するピラードレイヤー型の構造であった。合成時のCPL-201は約 $7 \times 5 \text{ \AA}^2$ のチャンネル断面をもつ1次元細孔を有しており、チャンネル内部の空間は合成溶媒であるエタノールと水で満たされていた。興味深いことに、CPL-201は結晶性を保ったまま段階的に内部のゲスト分子を取り除くことが可能であり、それぞれの中間状態の結晶構造を決定することができた。合成直後の構造ではレイヤー間距離は 14.9 \AA であり、中心のベンゼン環の π 電子平面が細孔表面となり、側鎖はチャンネル方向へ向き、広い細孔空間を確保していた。CPL-201を 298 K で窒素雰囲気中に置くと内部のゲスト分子の一部が抜け、レイヤー間距離が 12.7 \AA に収縮した。また中心のベンゼン環が90度回転して、ゲスト分子が抜けたことによって生じる空隙を補完していた。この中間状態の結晶をさらに窒素雰囲気中で 383 K に加熱すると、細孔に残っていたゲスト分子のすべてと、Cdイオンに配位していた水分子のすべてが取り除かれた。その結果、レイヤー間は 11.2 \AA までに収縮するとともに、興味深いことに側鎖の水酸基が別の隣の側鎖の水酸基と水素結合することによって、側鎖とベンゼン環が固定されるとともに、細孔空間のまったくない非多孔体へと変化していた。

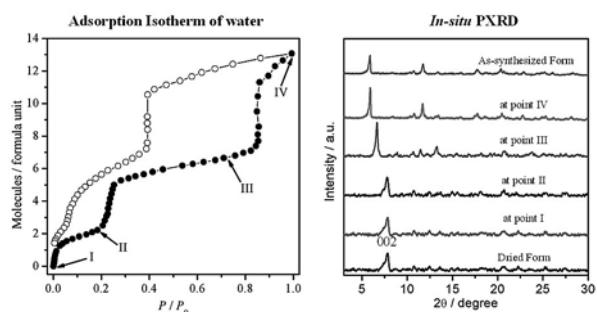


図5. CPL-201の水の吸着等温線とin-situ PXRDパターン…

このように段階的な構造変化を伴う珍しいゲスト脱着現象を示したことから、逆にCPL-201の吸着挙動に興味がもたれた。そこでまずCPL-201の水の吸着挙動を調べるために、 298 K での水の吸着等温線測定を行った。その結果、図5に示すように3段階の吸着を示す等温線が得られた。等温線中のI、II、III、IVのそれぞれの点で粉末X線回折測定を行い、単結晶X

線結晶構造解析の結果との比較を行った結果、次のメカニズムで吸着が起こっていることがわかった。IからIIの間ではレイヤー間距離は変化せず、フレームワークの大きな構造変化を伴わないで、配位不飽和となっているCdサイトへ水が配位する。続いてIIからIIIの間ではレイヤー間を押し広げ細孔空間を形成しそこへ水分子が吸着される。また、このプロセスで側鎖の2-ヒドロキシエトキシ基間の水素結合がゲストの水分子によって開裂し、側鎖とベンゼンの固定が解かれ動的特性が向上した状態となる。そしてIIIからIVの過程では、レイヤー間が完全に広がるとともに、ベンゼン環が回転して大きな細孔空間を獲得し、多くの水分子を取り込む。この変化を模式的に表すと図6のようになり、側鎖はあたかもベンゼン環で作られるゲートを側鎖間の水素結合でロックし、ゲスト分子の細孔への出入りを制御しているかのように見える。

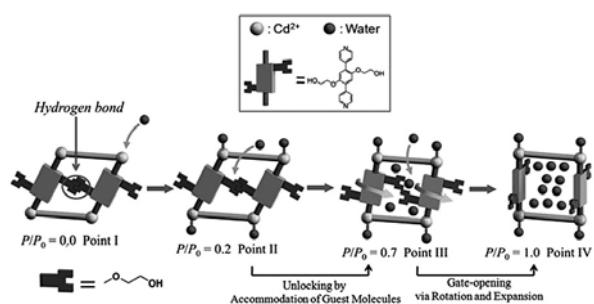


図6. CPL-201の水吸着メカニズムの模式図…

続いてCPL-201に対する他のゲスト分子の吸着挙動についても検討を行った。メタノールは水素結合性の分子であるため予想通り、比較的容易にゲートを開けて吸着されることがわかった。一方、二酸化炭素は高相対圧領域まで吸着されないが、相対圧 0.9 付近で急激な構造変化を伴って吸着が起こった。これは二酸化炭素の水素結合能が非常に弱く、ゲートを開けることが難しいためであると考えられる。この等温線のように高相対圧で一気に吸着し、非常に大きなヒステリシスを伴って脱着する吸着挙動は非常に珍しく、ゲートを有する多孔性金属錯体で可能になった吸着特性である。

5. 電荷移動相互作用に基づくNO、O₂の選択的吸着

上記のように選択的吸着を実現する1つの手法は、ホスト-ゲスト間のある相互作用の大きさが特定のゲスト分子に対してのみ大きい、あるいは小さいことを

見出し、その相互作用が顕著に吸着挙動に影響する細孔表面を構築することである。我々は、電子構造を柔軟に変化できるTCNQ(7,7,8,8-テトラシアノ-p-キノジメタン)を用いて多孔性金属錯体を合成することを考えた^{21,22)}。一般にTCNQは中性状態では電子受容性を示し、2電子還元状態では電子供与性を示すことから、TCNQで作られた細孔表面は酸化還元活性なゲスト分子と電荷移動相互作用することが期待できる。またTCNQは4つのシアノ基を有し、これが配位部位として働くことによって高次元構造を構築することが可能である。

$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 、bpyおよびTCNQの一電子還元体の塩である $[Li^+(TCNQ)]^-$ をメタノール/ベンゼンの混合溶液中で反応させると、 $\{[Zn(TCNQ)_2bpy] \cdot 1.5C_6H_6\}_n$ の組成を有する緑色の結晶(錯体3)が得られた。結晶構造解析の結果、反応系中で2つのTCNQアニオンが7位の炭素間でシグマ結合を形成し二量化しており、II価のアニオン配位子 $(TCNQ_2)^{2-}$ となっていた。亜鉛は6配位8面体構造をとり、4つのequatorial位に $(TCNQ_2)^{2-}$ が配位し、2つのaxial位にbpyが配位して、3次元構造を形成していた(図7)。錯体1は広い細孔空間が狭い通路でつながった蛇腹構造を有していた。広い細孔空間では合成溶媒のベンゼン1分子がTCNQのπ平面がつくる2面の壁からCH-π相互作用を介して近距離で相互作用しており、ベンゼンを除去すれば、ゲスト分子はTCNQと直接近距離で相互作用可能であることが示唆された。

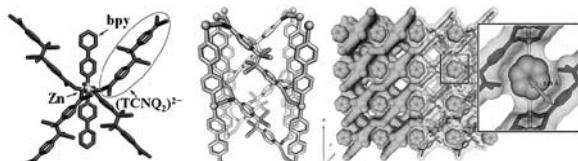


図7. 錯体3の構造

そこでゲスト分子に対する吸着特性を検討するために、様々なガスの吸着等温線測定を行った。その結果、図8に示すように、二酸化炭素、アセチレン、アルゴン、窒素、一酸化炭素はほとんど錯体3に吸着されないので対して、一酸化窒素と酸素はゲートオープン型の吸着挙動を示し、大量に錯体3に取り込まれることがわかった。このようなゲートオープン型の挙動で酸素と一酸化窒素に対して選択的に吸着する例は他にな

く、非常に特異な現象である(図8)。

この選択性を理解するために、酸素吸着状態におけるIn situのIRおよびRaman測定を行った。TCNQ配位子のCN結合の伸縮振動に由来する吸収は脱ガス構造では 2138 cm^{-1} 及び 2192 cm^{-1} に観測されたが、酸素を吸着した状態ではそれらは高エネルギーshiftし 2213 cm^{-1} 及び 2156 cm^{-1} に観測された。このことはTCNQがラジカルアニオン状態から、より負電荷が少なくなった電子状態へ変化し、それに伴ってCNの三重結合性が強くなったことに起因している。一方、Raman測定によって、酸素分子のRamanシフト $\nu(O=O)$ が 1454 cm^{-1} に観測された。通常の固体酸素の値は 1552 cm^{-1} であるから、 50 cm^{-1} ほど低エネルギーshiftしていることになる。酸素の一電子酸化体の O_2^- が 1145 cm^{-1} に観測されることから、ホスト-ゲスト間で一電子すべてが移動しているわけではなく、配位子のTCNQ-から酸素分子へ部分的な電子移動が起こっていると推測できる。一酸化窒素と酸素のみ選択的に吸着される原因是、ゲスト分子の基底状態と一電子還元状態のエネルギー差(すなわち一電子還元による不安定化の度合い)がひとつの指標となることがわかった。酸素および一酸化窒素のそれはそれぞれ4および 32 kJ/mol であるのに対し、二酸化炭素、アセチレン、アルゴン、窒素、一酸化炭素はそれぞれ 351 、 172 、 332 、 242 、 186 kJ/mol と極端に高くなっている。以上の結果から、一酸化窒素と酸素は、他の分子と比較して電子受容性が強く、TCNQ-でできた電子供与性の細孔表面と部分的な電子移動が可能なために、このような選択的吸着挙動が見られたものと考えられる。

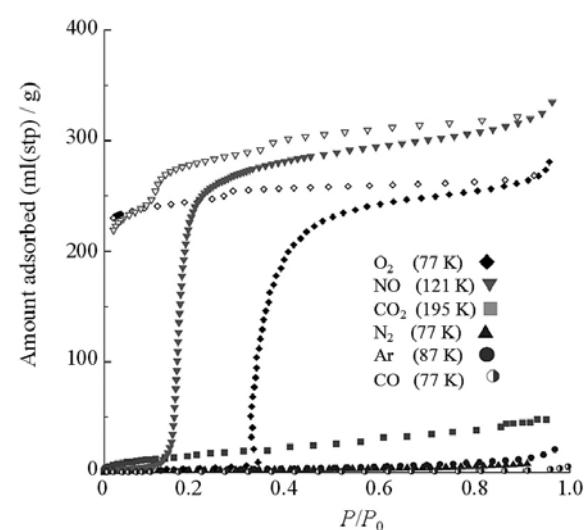


図8. 錯体の様々なガスに対する吸着等温線…

えられる。また、ゲート型の吸着からも示唆されるように、この錯体は吸着に際して大きな構造変化を伴う。電荷移動相互作用に加えて、構造変化も選択性の発現に何らかの寄与をしていると考えられる。

6. 光応答性多孔性金属錯体

選択的吸着を実現するためにはビルディングブロックとなる有機配位子や金属イオンの配位状態を工夫し、吸着活性点を細孔表面へ導入することが重要であることを述べてきた。しかしながら、選択性をあげるために有機配位子を高活性にしていくことには限界がある。通常、多孔性金属錯体は溶液中で、室温以上で合成を行う。このような反応条件において、有機配位子をあまりに反応活性にしてしまうと、反応系中の溶媒分子や有機配位子、あるいは金属イオンと副反応を起こし、失活してしまう。その問題を解決するために、我々は活性種の前駆体となる比較的安定な配位子を用いて多孔性金属錯体を合成し、後から外的刺激を加えて細孔を活性化することを考えた(図9)。この手法により、通常では多孔性金属錯体の合成中に失活してしまうような活性種を細孔内部に発生させることができただけなく、任意のタイミングで細孔を活性化しゲスト分子をトラップしたり、反応させたりすることが可能となり、まったく新しいオンデマンド型吸着が可能な多孔体を創製できると考えた。前駆体としてはアリールアジドを用いることとした。アリールアジドは紫外光を照射することによって、窒素を放出して電子的に活性な開殻構造を有するナイトレンを生成することが知られている。このナイトレンは一酸化炭素や、酸素分子と速やかに反応して、イソシアナートやニトロ化合物を与える。

5-アジドイソフタル酸、bpy および $Zn(NO_3)_2$ ·

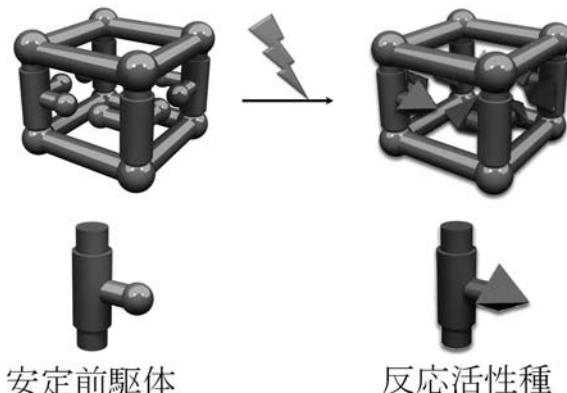


図9. 光反応による細孔活性化の模式図…

$6H_2O$ をDMF / メタノールの混合溶液中で反応させ、無色の結晶 $[Zn_2(N_3-ipa)^2(bpy)^2(DMF)1.5]_n$ (CID- N_3)を得た。CID- N_3 はレイヤーがかみ合ったインターディジテイト構造を有しており、レイヤー間に細孔断面サイズが $5 \times 6 \text{ \AA}^2$ の1次元チャンネルを有していた。アジド部位は細孔表面に露出しており、もし光照射によってナイトレンを生成することができれば、ゲスト分子と特異的に反応することが期待できる構造であった。そこで、真空条件下でCID- N_3 に紫外光照射を行い、In situでのIR、ESRおよび放射光を用いた単結晶X線回折測定を行った。IRスペクトルでは光照射に伴いアジド基由来の 2200 cm^{-1} 付近の吸収が減少し、またESRスペクトルではナイトレンとその平衡状態にあるビラジカル体のシグナルが観察された。さらに単結晶X線構造解析にも成功し、細孔表面にナイトレンが発生していることがわかった。続いて酸素を吸着させた状態で光を照射すると、発生したナイトレンが酸素分子を化学的にトラップできるかどうかの実証を試みた。120 KにおいてCID- N_3 に十分酸素を吸着させ、その後光照射を行った。In situのIR測定によって反応を追跡し、反応が進行しなくなったところでサンプルを回収し、塩酸水溶液に溶解させ分析を行った。その結果、未反応の配位子の他に2種類イソフタル酸誘導体が存在することがわかった。1つは予想通りナイトレンが酸素分子と反応しニトロ基に変換された、5-ニトロイソフタル酸であった。もう一方は、酸素1原子がナイトレンと結合したニトロソ基を有する5-ニトロソイソフタル酸であった。ナイトレンと酸素の反応でニトロソ化合物を生成し単離した例は非常に珍しく、制限されたナノ空間で反応が起きたためであると考えられる。一酸化炭素に関しても同様の実験を行った結果、IRスペクトルの変化から細孔表面のナイトレンは一酸化炭素をトラップし、イソシアナート基へと変換できることがわかった。

オンデマンド型の吸着を実現するために、光照射を行ながら吸着測定を行い、光照射が吸着挙動に及ぼす効果の検討を行った。CID- N_3 は77 Kでほとんど酸素を吸着しないことがわかっていた。そこで、この条件で光を照射しながら吸着等温線測定を行ったところ、吸着量の著しい増加が観測された。In situで光反応を完全に進行させられず、反応したアジドの量は15%であったが、光反応したサンプルの酸素吸着能を見積もったところ、光照射前のCID- N_3 に比べ最大で29倍以上の酸素吸着能があるとわかった(図10)。この実

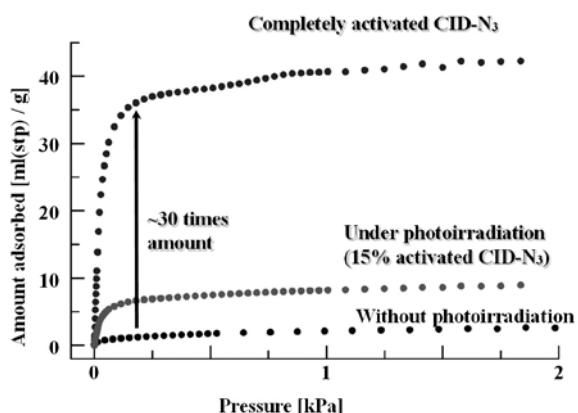


図10. 光活性化前後におけるCID-N₃の酸素吸着等温線…

験から、ゲスト分子を「光」という外部刺激によって任意にトラップし変換可能であることを示した（図11）²³⁾。最近では光反応によって細孔構造を変化させたり、細孔の次元性を変化させることにより、吸着特性を変化させる試みも行っている²⁴⁾。

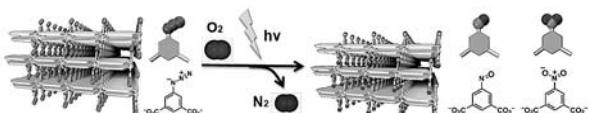


図11. CID-N₃の光活性化と選択的ガス吸着の模式図

7.まとめ

多孔性金属錯体の魅力は物質の多様性にある。新しい有機配位子と金属を組み合わせてできた多孔性金属錯体は必然的に新物質であり、新しい多孔性機能を有する可能性を秘めている。ゲート型吸着に代表されるように、多孔性金属錯体の中にはミクロ孔を有しながらI型とはかけ離れた等温線を示すものも見つかってきており、従来材料ではみられなかった特異な選択的吸着を示すものを合成できることができた。その一方で、特異な吸着現象の基礎的な理解はあまり進んでいない。今後はさらに新しい多孔性金属錯体の開発を進めると共に、多孔性金属錯体の特異な吸着挙動の基礎的理解を深め、イノベーションをもたらすような新しい多孔性物質として発展させていきたい。

8. 謝辞

本研究を行うにあたり、ご支援いただきました北川進教授（京都大学）に深謝いたします。本研究は京都大学の学生およびJST・ERATO研究員諸氏、また多

くの共同研究者の方々の協力を得て行ったものであり、心より感謝申し上げます。

【参考文献】

- F. Schüth, K. S. W. Sing and J. Weitkamp, *Handbook of Porous Solids, volume 1*, WILEY-VCH, Weinheim, (2002).
- S. Kitagawa and R. Matsuda, *Coord. Chem. Rev.* **251**, 2490 (2007).
- S. Kitagawa, R. Kitaura and S.-i. Noro, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **43**, 2334 (2004).
- J. S. Seo, D. Whang, H. Lee, S. I. Jun, J. Oh, Y. J. Jeon and K. Kim, *Nature*, **404**, 982 (2000).
- M. Kondo, T. Okubo, A. Asami, S. Noro, T. Yoshitomi, S. Kitagawa, T. Ishii, H. Matsuzaka and K. Seki, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **38**, 140 (1999).
- R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, T. C. Kobayashi, K. Kindo, Y. Mita, A. Matsuo, M. Kobayashi, H.-C. Chang, T. C. Ozawa, M. Suzuki, M. Sakata and M. Takata, *Science*, **298**, 2358 (2002).
- R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, T. C. Kobayashi, S. Horike and M. Takata, *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 14063 (2004).
- R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, R. V. Belosludov, T. C. Kobayashi, H. Sakamoto, T. Chiba, M. Takata, Y. Kawazoe and Y. Mita, *Nature*, **436**, 238 (2005).
- D. Li and K. Kaneko, *J. Phys. Chem. B*, **104**, 8940 (2000).
- M. Takata, E. Nishibori and M. Sakata, *Z. Kristallogr.*, **216**, 71 (2001).
- H. M. Rietveld, *J. Appl. Cryst.*, **2**, 65 (1969).
- R. Kitaura, K. Fujimoto, S. Noro, M. Kondo and S. Kitagawa, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **41**, 133 (2002).
- S.-i. Noro, R. Kitaura, M. Kondo, S. Kitagawa, T. Ishii, H. Matsuzaka and M. Yamashita, *J. Am. Chem. Soc.*, **124**, 2568 (2002).
- K. Uemura, K. Saito, S. Kitagawa and H. Kita, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 16122 (2006).
- K. Uemura, S. Kitagawa, M. Kondo, K. Fukui, R. Kitaura, H.-C. Chang and T. Mizutani, *Chem.,*

- Eur., J.*, **8**, 3586 (2002).
- 16) S. Takamizawa, E.-i. Nakata, H. Yokoyama, K. Mochizuki and W. Mori, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **42**, 4331 (2003).
- 17) E. Y. Lee, S. Y. Jang and M. P. Suh, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 6374 (2005).
- 18) S. Horike, R. Matsuda, D. Tanaka, S. Matsubara, M. Mizuno, K. Endo and S. Kitagawa, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **45**, 7226 (2006).
- 19) S. Bureekaew, H. Sato, R. Matsuda, Y. Kubota, R. Hirose, J. Kim, K. Kato, M. Takata, S. Kitagawa, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **49**, 7660 (2010).
- 20) J. Seo, R. Matsuda, H. Sakamoto, C. Bonneau and S. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 12792 (2009).
- 21) S. Shimomura, S. Horike, R. Matsuda, S. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, 10990 (2007).
- 22) S. Shimomura, M. Higuchi, R. Matsuda, K. Yoneda, Y. Hijikata, Y. Kubota, Y. Mita, J. Kim, M. Takata and S. Kitagawa, *Nat. Chem.*, **2**, 633 (2010).
- 23) H. Sato, R. Matsuda, K. Sugimoto, M. Takata and S. Kitagawa, *Nat. Mater.*, **9**, 661 (2010).
- 24) H. Sato, R. Matsuda, M. H. Mir, *Chem. Commun.*, **48**, 7919 (2012).



松田 亮太郎
京都大学物質－細胞統合システム
拠点・特定准教授
博士（工学）

2000年 京都大学工学部卒業
2005年 京都大学大学院工学研究科博士課程認定退学
同年 京都大学博士研究員
2006年 九州大学先導物質化学研究所助手
2007年 同助教
2008年 科学技術振興機構ERATO北川統合細孔プロジェクトグループリーダー
2013年より現職
[専門] 錯体化学、固体化学、吸着化学

技術ハイライト

PSA法による高炉ガスからの炭酸ガス分離技術の開発

Development of PSA Technology for the Separation of Carbon Dioxide from Blast Furnace Gas

JFEスチール株式会社 スチール研究所
環境プロセス研究部
JFE Steel Corp., Steel Research Labs.
Environmental Process Department
斎間 等
Hitoshi Saima

1. はじめに

製鉄業は、鉄の酸化物である鉄鉱石をコークスという炭素によって還元しているため、必然的に炭酸ガスが発生する構造となっている。わが国の炭酸ガスの排出量は11~13億tで推移¹⁾しているが、その15%にあたる約2億tは製鉄業から排出されている。この情勢にあたり、鉄鋼連盟²⁾では炭酸ガスを削減する数々の取組みを行っている。その一つが、2008年度より5年間に渡り、NEDOの支援を受けて行っている環境調和型製鉄技術開発（以下、COURSE 50 (CO₂ Ultimate Reduction of Steel-making Process by Innovative Technology for Cool Earth 50) と略す）である。JFEスチールでは、このCOURSE 50プロジェクトの一環として、PSA法による製鉄所・高炉ガスからの炭酸ガス分離技術の研究開発を行っている。

従来のPSA法では、99.9~99.999%といった高純度のガスが製造されており、高純度の炭酸ガスは、ドライアイスやビール等の飲用として用いられている。しかしながら、炭酸ガスの需要は100万t程度³⁾に留まっている（これらの用途は炭酸ガスを固定的に使用するのではなく、大気に再度放散されるケースが多いことにも注意を要する）。このため、本開発における炭酸ガスの純度は、高純度の必要性がないのは明らかである。一方で、高炉ガスを対象とする場合、例えば、その全排出ガス量の20%分の炭酸ガスを回収しようとすると、100万m³/hr レベルの高炉ガスを処理する必要がある。これは従来のPSAが数千m³/hr クラスの中

規模プラントであることを考えると、数百~千倍規模のスケールアップを求められることを意味している。

このような観点から、我々は高炉ガスからの炭酸ガス分離・回収技術開発を進めてきた。本稿では、その開発経緯について、ご紹介していきたい。

2. 炭酸ガスPSAについて

炭酸ガスの吸着分離には、Na-X型ゼオライト（モレキュラーシープ13X）や活性炭が用いられている。我々は炭酸ガスの有効吸着量や高炉ガス中に含まれる他のガス（窒素、CO）に対する選択性から、Na-X型ゼオライトである東ソー製ゼオラムF9を用いている。ゼオライトは水分に弱い欠点はあるが、吸着容量が大きく、選択性が高いのが魅力である。

炭酸ガスのPSAの方式として、様々な方法があると考えられるが、我々が用いているのは、図1に示した3塔3ステップ方式というシンプルな方式である。最初の吸着工程では、吸着剤を充填した吸着塔に原料ガスを供給し、所定の圧力で一定時間流通させる。この段階で塔内の炭酸ガス濃度は70%程度まで濃縮される。この濃度では不十分なので、次の洗浄工程では、高濃度の炭酸ガスを供給する。これにより塔内の不要なガス（原料ガスが高炉ガスの場合は、窒素およびCO）をパージして、所望の炭酸ガス純度にまで精製する。最後の脱着工程では、塔内を真空ポンプで減圧し、高純度化された炭酸ガスを回収すると共に、一部を洗浄工程に供給する。この3つの工程を、3つの塔で順繕りに行うこととなる。

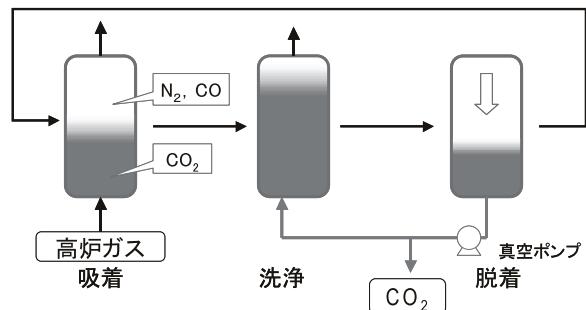


図1 炭酸ガスPSAの3塔3ステップシステム

このPSA操作でキーとなるのは、吸着工程での原料ガス流量と圧力、洗浄工程における洗浄ガス量、脱着工程における減圧度、そして、全工程に要する時間（以下、サイクルタイムと表記する）である。製品ガスが高価であれば、十分な量の洗浄ガスを流通させて、

炭酸ガスを高純度化させると共に、長めのサイクルタイムで安定的な運転をすることになる。しかしながら本開発では、製品ガスの価値は無いに等しく、いかに緩やかな条件で費用を節約して、効率的に炭酸ガスを回収するのかが開発の要点となってくる。

3. ラボPSA装置での検討

研究開発の初期に、ラボ・スケールのPSA試験装置を設置して、試験条件について検討した。前節で述べたサイクルタイムの効果を図2に示した。

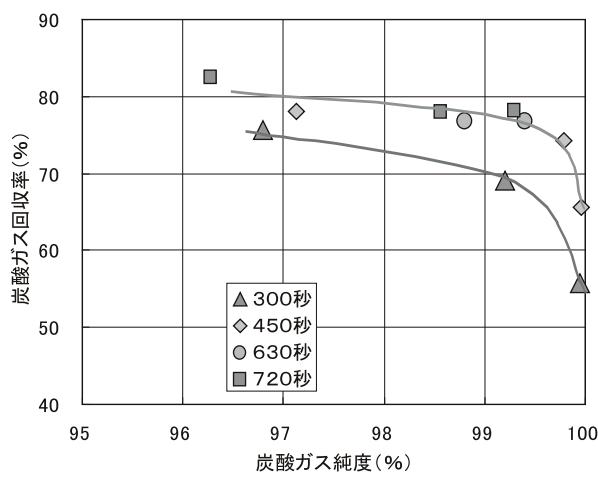


図2 サイクルタイムの効果

当初、サイクルタイムとして630秒を基準としていたが、450秒でも720秒でも分離性能は変わらないことが判る。サイクルタイムを300秒とすると、他のサイクルタイムよりCO₂回収率が低下していることが認められる。この図の横軸は1%刻みとなっており、サイクルタイムの効果の差を拡大して見せているが、実際には僅かな違いしかない。そこで、次に紹介するベン

チスケールのPSA装置では、サイクルタイムとして300秒を標準とすることとした。

4. ASCOA-3の概要

今回の技術開発で大きな役割を果たしたのは、炭酸ガス回収能力3t/日（公称）のベンチ・スケール装置ASCOA-3（Advanced Separation system by Carbon Oxides Adsorption）である。JFEスチール西日本製鉄所福山地区に設置されている。ASCOA-3の外観を写真1に示した。敷地は21 m × 25 mとやや広めで、全ての作業を地上で行えるよう配慮すると共に、作業通路を広めに設計した結果である。

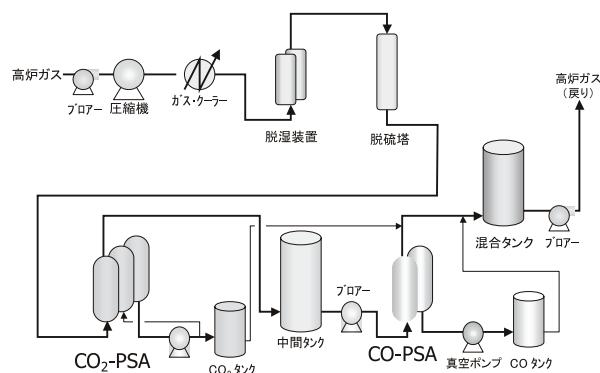


図3 ASCOA-3概略フロー

ASCOA-3の概略フローを図3に示した。製鉄所内の高炉ガス (BFG : Blast Furnace Gas) の本管からガスをブロアーで引き込み、これを圧縮機で加圧している。圧縮機では300 kPaまでの加圧が可能な設計となっている。加圧された高炉ガスは、冷却された後、除湿機で-60°Cまでガス露点を下げることが出来る。

この後、活性炭を充填した脱硫塔を通した後、心臓



写真1 ASCOA-3外観



写真2 吸着塔外観

部である炭酸ガス PSA に供給される。炭酸ガス PSA の外観を写真 2 に示した。内径は 750 mm で高さ 1.2 m の吸着塔が 3 塔並んでいる。この 3 塔の内、写真一番右の A 塔のみであるが、測温抵抗体を 11 本設置している。5 本の測温抵抗体は、各々の高さの中心温度を測定している。また上、中、下の 3ヶ所については、半径の 1/2 の場所および器壁近傍にも測温抵抗体が配置されている。これにより吸着・脱着時の温度分布およびそれらのスイング状況を計測できるようになっている。また、より感度が高い温度計測が出来るように、同様の位置に熱電対も増設している。これ以外にも、オフガス配管には、リアルタイムで CO および CO₂ の濃度が測定できるように赤外吸収分光光度計が設置されている。この炭酸ガス PSA にて吸着された炭酸ガスは、真空ポンプによって回収され、CO₂ タンクに貯められる。ここで回収量および回収濃度が測定される。一方、炭酸ガス PSA を通過したオフガスは、中間タンクに送られる。このオフガスは、秒単位で組成や圧力、流量が変化するため、十分混合して平均化されるように中間タンクは大きめに設計されている。混合されたオフガスは中間プロアーで次の CO-PSA に供給される。CO-PSA では、CO が濃縮されて、高熱量の可燃ガスとして回収される。ASCOA-3 は試験設備であるため、これらの分離されたガスは、回収量およびガス組成を分析した後、再度混合され、高炉ガス本管に戻される構造となっている。尚、誌面の限りがあるため、本稿では、炭酸ガスの分離回収についてのみ紹介することとした。可燃ガスの回収については、別報告⁴⁾ を参照されたい。

5. ASCOA-3での運転研究

ASCOA-3 は 2011 年 2 月に完成し、同年 3 月に実施した総合試運転で、十分な性能があることが確認された。そこで様々な条件で電力原単位を削減する検討を行った。結果を図 4 に示した。この図に示したように、結果は単純で、炭酸ガス回収率の増加に伴い、電力を最も多く消費する真空ポンプの電力原単位が低下していく。図中▲で示したプロットは、50 kPa という低い吸着圧力条件での試験結果である。このように低吸着圧力でも、炭酸ガス回収率が高い条件では、真空ポンプ電力原単位は約 200 kWh/t と低く抑えられることが判る。この吸着圧力 50 kPa という条件は重要である。このように低い圧力であれば、吸着塔へのガス供給用機器として、低電力のプロアーを利用できるから

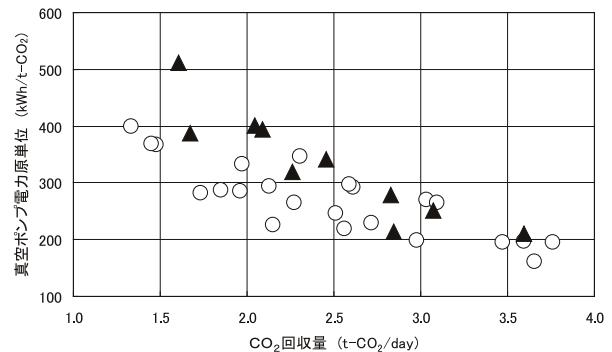


図 4 炭酸ガス回収量の効果

である。そこで以降の ASCOA-3 での試験では、吸着圧力は 50 kPa を標準とすることにした。

次に検討したのが、原料ガス中の炭酸ガス濃度の影響である。原料ガス、すなわち高炉ガス中の炭酸ガス濃度は、将来的に増加するものと考えられている。一方、ASCOA-3 に供給されている高炉ガスは実ガスであるため、濃度を意図的に変更するのは困難である。そこで、ASCOA-3 で分離・回収した炭酸ガスを、供給される実高炉ガスと混合して、炭酸ガス濃度の影響を調査した。結果を図 5 に示した。

ASCOA-3 における通常の条件（原料ガス中炭酸ガス濃度：22%）では、図 4 に示したように真空ポンプの電力原単位（◇）は 180~200 kWh/t 程度である。回収した炭酸ガスを高炉ガスに添加して、原料ガス濃度を 34% まで増加させると、炭酸ガス回収量（■）は 5 t/日まで増加し、真空ポンプ電力原単位は 120 kWh/t にまで低下している。この状態でサイクルタイムを 225 秒まで低下させると、真空ポンプ電力原単位は下がらないものの、炭酸ガス回収率は 6 t/日まで

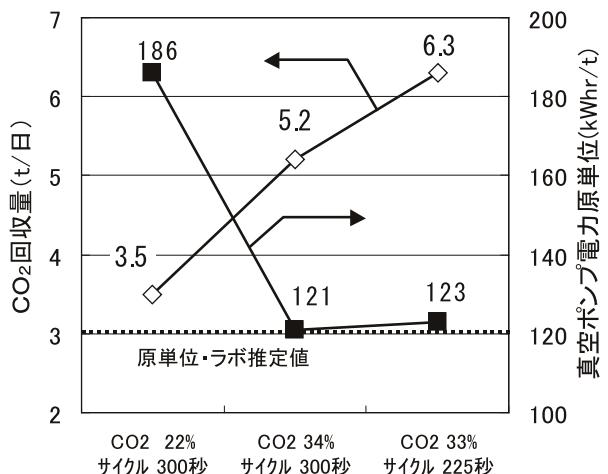


図 5 炭酸ガス濃度の効果

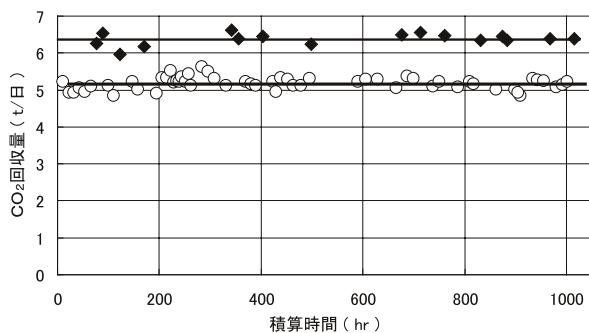


図6 最適条件における長期寿命試験

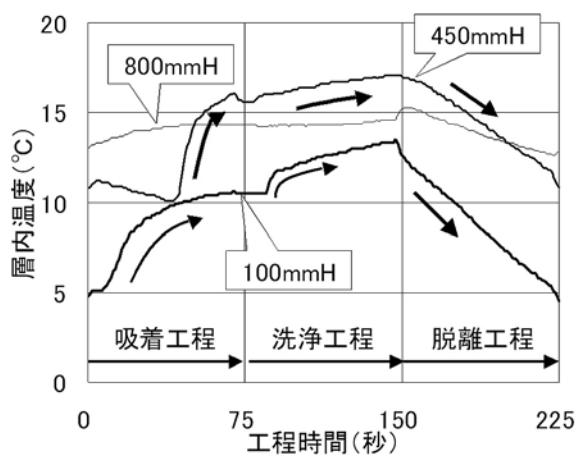


図7 垂直方向の温度分布とスイング状況

向上することが判った。

ここまで紹介した以外に、原料ガス露点を−30℃まで上げる試験等を行い、ベストと考えられる条件において、1,000時間の耐久テストを行った。結果を図6に示した。ここでは図5で示した5 t/日条件(○)と6 t/日(◆)条件を適宜繰り返して行っている。図から明らかのように、双方の条件とも、炭酸ガス回収量に変化は認められず、安定的に運転することができた。

6. 温度分布とスイング状況

炭酸ガスPSAの場合、その内部温度は炭酸ガスの吸・脱着が主な変動要因である。そこでASCOA-3吸着塔に設置している測温抵抗体および増設した熱電対により温度分布とスイング状況を追跡した。図7に垂直方向(ガス流れ方向)の吸着塔中心の温度分布およびそのスイング状況を示した。図7は1サイクルタイム分(225秒)の熱電対による温度計測データである。吸着工程および洗浄工程での温度上昇は、ガス流れと

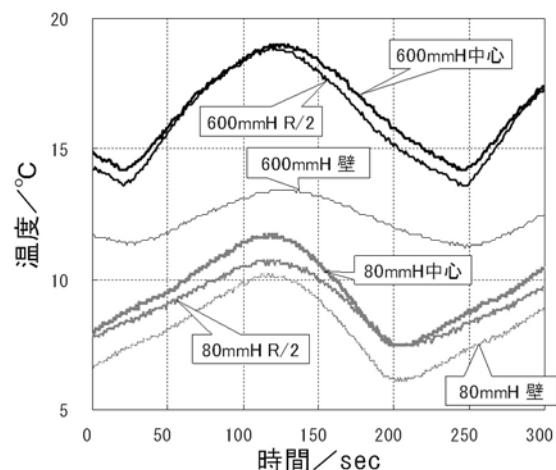


図8 水平方向の温度分布とスイング状況

同じように下から上方向へ徐々に上がり、最上段(800mm高さ)の温度が上がり始めた所で脱着工程に移行していることが判る。脱着工程では、高さ位置の差はなく、同時に温度が低下して行っていることが判る。このように各々の工程において、炭酸ガスの吸・脱着の挙動が、温度データによって十二分に把握することができる。

水平方向の温度分布を図8に示した。こちらは測温抵抗体での計測データであるため、やや感度が鈍いものの、1サイクル(300秒)での動きは十分に観測されている。高さ80mm、600mm共に、中心部と半径の1/2の位置(R/2)の温度は、ほぼ同じ温度でスイングしていることが判る。一方、壁近傍の温度は、これらより低い温度で推移している。これは、試験時期が冬場であったためである。壁近傍の温度は、夏場は逆に高めの温度で推移することが判明している。理論的には、吸着には温度が低い方が有利であり、脱着には温度が高い方が有利である。夏場、冬場で、壁近傍の温度も、ガス温度も異なる。しかしデータを比較した結果、炭酸ガス回収率等のデータは、季節による影響は認められなかった。温度の高低によるメリット、デメリットが相殺されているとも考えられる。尚、実機規模では、当然であるが、壁近傍の割合はごく少なくなるため、外気温の影響があるとしても、ほとんど無視できるものと考えている。

7. 実機イメージの構築

これまでのASCOA-3の運転研究の成果から実機吸着塔および実機プロセスのイメージを構築した。吸着

塔のイメージを図9に示した。

実機の吸着塔は直径4.0 mの枕型で長さは17 mで設計した。吸着剤層は、塔中央部に1.5 mの高さとして、高炉ガスは下部から上部へ流れる構造である。吸着剤層を1.5 mとASCOA-3の約2倍としたのは、今後開発を予定しているPSAの効率化技術開発の成果を織り込んでいるためである。図9の吸着塔を用いた実機プロセスでは約50万t/年の炭酸ガスが回収できる計算になっている。この吸着塔を用いた実機のプロセス・イメージを設計した。回転機器や塔槽類を全て織り込んで設備費を計算したところ、100万t/年設備（図8の吸着塔を用いたPSAシステムを2系列建設）で70億円という試算結果であった。さらに必要な電力等の用役を計算して、炭酸ガス回収コストを計算した結果、1,940円/tという推算値が得られた。当初、回収費用は4,000円/tと見積もっており、これを半減という目標を立てた。非常に達成が困難と思われる目標であったが、何とか目標をクリアーすることができた。

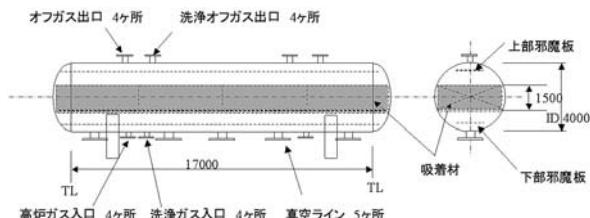


図9 実機吸着塔のイメージ

8. おわりに

PSA法による高炉ガスの分離技術の開発状況について述べてきた。炭酸ガス分離技術の難しいところは、回収した炭酸ガスに価値がほとんど無いことである。分離コスト2,000円/tという目標を達成したが、これで満足されるべきではない。さらなるPSAプロセス全体の効率化によりコスト削減を推進すると共に、回収した炭酸ガスの利用方法を検討すべきであろうと考えている。その意味では、PSA法によって得られる炭酸ガスには、水分がほとんど含まれず、またアミン法等では微量に混入してくる含窒素化合物等がないため、化学的な変換・再利用には有利な原料となることが期待される。また、PSAのシステム自体は完成されたものであり、ほとんど無人で運転できることから、人件費がほとんどかからないのも魅力である。

実用化への道は、まだまだ遠いと思われるものの、かなり効率の高い炭酸ガス分離プロセスが構築できて

きていると自負している。今後も早期の実用化に向け、さらに開発を進めていく所存である。

9. 謝辞

本研究開発は、新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の支援を受けて行われました。誌面を借りて、謝意を表します。

[参考文献]

- 1) 国立環境研、「日本国温室効果ガスインベントリー報告書」(2012)
- 2) 鉄鋼連盟ホームページ、
<http://www.jisf.or.jp/course50/index.html>
- 3) 経済産業省・化学工業統計年報
- 4) 斎間ら、第28回ゼオライト研究発表会・講演要旨集、pp76 (2012)
原岡ら、第26回日本吸着学会研究発表会・講演要旨集、pp38 (2012) など



斎間 等
JFEスチール株式会社
スチール研究所
環境プロセス研究部
主任研究員（部長）

1985年3月 東京大学大学院工学系研究科

博士課程 退学

1985年4月 川崎製鉄株式会社（現JFEスチール株式会社）入社

1986年3月 工学博士（東京大学）

2009年4月より現職

会 告

第27回日本吸着学会研究発表会のお知らせ

日本吸着学会研究発表会は、吸着の基礎科学から応用技術にわたる最新の研究成果が討論される1年に一度の大會です。今回は20年ぶりに千葉大学での開催となります。多数の皆様のご参加をお願い申し上げます。

会期：平成25年11月21日（木）、22日（金）

会場：千葉大学 けやき会館（〒263-8522 千葉市稲毛区弥生町1-33）
交通アクセスの詳細につきましては、千葉大学ホームページ（<http://www.chiba-u.ac.jp/access/>）をご参照ください。

宿泊：各自で手配をお願いいたします。西千葉駅周辺はあまりありませんので千葉駅周辺が便利です。

講演会場：千葉大学けやき会館 1F大ホール（口頭発表）および 3F レセプションホール（ポスター発表）

発表要領：**口頭発表**：講演12分、質疑7分、交代1分。プロジェクター（Power Point）での発表をお願いします。

ポスター発表：発表時間1時間30分。ポスターサイズは、横90cm程度、縦120cm程度

発表申込：日本吸着学会のWebサイト（<http://www.j-ad.org>）よりお申込ください（6月上旬開設予定）。（ただし、Mac版Internet Explorerには対応しておりません。）
申し込みサイトへのアクセスにはユーザー名とパスワードの入力が必要です。以下に従って入力してください。

ユーザー名：jsad **パスワード**：gakkai27

発表形式（口頭・ポスター）についてはご希望に添えない場合がありますので予めご了承ください。

要旨集原稿：A4版1ページに、講演題目、1行あけて所属（略称）、氏名（発表者に○）、1行あけて要旨を1行あたり45字、1段送りで記載し、最下行に連絡先（TEL、FAX、E-mail）を記入してください。原稿はE-mailの添付書類（MS Word2000-2010、あるいはpdf形式で）として、下記実行委員会宛てお送りください。なお、学会ホームページに原稿のテンプレート（MS Word2003形式）を用意しますのでご利用ください（6月上旬準備予定）。参照できない場合には下記連絡先までお問い合わせください。

懇親会：11月21日（木）千葉大学生協食堂（詳細は学会会場にてご案内いたします。）

参加登録費：日本吸着学会・協賛学会会員：8,000円（官・学）、10,000円（産）、4,000円（学生）
非会員：10,000円（官・学）、12,000円（産）、4,000円（学生）

上記は当日登録者の登録費です。参加登録費には要旨集代を含みます。下記要領で10月9日までに参加予約をして参加登録費を振り込まれる場合は、上記参加登録費から2,000円減額してください。（要旨集のみ購入の場合は1冊3,000円）

懇親会費：一般8,000円、学生5,000円。ただし、10月9日までに参加登録と同時にWebサイトで予約後振り込みをしていただいた場合は、2000円割引いたします。

参加予約申込：日本吸着学会のWebサイト（<http://www.j-ad.org>）よりお申込ください（6月上旬準備予定）。（ただし、Mac版Internet Explorerには対応しておりません。）お申し込み後は速やかに予約参加登録費と予約懇親会費を下記銀行口座にお振込みください。（振り込み手数料は各自ご負担ください。）

銀行口座：京葉銀行みどり台支店、普通預金、口座番号5484341、
口座名義 加納 博文（カノウ ヒロフミ）

発表申込締切：平成25年9月9日（月）

要旨原稿締切：平成25年10月9日（水）

参加予約締切：平成25年10月9日（水）

実行委員会（問い合わせ・連絡先）：

〒263-8522 千葉市稲毛区弥生町1-33

千葉大学大学院理学研究科 加納博文

E-mail : adsorption@pchem2.s.chiba-u.ac.jp、Tel : 043-290-2784、fax : 043-290-2788

第22回吸着シンポジウム（吸着夏の学校）開催のお知らせ

吸着分野で活躍する若手研究者の研究活動の活性化と相互の交流を目的として、吸着シンポジウム（吸着夏の学校）を1泊2日の合宿形式で開催します。シンポジウムは、5件の依頼講演と有志の若手研究者によるショートプレゼンテーションから構成されます。依頼講演では、第一線でご活躍の講師陣による吸着関連の基礎から、吸着現象を利用した応用展開まで幅広い講演を予定しています。さらに、今回は、海外で活躍する一流研究者による講演も企画しております。1日目の夜には、懇親会もございますので、吸着分野の研究・技術について背景や基礎と最先端について認識を深めるだけでなく、参加者間で熱いディスカッションを交わし、さらに国内そして海外の研究者との交流を通じて相互のつながりを強める会にしたいと考えています。大学院生、ポスドクを含む大学、研究機関、企業の研究者、技術者の方のご参加をお待ちしております（参加はどなたでも歓迎です）。

会期：2013年9月5日（木）～6日（金）

会場：長良川スポーツプラザ（岐阜県岐阜市）

http://www.nagara-sportsplaza.jp/zhang_liang_chuansupotsupuraza/Welcome.html

スケジュール（予定）：9月5日（木） 13:30 集合

- ・基礎技術講習 金沢大学機械工学系 児玉昭雄 教授
- ・基礎技術講習 佐賀大学循環物質化学専攻 森貞真太郎 准教授
- ・研究トピック講演 地球環境産業技術研究機構 余語克則 博士
- ・海外研究者講演 Prof. Jianwen JIANG (National University of Singapore)
- ・若手有志発表

<懇親会>

9月6日（金）

- ・研究トピック講演 豊田中央研究所 中村忠司 博士
- ・若手有志発表

13:00（予定） 昼食後 解散

参 加 費：学 生（吸着学会会員・非会員不問） 5,000円

（宿泊費を含む） 一 般（吸着学会会員、維持会員企業の方） 15,000円

一 般（非会員） 20,000円

定 員：30名

宿泊は男女別で、基本的には相部屋となります。個室等のご希望がございましたらご相談ください。

若手研究発表：若手（大学院生、ポスドクを含む大学、研究機関、企業の主に20～30代の方々）によるオーラルプレゼンテーションを募集します。学会ではありませんので、研究成果だけでなく、行き当たっている問題や解釈の難しい結果など、自由に発表・議論していただいて結構です。発表時間はディスカッションを含めて20～30分程度を予定しています。なお、発表者につきましては、参加者からの発表希望をもとに実行委員長が決定いたしますのでご了承ください。

参加申込方法：下記の参加者情報をご記入の上、件名を『吸着シンポジウム参加申込』として、実行委員長宛にEmailでお申し込みください。

参加者情報：1. 氏名

2. 所属（学生の方は研究室名まで記載）
3. 学年（学生のみ）
4. オーラルプレゼンテーション（若手発表）希望の有無
5. 性別
6. 連絡先（Emailアドレス、電話番号）
7. 学生・正会員・維持会員・非会員（該当するものを残してください）
8. 年齢 20～30代・40代・50代以上（該当するものを残してください）

参加申込締切：7月31日（水）

問い合わせ先：実行委員長 渡邊 哲（京都大学化学工学専攻）

Email : nabe@cheme.kyoto-u.ac.jp

詳細はホームページ(<http://www-j-ad.org/>)でご案内する予定です。最新の情報はホームページにてご確認ください。

・・・・・編集局移転のお知らせ・・・・・

平成21年4月より4年間、岡山大学理学部化学科におかれておりました本会編集局が、平成25年4月より下記に移転しました。新体制におきましても会誌の作成に変わらぬご支援を賜りますよう、お願い申し上げます。

新編集局

〒852-8521 長崎市文教町1-14 長崎大学大学院工学研究科物質科学部門
担当 森口 勇、瓜田幸幾
TEL & FAX 095-819-2669
E-mail : mrgch@nagasaki-u.ac.jp

FOA11: 11th International Symposium on the Fundamentals of Adsorption

- 2013 Preliminary Scientific Program -

(as of 4/12/2013)

Sunday, May 19, 2013

6:00-8:00 PM SYMPOSIUM REGISTRATION OPEN

7:00 PM WELCOME DINNER (included in the registration fee)

Monday, May 20, 2013

7:30 AM Light Breakfast (included in the registration fee)

10:30 AM - 6:00 PM EXHIBITION OPEN

1. Monday Keynote Lecture - I

Fluids in Nanospace: Molecular Simulation Studies to Find out Key Mechanisms for Engineering. Minoru Miyahara, Hideki Tanaka, Kyoto University

2. Monday Plenary Session: Molecular Simulation

Effects of Wettability on Adsorption and Pressure of Fluids in Nanopores. Yun Long, Cody Addington, Małgorzata Siwińska-Bartkowiak^c, Keith Gubbins^a, North Carolina State University^b; Adam Mickiewicz University

Adsorption-induced Flexibility of Porous Materials. David Bousquet¹, François-Xavier Couder², Anne Boutin¹, ENS Paris; ²Chimie ParisTech

Break

3. Monday Plenary Session: Adsorbent Materials

Kinetic Study of Methane Isotope Separation on Microporous Materials. Daiji Minami, Subaru Niimura, Toshihiko Fujimori, Katsumi Kaneko, Research Center for Exotic NanoCarbons

Break

4A. Monday Parallel Session: Molecular Simulation

12:00 PM On the Use of Solid Amine Sorbents for CO₂ Capture by PSA. James A. Ritter, Anahita Abdollahi, Armin D. Ebner, University of South Carolina

Announcements

12:30-2:00 PM Lunch (included in the registration fee)

2:00 PM Adsorption-induced Structural Transition of ZIF-8. Hideki Tanaka, Shuji Ohsaki, Daigo Yamamoto, Ryohi Numaguchi, Satoshi Watanabe, Minoru Miyahara, Kyoto University

Dependence of Adsorption Induced Structural Transition on Framework Structure of Porous Coordination Polymers. Ryohi Numaguchi, Hideki Tanaka, Satoshi Watanabe, Minoru T. Miyahara, Kyoto University

Confined Electrolytes in Charged Lamellar Systems: From Primitive Model to Full atomistic Modeling. Benoit Carrier, Roland Pellenq^a, Matthieu Vandamme^a, Henri Van Damme^b, Université Paris-Est Laboratoire Navier; ^aMassachusetts Institute of Technology/CNRS; ^bIFSTTAR

Disclosure of "Molecular Trap-door" Mechanism by Ab Initio DFT Calculations. Jin Shang, Gang Li^a, Ranjeet Singh^a, Penny Xiao^a, Qinfen Gu^a, Kate Nairn^a, Zhe Liu^a, Paul Webley^a, ^aThe University of Melbourne; ^bAustralian Synchrotron; ^cMonash University

Study of Gas Adsorption on Smoothly Corrugated Graphene Pore Walls of Nanoporous Carbons. Jacek Jagiello, James Olivier, Micromeritics Instrument Corporation

Ab initio Investigation into the Hydratation Mechanism of IRMOFs. Marta De Toni¹, Pluion Pullumb², Romain Jonchiere¹, François-Xavier Couder¹, Alain Fuchs³, ¹Chimie ParisTech & CNRS; ²Alt Liquide; ³CNRS

Break

4B. Monday Parallel Session: Adsorption in Energy Technology

Unusual Adsorption Behaviour of the Narrow Pore MIL-91(A) MOF Solid: A Combination of Molecular Simulations and Experimental Tools. Miguel Garcia-Rates¹, Christian Seire², Philip Llewellyn³, Sandrine Bourrelly³, Paul Wright⁴, Alexandre Vimont⁵, Guillaume Maunin¹, Institut Charles Gerhardt Montpellier; ²Institut Lavoisier Versailles; ³Laboratoire Madirel Marseille; ⁴School of Chemistry Saint Andrews; ⁵Laboratoire de Catalyse et Spectrochimie

Ionogels: Understanding the Structure and Dynamics of Ionic Liquids Confined in Silica Nanopores. Benoit Coasne, Lydie Vial², Andrie Vioux³, ²CNRS-MIT; ³CNRS; ³University Montpellier

Open Carbon Frameworks (OCF) – A Potential Solution for Hydrogen Storage. Lucyna Firlej¹, Bogdan Kuchta², Ali Mohammad Hosseini², Peter Pfeiffer³, ¹Université Montpellier; ²Université Aix-Marseille; ³University of Missouri

Adsorption of High-temperature Alkali Metal Vapor using Mineral Sorbents. João F G de Oliveira, Federico L. Greco, Jimmy de G. Moreno, Ligia C. Castro, A. Eurico B. Torres, Carla A.F. Melo, Moisés Bastos-Neto, Diana C.S. Azevedo, Universidade Federal do Ceará

3:20 PM	Thermal Energy Storage using Adsorption: Applications for Solar or Waste Heat. Burcu Ugur, Sheida Stephens, F. Handan Tezel, University of Ottawa	
3:40 PM	Development of Cathode Air Filters for PEM Fuel Cells using Microfibrous Entrapped Sorbents. Abhijeet Phalle, Achintya Sujati, Bruce Tatarchuk, Auburn University	
4:00 PM	Break	
	4C. Monday Parallel Session: Adsorption Separation Processes	
2:00 PM	CO ₂ Removal by PSA: An Industrial View on Opportunities and Challenges. Christian Voss, Linde AG Engineering Division	
2:20 PM	Absorption of Ethanol Vapor from Fermentation Broth onto Molecular Sieving Carbon and its Recovery by Desorption. Hirotaka Fujii, Akiyoshi Sakoda, University of Tokyo	
2:40 PM	Pressure Swing Adsorption for Pre-Combustion CO ₂ Capture under Consideration of Impurities. Dorian Marx, Nathalie Casas, Johanna Schell, Marco Mazzotti, ETH Zurich	
3:00 PM	Design Calculation Procedure for Chromatography of Biological Products based on the Iso-resolution Curve. Noriko Yoshimoto, Shuichi Yamamoto, Yanaguchi University	
3:20 PM	A High Feed Throughput PSA Process for CO ₂ Capture from Flue Gas. Atikur Rahman, Armin Ebner, James Ritter, University of South Carolina	
3:40 PM	Activated Carbon Honeycomb Monolith - Zeolite 13X System to Capture CO ₂ from Flue Gases Employing Electric Swing Adsorption. Rui Ribeiro ¹ , Carlos Grande ² , Alirio Rodrigues ¹ , Associate Laboratory LSRE/LCM ¹ , SINTEF Materials and Chemistry	
4:00 PM	Break	
	5A. Monday Parallel Session: Fundamentals	
4:20 PM	Separation of Substituted Cyclic Alkane Isomers using Metal-organic Frameworks. Tim Duerinck ¹ , Frederik Vermontie ² , Rocío B. Pérez ² , Dirk De Vos ² , Sofia Celero ³ , Joeri F.M. Denayer ⁴ , Vrije Universiteit Brussel ² , KU Leuven ³ , Pablo Olavide	
4:40 PM	Distorted Intermolecular Structure of CO ₂ Adsorbed in Nanospaces of Single Wall Carbon Nanoh ³ . Kaiusma Karieko ¹ , Tomoya Hara ² , Daiki Minami ¹ , Tomonori Ohba ² , Piotr Gaudek ³ , Sylwester Furmanek ¹ , Artur Terzyk ¹ , Tsutomu Itoh ² , Toshihiko Fujimori ¹ , Hirofumi Kanoh ² , Shinshu University ² , Chiba University ³ , N. Copernicus University ⁴ , North Copernicus University	
5:00 PM	Inconsistencies in Thermodynamic Treatment of Adsorption Brought to Light by Net Adsorption Formulations. Orhan Talu, Cleveland State University	
5:20 PM	Phase Transition of Water in Hydrophobic Nanospaces: Structure Analysis by Neutron and X-ray Diffractions. Taku Iiyama ¹ , Ryusuke Futamura ¹ , Takaya Ota ¹ , Tomoki Kondo ¹ , Sumio Ozeki ¹ , Akinori Hosokawa ² , Toru Ishigaki ² , Shinshu University ² , Ibaraki University	
5:40-6:00 PM	Sorption Behavior in Ink-bottle Mesoporous Silicon . Philipp Zeigermann ¹ , Daria Kondashova ¹ , Rustem Valullin ¹ , John Edison ² , Peter A. Monson ² , Katie A. Cychoz ³ , Matthias Thommes ⁴ , University of Leipzig; University of Massachusetts; Quantachrome	
	6. Poster Session - I	
6:00-7:30 PM	POSTER SESSION / SOCIAL	

Tuesday, May 21, 20137:30 AM **Light Breakfast** (included in the registration fee)10:10 AM - 6:00 PM **EXHIBITION OPEN****10A. Tuesday Parallel Session: Adsorbent Materials**

8:30 AM	Physical Adsorption Characterization of Nanoporous Materials: Progress and Challenges. <u>Matthias Thonnes</u> , Quantachrome Corporation	2:00 PM	Hydrogen Isotope Separation in Zeolite-carbon Complex. <u>Hideki Tanaka</u> , Kazuhiko Nakamura, Akira Maki, Minoru Miyahara, Kyoto University
9:10 AM	Rapid Characterization of Porous Materials by Thermal Response Measurements. <u>Matthias Leisner</u> ¹ , <u>Wulf Grähtel</u> ¹ , <u>Stefan Kaskel</u> ² , <u>Fraunhofer IVS</u> , ² <u>Technische Universität Dresden</u>	2:20 PM	Enhanced Performance of Polymeric Amines Supported on Heteroatom-incorporated Silica in CO₂ Adsorption/Desorption. <u>Christopher Jones</u> ¹ , <u>Yasutaka Kuwahara¹, <u>Dun-Yen Kang</u>, <u>John Copeland</u>, <u>Praveen Bollini</u>, <u>Carsten Sievers</u>, <u>Takashi Kamigawa</u>², <u>Hiromi Yamashita</u>², <u>Georgia Tech</u>, ²<u>Osaka University</u></u>
9:30 AM	On the Description of Hysteresis Loops of IUPAC Classification with a Simple Pore Model - The Interplay of Pore Size and Capacity. <u>Duong Do</u> , <u>Phuong Nguyen</u> , <u>Chunyan Fan</u> , <u>David Nicholson</u> , <u>University of Queensland</u>	2:40 PM	Double-step CO₂ Sorption of ELM-11. <u>Hirofumi Kanoh</u> ¹ , <u>Manami Ichikawa</u> ¹ , <u>Atsushi Kondo</u> ² , <u>Hiroshi Kaijyo</u> , <u>Hirosi Noguchi</u> ¹ , <u>Tomonori Onba</u> ¹ , <u>Katsuji Kaneko</u> ⁴ , <u>Chiba University</u> , ⁴ <u>Tokyo University of Agriculture and Technology</u> ; ⁴ <u>Nippon Steel Corporation</u> ; ⁴ <u>Shinshu University</u>
9:50 AM	Characterization of MOF Adsorbents by Thermomechanical Methods. <u>Isabelle Beuropes</u> , <u>Mohammed Boullouit</u> ¹ , <u>Renaud Denoyel</u> ¹ , <u>Bogdan Kuchta</u> ¹ , <u>Philip Llewellyn</u> ¹ , <u>Christian Serre</u> ² , ¹ <u>MADIREL</u> , ² <u>Institut Lavoisier</u>	3:00 PM	Framework Flexibility of ZIF-8 as Evidenced by Adsorption of C3 and C4 Hydrocarbons at Ambient Temperature. <u>Chen Zhang</u> ¹ , <u>Ryan Lively</u> ² , <u>Ke Zhang</u> ¹ , <u>Justin Johnson</u> , <u>Oguz Karvan</u> , <u>William Koros</u> , ¹ <u>Georgia Institute of Technology</u> ; ² <u>Algenol Biofuels</u>
10:10 AM	Break	3:20 PM	Characterization of Plasma-modified Metal Organic Frameworks. <u>Jared DeCoste</u> ¹ , <u>Gregory Peterson</u> ¹ , <u>Martti Smith</u> ² , <u>Connie Stone</u> ¹ , ¹ <u>ECBC</u> , ² <u>Dstl</u>
		3:40 PM	Adsorption and Diffusion of Small Alcohols in Zeolitic Imidazolate Frameworks (ZIFs). <u>Jason A. Gee</u> , <u>Jaeyub Chung</u> , <u>Sankar Nair</u> , <u>David S. Sholl</u> , <u>Georgia Institute of Technology</u>
		4:00 PM	Break

9. Tuesday Plenary Session: Molecular Simulation

10:40 AM	Adsorption and Effective Diffusion Coefficients of Water on Nanoporous Carbon Materials via Non-equilibrium Molecular Dynamics. <u>Hendrik Frentrop</u> , <u>Erich Müller</u> , <u>Imperial College London</u>	2:00 PM	A Critical Evaluation of the CO₂ Separation Potential of MgMOF-74. <u>Tom Remy</u> ¹ , <u>Sunil A. Peter</u> ¹ , <u>Pieterjan Valvekens</u> ² , <u>Dirk E. De Vos</u> ² , <u>Gino V. Baron</u> ¹ , <u>Joëf F.M. Denayer</u> ¹ , ¹ <u>Vrije Universiteit Brussel</u> , ² <u>Katholieke Universiteit Leuven</u>
11:00 AM	Application of DMFT to Linear Pores with Ink-bottle and Side Stream Pore Applications. <u>Daniel Schneide</u> ¹ , <u>Rustum Vaidhini</u> ¹ , <u>Peter A. Monson</u> ² , ¹ <u>University of Leipzig</u> , ² <u>University of Massachusetts</u>	2:20 PM	Electrochemical Properties of Model Disordered Carbon Electrodes. <u>Katherine Phillips</u> , <u>Keith Gubbins</u> , <u>North Carolina State University</u>
11:20 AM	Modeling Adsorption in MOFs with Open Metal Centres by Combining Quantum Mechanics with Molecular Simulation. <u>Miquel Jorqe</u> , <u>Michael Fischer</u> ² , <u>José R. B. Gomes</u> ³ , <u>Christophe Siquet</u> ¹ , <u>João C. Santos</u> ¹ , <u>Alírio E. Rodrigues</u> ¹ , ¹ <u>Universidade do Porto</u> , ² <u>University College London</u> , ³ <u>CICECO – University of Aveiro</u>	2:40 PM	Advances in CO₂ Capture with Sorbents based on Siliceous Mesostuctured Materials Functionalized with Amino Groups. <u>Eloy Sanz</u> , <u>Anthaya Arencibia</u> , <u>Raúl Sanz</u> , <u>Guillermo Calleja</u> , <u>Universidad Rey Juan Carlos</u>
11:40 AM	Anisotropic Elastic Properties of Flexible Metal-organic Frameworks. <u>Aurelie Ortiz</u> ¹ , ¹ <u>École Normale Supérieure</u> , ² <u>École Normale Supérieure</u>	3:00 PM	High Pressure Separation of CH₄ / CO₂ Using Activated Carbon. <u>Carlos Grande</u> ¹ , ² <u>Richard Blom</u> , ¹ <u>Andreas Möller</u> , ² <u>Jens Möllmer</u> , ¹ <u>SINTEF Materials and Chemistry</u> , ² <u>Institut für Nichtklassische Chemie</u>
12:00 PM	Adsorption and Diffusion in Flexible Structures: Simulations and Experiment. <u>Peter Ravikovich</u> , <u>Charanjit Paur</u> , <u>Pavel Kurnov</u> , <u>Yi Du</u> , <u>Preeti Karnikot</u> , <u>Zheng Ni</u> , <u>Sebastian Reyes</u> , <u>Yu Wang</u> , <u>John Zengel</u> , <u>ExxonMobil Research and Engineering</u>	3:20 PM	Modeling Dual Reflux PSA Cycles for Separating N₂ and CH₄ in LNG Production. <u>Yechun Zhang</u> , <u>Tom Saleman</u> , <u>Yuan Zou</u> , ² <u>Chris Robertson</u> , ² <u>Thomas E. Rufford</u> , ² <u>Eric F. May</u> , ² <u>Brent R. Young</u> , ¹ <u>The University of Auckland</u> , ² <u>The University of Western Australia</u>
12:20 PM	Announcements	3:40 PM	Adsorption Separation of Bio-butanol: Kinetic and Equilibrium Studies and Effect of Impurities. <u>Nilofar Abdehagh</u> , <u>F. Handan Tezel</u> , <u>Jules Thibault</u> , <u>University of Ottawa</u>
		4:00 PM	Break

10B. Tuesday Parallel Session: Adsorption in Energy Technology

2:00 PM	Hydrogen Isotope Separation in Zeolite-carbon Complex. <u>Hideki Tanaka</u> , Kazuhiko Nakamura, Akira Maki, Minoru Miyahara, Kyoto University
2:20 PM	Enhanced Performance of Polymeric Amines Supported on Heteroatom-incorporated Silica in CO ₂ Adsorption/Desorption. <u>Christopher Jones</u> ¹ , <u>Yasutaka Kuwahara¹, <u>Dun-Yen Kang</u>, <u>John Copeland</u>, <u>Praveen Bollini</u>, <u>Carsten Sievers</u>, <u>Takashi Kamigawa</u>², <u>Hiromi Yamashita</u>², <u>Georgia Tech</u>, ²<u>Osaka University</u></u>
2:40 PM	Double-step CO ₂ Sorption of ELM-11. <u>Hirofumi Kanoh</u> ¹ , <u>Manami Ichikawa</u> ¹ , <u>Atsushi Kondo</u> ² , <u>Hiroshi Kaijyo</u> , <u>Hirosi Noguchi</u> ¹ , <u>Tomonori Onba</u> ¹ , <u>Katsuji Kaneko</u> ⁴ , <u>Chiba University</u> , ⁴ <u>Tokyo University of Agriculture and Technology</u> ; ⁴ <u>Nippon Steel Corporation</u> ; ⁴ <u>Shinshu University</u>
3:00 PM	Framework Flexibility of ZIF-8 as Evidenced by Adsorption of C3 and C4 Hydrocarbons at Ambient Temperature. <u>Chen Zhang</u> ¹ , <u>Ryan Lively</u> ² , <u>Ke Zhang</u> ¹ , <u>Justin Johnson</u> , <u>Oguz Karvan</u> , <u>William Koros</u> , ¹ <u>Georgia Institute of Technology</u> ; ² <u>Algenol Biofuels</u>
3:20 PM	Characterization of Plasma-modified Metal Organic Frameworks. <u>Jared DeCoste</u> ¹ , <u>Gregory Peterson</u> ¹ , <u>Martti Smith</u> ² , <u>Connie Stone</u> ¹ , ¹ <u>ECBC</u> , ² <u>Dstl</u>
3:40 PM	Adsorption and Diffusion of Small Alcohols in Zeolitic Imidazolate Frameworks (ZIFs). <u>Jason A. Gee</u> , <u>Jaeyub Chung</u> , <u>Sankar Nair</u> , <u>David S. Sholl</u> , <u>Georgia Institute of Technology</u>
4:00 PM	Break

10C. Tuesday Parallel Session: Molecular Simulation	
2:00 PM	Structural Modeling of Microporous Silicon Carbide-derived Carbon. <u>Anirban Farmahini</u> , Suresh Bhatia, The University of Queensland
2:20 PM	Computational Structure Characterization Tools in Application to Ordered and Disordered Porous Materials. Lev Sarkisov, University of Edinburgh
2:40 PM	Highly Selective H₂S/CH₄ Acidic Substituted Porous Zr Terephthalate MOF: From a Computational Design Towards Synthesis and Adsorption Characterization. Qingshuai Yang, <u>Chan Chan</u> , Sébastien Vaesen ² , Thomas Devic ³ , Christian Serre ⁴ , Guy De Weireld ² , Guillaume Maunin ⁴ , ¹ Beijing University of Chemical Technology; ² Université de Mons; ³ CNRS Université de Versailles; ⁴ Université Montpellier
3:00 PM	Virtual Porous Carbons that include Chemical Heterogeneity. Luis Herrera Diaz ¹ , Cheng Hu ¹ , Seaid Sedighi ¹ , Ana Silvestre-Albero ² , Taku Iyama ³ , Philip C.W. Kwong ¹ , Phillip Pendleton ⁵ , Ronald J. Smernik ¹ , Katsushi Kaneko ¹ , Francisco Rodriguez-Reinoso ² , Mark J. Biggs ³ , The University of Adelaide ⁴ , Alicante University ⁵ , Shinshu University ⁶ , University of South Australia ⁷ , Caleiro ¹ , Universitat Pablo de Olavide ² , University of Amsterdam ³ , Juan José Gutiérrez-Sevillano ¹ , José Manuel Vicent-Lluna ¹ , David Dubbeldt ² , Sofia Calero ¹ , Universitat Pablo de Olavide ² , University of Amsterdam ³
3:20 PM	On the Molecular Mechanisms for Adsorption in Cu-BTC Metal Organic Framework. Juan José Gutiérrez-Sevillano ¹ , José Manuel Vicent-Lluna ¹ , David Dubbeldt ² , Sofia Calero ¹ , Universitat Pablo de Olavide ² , University of Amsterdam ³
3:40 PM	Dielectric Anisotropy of Confined Water in the Porous Metal Organic Framework MIL-53(Cr). Aziz Ghoufi ¹ , Richard Renou ¹ , Anthony Szymczyk ² , Guillaume Maunin ³ , Institut de Physique de Rennes ² , Institut des Sciences Chimiques de Rennes ³ , Institut Charles Gerhardt Lyon ³ , Institut Lavoisier Université de Versailles
4:00 PM	Break
11A. Tuesday Parallel Session: Transport Phenomena	
4:20 PM	Diffusion of Xylene Isomers in the MIL-47(Y) MOF Material: A Combination of Molecular Dynamics Simulations and Quasi-elastic Neutron Scattering Experiments. Sébastien Rives ¹ , Hervé Jobic ² , Thomas Devic ³ , Christian Serre ³ , Guillaume Maunin ¹ , Institut Charles Gerhardt Montpellier ¹ , IRCELYON Université de Lyon ³ , Institut Lavoisier Université de Versailles
4:40 PM	Mass Transfer in Adsorbents: Frequency Response Studies. Timothy Giesy, M. Douglas LeVan, Vanderbilt University
5:00 PM	Dynamics of CO₂ Adsorption in Densely Loaded Amine-oxide Hybrid Adsorbents. Praveen Bollini, Nicholas Brunelli, Christopher Jones, Georgia Institute of Technology
5:20 PM	The Influence of Entrance Effects on CO₂ Transport Carbon Micro- and Mesopores based upon Molecular Simulation. Mahnaz Firozi, Abby Kirchofer, Jennifer Wilcox, Stanford University
5:40-6:00 PM	Transport of Heat and Mass Across a Zeolite Membrane. Sondre K. Schnell ¹ , Thijss J. H. Vlugt ¹ , Signe Kjelstrup ² , Delft University of Technology ² , Norwegian University of Science and Technology

11B. Tuesday Parallel Session: Adsorbent Characterization	
4:20 PM	Activated Carbon Nanostructure from HRTEM Images in Relation with their Microporosity. <u>Pascaline Pré</u> , Guillaume Hucher ¹ , Jean-Noël Rouzaud ² , Dominique Jeulin ³ , Alain Thorel ³ , Mohamed Sennour ⁴ , ¹ Ecole des Mines de Nantes; ² Ecole Normale Supérieure; ³ Mines Paris Tech
4:40 PM	Crystallization of Hollow Chabazite Zeolites and their Adsorption Properties. Fatin Hasan, Ranjeet Singh, Paul Wabeck, The University of Melbourne
5:00 PM	DUT-49 - A New Benchmark Material for Methane Adsorption. Ulrich Stoeck, Simon Krause, Irina Senkovska, Stefan Kaskel, Dresden University of Technology
5:20 PM	Impact of Functional Groups on the Topology and the Adsorption Properties of MOFs. Yang Cai, Yadong Zhang, Yougui Huang, Seth Marder, Krista Walton, Georgia Institute of Technology
5:40-6:00 PM	Nanopore Structures of Nanographite-combined Carbons. Youisheng Tao ¹ , Morinobu Endo ² , Kyiochi Oshida ³ , Katsumi Kaneko ² , Chinese Academy of Sciences; ² Research Center for Exotic Nanocarbons (JSI) Shinshu University; ³ Nagano National College of Technology
11C. Tuesday Parallel Session: Molecular Simulation	
4:20 PM	Understanding Molecular Aspects of the Adsorption of Additive Molecules on Urea Crystal Faces. Matteo Salvaglio, Thomas Vetter, Federico Giberti, Marco Mazzotti, Michele Parrinello, ETH Zurich
4:40 PM	Reactive Molecular Dynamics Simulation of Graphite Oxide and Its Application in Hydrogen Sulfide Removal. Liangliang Huang ¹ , Teresa Bandosz ² , Keith Gubbins ¹ , North Carolina State University; ² The City College of New York
5:00 PM	Experimental and Modeling Studies in CuBTC Metal-Organic Frameworks: Functionalization Induced Polymorphism. Ambanish Kulkami, Yang Cai, Ji Zang, Krista Walton, David Sholl, Georgia Institute of Technology
5:20 PM	Experiment and Molecular Simulation of Adsorption of Carbon Dioxide, Methane, and their Mixture in Nanoporous Carbons in the Presence of Water. Pierre Billemont ¹ , Benoit Coasne ² , Guy De Weireld ¹ , Université de Mons; Institut Charles Gerhardt
5:40-6:00 PM	Simulation Study of Two-dimensional Phase Transitions of Argon on Graphite Surface and in Slit Micropores. Eugene Ustinov ¹ , Duong Do ² , Institute of Technical Institute; ² University of Queensland

Wednesday, May 22, 2013	
7:30 AM	Light Breakfast (included in the registration fee)
10:10 AM - 12:30 PM	EXHIBITION OPEN
8:30 AM	Adsorption Processes for CO₂ Separation/Capture. Paul Webley, The University of Melbourne
9:10 AM	Rational Tuning of Water Vapor and CO₂/CH₄ Adsorption in Highly Stable Zr-based MOFs. Himaanshu Jasuja, Krista Walton, Georgia Institute of Technology
9:30 AM	Modelling of Alkasorb in the Sorption-enhanced Water-gas-shift Process. Jeffrey Hutton ¹ , Paul Cobden ² , Edward van Sello ² , Andrew Wright ¹ , Air Products and Chemicals Inc., ² Energy Research Centre of the Netherlands; Air Products PLC
9:50 AM	Anomalous EDLC Property of Microporous Carbons. Isamu Moriguchi, Nozomi Ide, Koki Urita, Nagasaki University
10:10 AM	Break
12:00 PM	Exploring the Hierarchy of Transport Phenomena during Adsorption in Hierarchical Porous Networks by Microscopic Diffusion Measurement. Christian Chmelik, Rustum Valiullin, Jörg Käger, Leipzig University
12:20 PM	PRESNTATION ON FOA12 / ANNOUNCEMENTS
1:00-3:30 PM	EXCURSION WITH LUNCH while cruising Baltimore's Inner Harbor (Included in the registration fee; ticket required in order to go onboard)
4:15 PM	Plenary Awards Session
5:00 PM	International Adsorption Society (IAS) Meeting
6:00-7:30 PM	POSTER SESSION / SOCIAL
7:30 AM	Light Breakfast (included in the registration fee)
9:50 AM - 6:20 PM	EXHIBITION OPEN
10:30 AM	Break
12:00 PM	15. Wednesday Lunch and Excursion
1:00-3:30 PM	16. Wednesday Plenary and IAS Session
4:15 PM	Plenary Awards Session
5:00 PM	International Adsorption Society (IAS) Meeting
6:00-7:30 PM	POSTER SESSION / SOCIAL
7:30 AM	Light Breakfast (included in the registration fee)
9:50 AM - 6:20 PM	EXHIBITION OPEN
10:30 AM	Break
12:00 PM	17. Poster Session - II
1:00-3:30 PM	18. Thursday Plenary Session: Environmental Applications
8:30 AM	Adsorption Mechanisms of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Fuels onto Silica Gel Surface. Junpei Fukui, Eiji Furuya, Meiji University
8:50 AM	Capture of Ventilation Air Methane (VAM) with Carbon Composites. Jun-Seok Bae, Shi Su, Xin Xiang Yu, CSIRO
9:10 AM	Characterization and CO₂ Sorption Properties of Carbon-Based Materials for CCS Applications. Erik Ruppel, Jiajun He, John To, Zhenan Bao, Jennifer Wilcox, Stanford University
9:30 AM	Aqueous Mercury Adsorption in a Fixed-bed Column of Functionalized Mesoporous Silica. Jesus M. Ariasaga, José Aguado, Amaya Arendibia, María S. López, Miguel Gómez, Rey Juan Carlos University
9:50 AM	Break

19. Thursday Plenary Session: Adsorption Separation Processes

10:20 AM	Adsorption and Desorption Performance of Polymeric Supported Amine Hollow Fibers in CO₂ Capture RTSA Process. Fateme Rezaei, Ryan Lively, David Sholl, Christopher Jones, William Koros, Yoshiaki Kawajiri, Mathew Realff, Georgia Institute of Technology	2:00 PM	Hydrogen PSA Process Product Purity Control Method and Controller. Marian Simo, Andrew Rosinski, Paul Belanger, Sardar Balash, Praxair Inc.	2:00 PM	Control of Adsorption Features of Organic/Inorganic Vapors on MOF Materials CPL by Selection of Pillar Ligands. Akihiko Matsumoto, Shori Nakamori, Keisuke Matsufuji, Yushi Matsuyama, Toyoohashi University of Technology
10:40 AM	Post-combustion Carbon Capture by PVSA/NSA: Systematic Cycle Synthesis and Energy-productivity Optimization. Reza Haghpanah, Ricky Nilam ¹ , Arvind Rajendran ¹ , Iftekhar A. Kamini ¹ , Mohammad Aman Ulah, Shamsuzzaman Farooq ² , Nanfang Technological University, ² National University of Singapore	2:20 PM	Structure and Properties of Phenolic Resin-derived Mesoporous Carbon. Djendu Saha, Amit K. Naskar, Oak Ridge National Laboratory	2:40 PM	Behavior of Zeolite Force Fields in a Comparative Infrared Study. Rocío Bueno-Perez ¹ , Sofía Calero ¹ , David Dubbelstein ² , Conchi O. Ania ³ , José B. Parra ³ , Ana Paula Zaderenko ¹ , Julio Pérez-Caturla ¹ , Patricio J. Merkling ¹ , ¹ Universidad Pablo de Olavide; ² Universidad de Amsterdam; ³ Instituto del Carbón CSIC
11:00 AM	Hybrid Processes to Separate Enantiomers. Andreas Seidel-Morgenstern, Heike Lorenz, Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems	3:00 PM	Hierarchical Pore Architectures in Polymer-based CDCs. Martin Oschatz, Lars Borchardt, Stefan Kaskel, Dresden University of Technology	3:20 PM	Adsorption of Toxic Industrial Chemicals in MOFs under Humid Conditions. Pritika Ghosh, David Fairén-Jiménez, Randall Snurr, Northwestern University
11:20 AM	Desorption and Pressure Swing Adsorption Studies of CO₂ in Amino-MIL – 53 (A)	3:40 PM	Adsorptive Immobilization of His-tagged Enzymes on Magnetite/MCF Composite. Eun-Ji Woo, Chang-Ha Lee, Yonsei University	4:00 PM	Break
11:40 AM	for Biogas Upgradation. Sunil Adavanal Peter, Gino Baron, Joeri Denayer, Vrije Universiteit Brussel				
12:00 PM	Announcements				
	12:15-2:00 PM Lunch (included in the registration fee)				

20B. Thursday Parallel Session: Adsorbent Materials

2:00 PM	Surfactant Adsorption in Ordered Mesoporous Silica Studied by SANS. Bhuvnesh Bhati ¹ , Jens Meissner ¹ , Dirk Müller ² , Tae-Gyu Shin ¹ , Gerhard Findenegg ¹ , ¹ Technical University Berlin, ² Heriot-Watt University, ³ Korea Atomic Energy Research Institute	2:00 PM	Interpretation of Excess Adsorption Isotherms in Microporous Adsorbents. Ronny Pini ¹ , Erik C. Rupp ¹ , Jennifer Wilcox ¹ , Marco Mazzotti ² , ¹ Stanford University, ² ETH Zurich	2:00 PM	Towards a Lab-scale Strategy to Select Adsorbents for Gas Separations: Comparing MOFs with Zeolites and Active Carbons. Andrew Wiersum, Sandrine Bourrelly, Emily Bloch, Philip Llewellyn, CNRS / Aix-Marseille University	2:00 PM	Investigation of Single-component and Mixture Adsorption in Nanoporous Materials by Means of Micro-imaging. Florian Hibbe ¹ , Christian Chmeik ¹ , Jörg Kägerl ¹ , Freerk Kaptein ¹ , Douglas Rutven ³ , University of Leipzig, ² Delft University of Technology, ³ University of Maine	2:00 PM	Binary Adsorption of CO₂ and CH₄ in zeolite ZSM-5 Studied using in-situ ATR-FTIR Spectroscopy. Lindsay Ohlin, Matthias Grahn, Luise University of Technology	2:00 PM	1H NMR Spectra Analysis for the Adsorption of Volatile Organic Compounds onto Porous Carbons (Single and Multi Components). Guirec Le Bozec ¹ , Sylvain Giraudet ¹ , Laurent Le Polles ¹ , Pierre Le Cloirec ¹ , Camelia Ghimbiu ² , Roger Gadouï ² , ¹ ENSCR, ² IS2M	2:00 PM	Break
2:20 PM	Revisiting Percolation Models of Adsorption Hysteresis in Pore Networks: Scanning Isotherms. Alexander Neimark, Richard Cimino, Rutgers University	2:40 PM	Melting of Liquids Confined in Nano-pores; Ice Structures Stabilized by Confinement. Magdalena Cichocka ¹ , Monika Jazdzewska ¹ , Margaret Sliwinska-Bartkowiak ¹ , Yun Long ² , Keith E Gubbins ¹ , A. Mickiewicz University, ² North Carolina State University	3:00 PM	Time Dependent CO₂ Sorption Hysteresis by Octahedral Molecular Sieves with Manganese Oxide Framework. Laura Espinal ¹ , Winnie Wong-Ng ¹ , Andrew Allen ¹ , Chad Snyder ¹ , Chun Chiu ¹ , Daniel Sidenius ¹ , Anaïs Espinal ² , Steven Subi ² , National Institute of Standards and Technology, University of Connecticut	3:20 PM	Understanding Adsorption-induced Breathing Transitions in Metal-organic Frameworks: From the Unit Cell to the Crystal. Carles Triguero ¹ , François-Xavier Couder ¹ , Anne Boutin ² , Alain Fuchs ³ , Alexander Neimark ⁴ , ¹ Chimie Paris Tech, ² ENS, ³ CNRS, ⁴ Rutgers University	3:40 PM	Adsorption Process in Porous Materials: New Investigations on the Role of Elastic Strain. Annie Grosman ¹ , Etienne Rolley ² , ¹ INSP-Université Pierre & Marie Curie, ² LPS-ENS-Universités	4:00 PM	Break		
2:40 PM													
	4:00 pm												

21A. Thursday Parallel Session: Thermodynamics of Adsorption	
4:20 PM	Dynamical Modeling of Hysteresis in Water Adsorption in Concrete. Matthew Pinson, ¹ Elena Strekalova, ¹ Enrico Masoero, ¹ Hamlin Jennings, ¹ Zdenek Bazant, ² Roland Pellenq, ¹ Martin Bazant, ¹ Massachusetts Institute of Technology, ¹ Northwestern University ²
4:40 PM	Understanding the Equilibrium Ion Exchange Properties in Faujasite Zeolite from Monte Carlo Simulations. Marie Jeffroy, ¹ Anne Boutin, ¹ Alain H. Fuchs, ² Ecole Normale Supérieure, ¹ CNRS & Chimie ParisTech
5:00 PM	A New Statistical Mechanical Approach to Optimize Adsorbent Properties for CO₂ Separation by PSA. Eder Garcia, ¹ Javier Perez-Pellitero, ¹ Gerhard Pilgramer, ¹ Elsa Jolimaitre, ¹ Christian Jallat ² , IFPEN, ² Université de Lyon
5:20 PM	Evaluation of Ideal Adsorbed Solution Theory to Predict the Elution Behavior of Mixtures of Dissolved Phenyl-n-alkanes on Carbon. Héctor Octavio Rubiera Landa, ¹ Dietrich Flockezi, ¹ Andreas Seidel-Morgenstern, ¹ Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems
5:40 PM	Isosteric Enthalpies for Hydrogen Adsorbed on Nanoporous Materials at High Pressures. Nuno Bimbo, ¹ Jessica Sharpe, ¹ Valeska Ting, ¹ Tim Mays, ¹ University of Bath
6:00-6:20 PM	Challenges in Adsorption Technology – Adsorption of Trace Compounds in Gas and Liquid Phase. Dieter Bäthgen, ¹ University of Duisburg-Essen
	21B. Thursday Parallel Session: Adsorption Separation Processes
4:20 PM	Relay Simulated Moving Bed Chromatography: Concept and Design Rules. José Mota, ¹ Ricardo Silva, ¹ Requinte/CQFB
4:40 PM	Design of Multiple Columns H₂ Pressure Swing Adsorption in H₂ and Power Co-generation IGCC with Pre-combustion Carbon Capture. Mauro Luberti, ¹ Hyungwoong Ahn, ¹ Daniel Friedlich, ¹ Stefano Brandani, ¹ University of Edinburgh
5:00 PM	Separation of Isomeric Furcoumarins from Umbelliferae Plants Extracts for PUVA-Therapy of Psoriasis by Supercritical Fluid Chromatography. Oleg Pokrovskiy, ¹ Alla Krutikova, ¹ Konstantin Ustinovich, ¹ Olga Parenago, ¹ Valery Lunin, ¹ IGC RAS
5:20 PM	Reactive Blue 4 Dye-Ligand Epoxide Chitosan/Alginicate for IgG Purification from Human Serum by Affinity Chromatography. Diego Gondim, ¹ Maria Sousa, ¹ Wellington Adriano, ¹ Igor Bresolin, ³ Diana Azevedo, ¹ Ivanildo Silva, Jr., ¹ Universidade Federal do Ceará, ² Universidade Federal de Campina Grande, ³ Universidade Federal de São Paulo
5:40 PM	Separation of CO₂/N₂ and CO₂/CH₄ Gas Mixtures with New Silicalite-1 Adsorbent Membranes Synthesized on a Novel Support. Muhammad Tawaibeh, ¹ Ali Hassan, ¹ Boguslaw Krużek, ¹ E. Handan Tezel, ¹ University of Ottawa
6:00-6:20 PM	Hydrogen PSA Process at a High Pressure Conditions. Dong-Geun Lee, ¹ Chang-Ha Lee, ¹ Yonsei University

21C. Thursday Parallel Session: Environmental Applications	
4:20 PM	Capture of Formaldehyde by Selective Adsorption on Nanoporous Materials. Jean Pierre Bellat, ¹ Igor Bevezkhy, ² Guy Weber, ² Sébastien Royer, ² Jean François Lamontier, ² Université de Bourgogne
4:40 PM	Adsorption and Breakthrough of 1,2-Dichloroethane, Ethyl acetate, and Benzene on Fixed Bed Packed with MIL-101: Effects of Relative Humidity. Shikai Xian, Qibin Xia, Hongxia Xi, Zhong Li, South China University of Technology
5:00 PM	Insights on the Anomalous Adsorption of CO₂ and CO in LTA Zeolites. Ana Martin-Calvo, ¹ Jose B. Parra, ² Conchi Ania, ¹ Sofia Callejo, ¹ University Pablo de Olavide, ¹ Instituto Nacional del Carbon
5:20 PM	Layered Double Hydroxides (LDHs) based Materials for the Adsorption of Sulphur Dioxide. Man On Fu, Frank L.Y. Lam, Xiujun Hu, Hong Kong University of Science and Technology
5:40 PM	Competitive Adsorption of Water Vapor and Carbon Dioxide on Elastic Layered Metal-organic Frameworks for Carbon Capture from Pre- and Post-combustion Gases. Tran Trinh, Francisco Sotomayor, Christian Lastoskie, University of Michigan
6:00-6:20 PM	Temperature Dependent Immobilization of CH₄ and H₂ in Narrow Pore Zeolites. Frieder Dreisbach, ¹ Tobias M. Fieback, ² Rubotherm GmbH, ¹ Ruhr-University Bochum
	22. Conference Gala Dinner
	CONFERENCE GALA DINNER (included in the registration fee) Sponsored in part by Quantachrome
	Friday, May 24, 2013
7:30 AM	Light Breakfast (included in the registration fee)
9:50 AM - 12:15 PM	EXHIBITION OPEN
	23. Friday Plenary Session: Adsorption in Energy Technology
8:30 AM	High-Throughput Screening of Functionalized Metal-organic Frameworks for Hydrogen Storage. Yamil J. Colón, David Fairén-Jiménez, Christopher E. Wilmer, Randall Q. Snurr, Northwestern University
8:50 PM	Biogas Separation and Natural Gas Cleanup using Elastic Layered Metal-organic Framework Adsorbents. Francisco Sotomayor, Tran Trinh, Christian Lastoskie, University of Michigan
9:10 AM	Enhanced CO₂ Adsorptivity of Single Walled Carbon Nanotubes by Polycyclic Aromatic Hydrocarbons-intercalation. Toshihiko Fujimura, Toshihiko Khoerunisa, Diana Minami, Aaron Morelos Gomez, Mauricio Terrones, Morinobu Endo, Katsumi Kaneko, Shinshu University
9:30 AM	Adsorption of Carbon Dioxide on Graphene Oxide Supported Hydrotalcites. Diana Inurteadoyena, Ainara García-Gallastegui, Klaus Heiligardt, Milo Shafer, David Chadwick, Imperial College London
9:50 AM	Break

24. Friday Plenary Session: Adsorption Separation Processes

- 10:20 AM **Three Columns Intermittent Simulated Moving Bed (3C-ISMB) Chromatography for Difficult Binary and Ternary Separations.** Simon Jermann, Andreas Alberti, Marco Mazzotti, ETH Zurich
- 10:40 AM **Optimization Based Design and Experimental Validation of Simulated Moving Bed Chromatography Systems for Ternary Separation.** Gaurav Agrawal, Yoshiaki Kawajiri, Georgia Institute of Technology
- 11:00 AM **Modeling Adsorption Effects of Complex Polymers in Solvent-gradient Interaction Chromatography.** Christopher J. Rasmussen¹, Brian McCauley¹, Yefim Brun¹, Alexander V. Neimark², DuPont Central Research and Development², Rutgers The State University of New Jersey
- 11:20 AM **Separation of H₂D₂ Isotope Mixtures in MOFs.** Julia Teufel¹, Hyunchul Oh¹, Michael Hirscher¹, Agnieszka Kuc², Mohammad Wajiduzzaman², Luben Zhechkov², Thomas Heine², Dmytro Denysenko³, Dirk Volkmer³, Max Planck Institute for Intelligent Systems³, Jacobs University Bremen³, University of Augsburg
- 11:40 AM **Non-Equilibrium, Non-Isothermal Desorption of Nitrogen from a LiX Zeolite Column by Rapid Pressure Reduction and Rapid Purge by Oxygen.** Rama Rao Venkula, Sue Chai, Mayuresh Kothare, Lehigh University
- 12:00 PM **Closing of Conference**
- Poster Presentations**
- **Multicomponent Breakthrough Curves from a Lagrangian Model of a Fixed Bed Operation.** Georgina C. Laredo, Jesus O. Marroquin, Instituto Mexicano del Petroleo
 - **Octane Enhancement by the Selective Separation of Branched and Linear Paraffins in Naphthas using a PVDC-PVC Molecular Sieve Carbon.** Georgina C. Laredo, Jose Luis Cano, Jesus Castillo, Instituto Mexicano del Petroleo
 - **Stability of Supported Amine Sorbents to SO_x and NO_x in Post-Combustion CO₂ Capture Processes.** Fateme Rezaei, William J. Koros, Christopher W. Jones, Georgia Institute of Technology
 - **Dimensional Stability of Adsorbents Subjected to Thermal Cycling.** Mark Ackley, Steven Pontonio, Praxair Inc.
 - **Hydrogen-bond-induced Supermolecular Assemblies in a Hydrophilic and Hydrophobic Silica Nanopores.** Aziz Ghofri, Ivonne Hurieu, R. Renou, Denis Morineau, Institut de Physique de Rennes
 - **Simplified Determination Method of Adsorption Kinetic Parameters using Recycling Fixed-bed Adsorbents.** Junpei Fujiki¹, Kazuya Watanabe¹, Takashi Kawakita², Eiji Furuya¹, Kawasaki², Zenkosha Co. Ltd.
 - **Application of Agricultural Waste/By-products as Adsorbents in Water Purification.** Seshaih Kalluru, Sri Venkateswara University
 - **Preparation of Activated Carbon from Ceiba Pentandra Hulls, an Agricultural Waste and its Application as an Adsorbent in the Removal of Nickel from Water.** Hannath Yapati, Ramesh Naik, Seshaih Kalluru, Sri Venkateswara University

- **Method and Kit for Adsorbent Performance Evaluation.** Neil Stephenson, Steven Pontonio, Michael Freiert, Philip Bartlett, Praxair Inc.

- **Study of Desorption in a Saturated Clay with Nitrogen Compounds of Medium Fraction of Petroleum.** Marco Figueiredo¹, Luana Baia¹, Wallace Ramalho¹, Sandra Chiari², UERJ; ²Petrobras
- **Synthesis and Adsorption Properties of Li1.6Mn1.6O4 Spinel.** Shu-Ying Sun, East China University of Science and Technology
- **Adsorption/desorption of Cationic Dye on Surfactant Modified Mesoporous Carbon Coated Monolith: Equilibrium, Kinetic and Thermodynamic Studies.** Thomas Choong, Universiti Putra Malaysia
- **The Application of Flux Response Technology in the Analysis of in situ Measurements of Carbon Dioxide Adsorption on Zeolites.** Ayodeji Sasegbon, Klaus Helgardt, Imperial College London
- **Molecular Modelling of Protein Adsorption: From Fundamentals to Design.** Matthew Penna, Milan Milajlovic, Meisam Vafizadeh Kiamnahalleh, Mark Biggs, The University of Adelaide
- **Synthesis and Characterization of Cuprous Oxide Nanoparticles utilizing Nanocarbon Materials.** Takahiro Ohkubo¹, Mitsuhiro Ushio¹, Koki Ueda², Isamu Moriguchi¹, Takaya Ota³, Atsushi Iida¹, Yasushiige Kuroda¹, Okayama University¹, Nagasaki University², Shinshu University³
- **Pore Size Control in a 3D Metal-organic Framework by Anisotropic Thermal Expansion.** Atsushi Kondo, Kazuyuki Maeda, Tokyo University of Agriculture and Technology
- **Remediation of Wastewater Containing Heavy Metals using Raw and Modified Fly Ash.** Maria Visca, Transilvania University of Brasov
- **A Process for Separating CH₄, Effectively.** Takayoshi Adachi, Masao Kawai, Taiyo Nippon Sanso Corporation
- **Efficiency of Different Wastes Modified with a Cationic Surfactant in the Adsorption of Heavy Metals from Complex Wastewater.** Maria Visca, Luminita Andronic, Transilvania University of Brasov
- **Predictive Models of Flue and Fuel Gas Components Adsorption in High Surface Area Carbon Materials.** Emanuelia Di Biase, Lev Sarkisov, University of Edinburgh
- **Computer Simulations and Experiments of Normal and Branched Alkane Adsorption in Complex Carbonaceous Materials.** Alex Harrison¹, Roger Cracknell², Jens Knieger-Venus³, Lev Sarkisov¹, University of Edinburgh, ²Shell Technology Centre Thornton, ³Shell Global Solutions (Deutschland) Process
- **Capillary Condensation of Nitrogen in SBA-15 Mesoporous Silica treated by a Carbon-coating Process.** Kunimitsu Morishige, Takanori Oda, Okayama University of Science
- **Center-cut Separation of a Compound having Intermediate Adsorptivity out of a Multicomponent Mixture by SMB Chromatography.** David Kiivala¹, Jadwiga Nowak², Doroia Antos², Andreas Seidel-Morgenstern¹, Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems, ²Rzeszow University of Technology
- **Identification of Adsorption Isotherm Type based on Nonlinear Frequency Response Results.** Menka Petkovska, University of Belgrade
- **ZSM-5 as Adsorbent for Recovery of Biochemicals from ABE Fermentation Broth.** Abrar Faisal, Lindsay Ohlin, Agata Zarebska, Pardis Saremi, Daniil Korelskiy, Urrika Rova, Mattias Grahn, Jonas Hedlund, Luleå University of Technology

- Evaluation of the Effectiveness of Macroporosity for Rapid Gas Uptake using Integrated Gas Sorption and Mercury Porosimetry. Aitor Nepvalin¹, Elizabeth Holt², Robin Fleicher², Sean Rigby¹, ¹University of Nottingham; ²Johnson Matthey
- Simulation-based PSA Process Designer. Satyavrat Sahoo, Arun Moharir, Indian Institute of Technology Bombay
- Development of Single-wall Carbon Nanotube Adsorbent Systems for Removal of Organic Compounds from Aqueous Environments. Reginald Rogers, Steven Weinstein, Brian Landi, Rochester Institute of Technology
- Understanding and Prediction of Breathing Transition in MIL-53(A): A Thermodynamics and Statistical Mechanics Study. Yu Liu, Xieqian Chen, Jun Hu, Honglai Liu, Ying Hu, East China University of Science and Technology
- Computer Simulation of Gas Adsorption in COF-108 with C60 Impregnation. Yujun Zhu, Jianhai Zhou, Jun Hu, Honglai Liu, Ying Hu, East China University of Science and Technology
- Enhanced Adsorptive Separation using Rotary Bed Systems. Anshu Shukla¹, Aishwary Dalei¹, Rajesh Binwal², Arun Moharir¹, Indian Institute of Technology Bombay; ¹National Environmental Engineering Research Institute
- CO₂ Occlusion by Na₂CO₃ and K₂CO₃ under Moisture. Hideyuki Chiyama, Tomonori Ohba, Hirofumi Kanoh, Chiba University
- Preparation of 3-aminopropyl-triethoxysilane Modified Graphite and its Application to Carbon Dioxide Adsorption. Seok-Min Hong, Ki Bong Lee, Sung Hyun Kim, Korea University
- Synthesis of High Temperature Carbon Dioxide Adsorbent of M+/M2+ Combined Structure and Its Properties. Chan-Hyun Lee, Ki Bong Lee, Korea University
- Synthesis of Hydrotalcites using Polymer Template and their Co₂ Adsorption Capacities. Hee Jin Jang, Ki Bong Lee, Sung Hyun Kim, Korea University
- Two Components of Chloride Anion Exclusion Volume In Montmorillonitic Soils. Tamara Polubessova, Mikhail Bonsover², The Hebrew University of Jerusalem; ²The Volcani Center ARO
- Mixed Theoretical and Experimental Study of Breathing in MIL-53(A). Aurélie Ortiz¹, Marie-Anne Springuel-Huet², François-Xavier Couïard¹, Alain H. Fuchs, Anne Boutin¹, CNRS & Chimie Paris Tech, ²UPMC, ³Ecole Normale Supérieure
- Computational Exploration of Functionalized Porous Zr-Terephthalate MOF for Membrane Based Adsorption Applications. Dong Wu¹, Qingyuan Yang², Chongli Zhang², Guillaume Maurin³, Institut Charles Gerhardt Montpellier UMR 5253 CNRS; ²State Key Laboratory of Organic-Inorganic Composites Beijing University of Chemical Technology; ³Université Montpellier 2
- Multicomponent Chiral Separations by Multicolumn and Simulated Moving Bed Adsorption Processes. Antônio E. Ribeiro, Nuno S. Graca², Alexandre P. Ferreira², Alírio E. Rodrigues², Luis S. Pais¹, ¹Polytechnic Institute of Bragança; ²University of Porto
- The Removal of Dye Colours from Aqueous Solution by Adsorption on Peanut Shell. Thays Tsuji, Marcio Alves, Eliane Danesi, Giselle Couto, State University of Maringá
- Molecular Motion of Alcohols Adsorbed in ACF Hydrophobic Nanosilts as Studied by Solid State NMR. Hiroaki Omichi, Takahiro Ueda, Keisuke Miyakubo, Taro Eguchi, Osaka University

- Modeling Adsorption of Gas Mixtures on Microporous Media for Hydrogen Purification. Luis F. Gomez, Pierre Benard, UQTR-IH
- Synthesis, Characterization and n-Hexane Adsorption on MIL/Graphite Oxide Composites. Qibin Xia, Xuejiao Sun, Jinpeng Miao, Hongxia Xi, Zhong Li, South China University of Technology
- Sorption of CO₂ in Clay Minerals and Saline Water from Subcritical to Supercritical Conditions. Jiwon Choi, Pil-Rip Jeon, Hyeon-Hui Lee, Chang-Ha Lee, Yonsei University
- A PSA Process for Recovering H₂ from the Emitted Gas of a Waste Melting Incineration Process. Dongkyu Moon, Jae-Jeong Kim, Dong-geun Lee, Chang-Ha Lee, Yonsei University
- The Effect of Product Recycling Feed on the Separation Performance in Simulated Moving Bed Chromatography. Kyung-Min Kim, Ji-Yeon Song, Chang-Ha Lee, Yonsei University
- The Effect of Bed Void Volume on the Air Separation PVSA Process with a CFD Approach. Dong-Geun Lee, Yong-Ha Park, Chang-Ha Lee, Yonsei University
- Diffusivity of n-Hexane within MFI-type Zeolite with Coke in Vapor Phase. Yuta Nakasaka, Hiroki Konno, Takahiro Kawahara, Teruki Tago, Takao Masuda, Hokkaido University
- Interaction of Water with a Flexible MOF Type Gallium MIL-53. Jean Pierre Bellat, Igor Bezyerikhyy, Guy Weber, Anthony Ballandras, Gérald Chaprais, Guillaume Ortiz, Joel Patarin, Anne Boutin, David Bousquet, Aurélie Ortiz, François-Xavier Couïard, Alain Fuchs, Université de Bourgogne
- CO₂ Removal from Substitute Natural Gas (bio-SNG) by a Vacuum Pressure Swing Adsorption Process: Kinetic versus Equilibrium Separation. Pascaline Pré, Lomig Hamon, Thangavelu Jayabalan¹, Matthieu Dreillard², Agathe Jarry², Olivier Guerrini², ¹Ecole des Mines de Nantes; ²GDF Suez
- Simple Method based on the Potential Theory for Buoyancy Effect Correction of Pure Gases Adsorption and Gas Mixtures Adsorption. Lomig Hamon, Louise Cheney², Guy De Weireld², ¹Ecole des Mines de Nantes; ²Faculté Polytechnique U-Mons
- CO₂ Capture by VSA from a Dry Post Combustion Flue Gas: A Pilot Plant Study. Shreenath Krishnamurthy, Ramarao Verma¹, Reza Haghpanah², Arvind Rajendran², Iftekhar Karimi¹, Mohammad Amanullah², Sahilish Guntuka¹, Paul Sharrett¹, National University of Singapore; ²Nanyang Technological University, ³Institute of Chemical and Earth Sciences
- Separation of Nitrogen/Methane on Organic Cation Zeolites for Natural Gas Purification. Gang Li^{1,2}, Jin Shang², Penny Xiao², Ranjeet Singh², David Danach², Paul Webley², Eric May³, ¹The University of Melbourne; ²The University of Western Australia
- The Impact of Voidage Variation on Adsorption Processes. Peter Heegs, Andrew Wright, ¹University of Leeds; ²Air Products PLC
- Physisorption of Poly(dioctylfluorene) Onto Silica Surface Suspended in Chloroform. Avako Nakao, Michiya Fujiki, Nara Institute of Science and Technology
- Investigation of the Dynamics in MOFs to Probe the Adsorption of Model Molecules by Combining Dielectric Relaxation Spectroscopy and Molecular Simulations. Sabine Devautour-Vinot¹, Arnaud Planchais¹, Fabrice Salles¹, Guillaume Maurin¹, Thomas Devic², Denise Cunha², Patricia Horcajada², Christian Serre², Institut Charles Gerhardt; ²Institut Lavoisier
- Synthesis of Butyl Acetate using Reactive Chromatography. Rahul Bhat, Bhoja Reddy, Sanjay Mahajan, IIT Bombay

- Adsorptive Desulfurization of Hydrocarbon Fuels using Mixed Oxide supported Silver Adsorbents: Effect of Surface Acidity at Ambient Conditions. AHM Shahadat Hussain, Bruce J Tatarchuk, Auburn University
- Experiment and Simulation for Separation of Trans-stilbene Oxide Enantiomers by Chiralcel OD Preparative Column. Ruijin Gong, Ping Li, Jianguo Yu, Jin Wang, Suying Sun, East China University of Science and Technology
- Formation Process of Hydrated Zinc Ions Restricted in Micropores of Highly Pure Single-wall Carbon Nanotube. Masayasu Nishi, Takahiro Ohkubo, Atsushi Itadani, Yasushige Kuroda, Okayama University
- Adsorption Isotherms and Kinetic Curves of H₂/CO/CO₂/H₂O on MIL-100(Fe) and their Breakthrough Curves in Fixed Bed. Sha Wang, Xin Zhou, Chen Ma, Qibin Xia, Zhong Li, South China University of Technology
- Synthesis of CaO/Al₂O₃ Sorbent Materials and CO₂ Capture Performance at High Temperature. Mingming Zhang, Ping Li, Jianguo Yu, Jin Wang, Shuying Sun, East China University of Science and Technology
- Hygroscopic Behavior and Water Vapor Adsorption Isotherms of Polymers used as Microencapsulates in the Spray Drying Process. Oscar Avila-Luna, Juan Rodriguez-Ramirez, Lilia Mendez-Lagunas, Karina Garcia-Lucas, Instituto Politécnico Nacional CEDIR Oaxaca
- Characterization and Utilization of Fly Ash of Petroleum Origin Generated in Power Stations. Yahya AlDeegs¹, Ayoub Ghrai², Mohammad AlGhouti³, Hashemite University, ²Royal Scientific Society, Qatar University
- Competitive Adsorption Characteristics of Benzene-water Vapor Mixtures onto the Microporous Cu-MOF (HKUST-1). Zhenxia Zhao, South China University of Technology
- Adsorption Isotherms and Surface Activation Energies of Desorption of Toluene on the Metal-Organic Framework HKUST-1 and MIL-101. Feng Xu, Zhong Li, South China University of Technology
- Ageing of Phenol Adsorption Sites on Activated Carbons. Leticia Velasco, Conchi Ania, INCAR CSIC
- Development and Characterization of Surfactant based Nano-composite Cation Exchanger and its Applications for Removal of Pb²⁺ Ion from Aqueous Medium. Mu Naushad, Mohammad Alam, Zeid Alottoman, King Saud University
- High Purity Multi-walled Carbon Nanotubes: Preparation, Characterization and Performance as Filler Materials in Co-polyimide Hollow Fiber Membranes. Evangelios Favaas¹, Stephanos Nikitas², Konstantinos Stefanopoulos¹, Sergios Papageorgiou¹, Athanasios Mitropoulos³, NCSR "Demokritos", Glonatech S.A.; ³Cavala Institute of Technology
- Ad- and Desorption in a Trienzymatic Production Process for Laminarinose. Thomas Waluga¹, Manwan Zein², Jordeling Hans-Joachim², Scholl Stephan¹, TU Braunschweig Institute for Chemical and Thermal Process Engineering; ²TU Braunschweig Institute for Technical Chemistry
- Calorimetric Study of the CO₂ Adsorption on Carbon Materials. Diana P. Vargas¹, Liliana Giraldo Gutierrez¹, Julian Carlos Moreno-Piraján², Universidad Nacional de Colombia; ²Universidad de Los Andes
- Metal Adsorption on Modified Activated Carbon: A Calorimetric Study. Liliana Giraldo¹, Paola Rodriguez¹, Juan Carlos Moreno-Piraján², Universidad Nacional de Colombia; ²Universidad de Los Andes
- Metal-organic Frameworks for Removal of Xe and Kr from Nuclear Fuel Reprocessing Plants. Jian Liu, Praveen Thallapally, Denis Strachan, Pacific Northwest National Laboratory
- A Spatially Dynamic Approach for Gas Separations. Paul Mariner, Sandia National Laboratories
- Silver Containing Activated Carbon Fibers Obtained by Chemical Activation. Aleksandr Lysenko, Olga Astashkina, Saint-Petersburg State University of Technology and Design
- Phenol Degradation by Powdered Metal Ion Modified TiO₂ Based Photocatalysts. Majeda Khrisheh¹, Lijun Wu², Alaa Al-Mutlaq³, University of Qatar; ²University College London; ³Sultan Qaboos University
- Adsorption-Photocatalytic Degradation of Antiepileptic Drug Pollutant using Novel TiO₂-coconut Shell Powder (TCNSP) Composites. Majeda Khrisheh¹, Jongkyu Kim², Luisa Campos², Alaa Al-Mutlaq³, University of Qatar; ²University College London; ³Sultan Qaboos University
- MOF Based Microseparator: Electrochemical Synthesis and Separation Performance. Tom R.C. Van Assche, Jeroen F.M. Denayer, Vrije Universiteit Brussel
- Inverse Shape Selectivity in the Adsorption of n-hexane and Cyclohexane on the UO₆66 Metal-organic Framework. Begüm Bozbıylık, Tim Duerinck, Gino V. Baron, Jeroen F.M. Denayer, Vrije Universiteit Brussel
- Metal-organic Frameworks as Stationary Phase in Capillary Liquid Chromatography. Sulin Van der Brussel¹, Dirk E. De Vos², Pieterjan Verheyen², Gino V. Baron¹, Jeroen F.M. Denayer¹, Vrije Universiteit Brussel; ²Katholieke Universiteit Leuven
- Simulation and Optimization of Multi-bed Pressure Swing Adsorption Process for N₂/CH₄ Separation. Huawei Yang, Donghai Zhang, Tianjin University
- Platinum (II), Palladium (II) and Gold (III) Adsorption by Carbon Nanotubes, Carbon Black and Activated Carbon. Vladimir A. Lysenko, Olga V. Astashkina, Alexander A. Lysenko, St. Petersburg State University of Technology and Design
- Structural Study by Neutron Diffraction of Ethane (2D) Film Adsorbed on MgO (100) Powder. Jean-Paul Coulombe¹, Moshen Trabolsi², Isabelle Mirebeau³, CNRS - Faculté des Sciences; Laboratoire Léon Brillouin
- In situ SAXS Study of Adsorption in Porous Glass Including Hysteresis Scanning Measurements. Evangelos Favaas¹, Konstantinos Stefanopoulos¹, Nikolaos Vordos², Athanasios Mitropoulos², NCSR "Demokritos"², Cavala Institute of Technology
- Use of the Transition Matrix Monte Carlo Simulation Method to Model Gas Adsorption Processes and Identify Capillary Phase Transitions. Daniel Siderius, William Krekelberg, Vincent Shen, National Institute of Standards and Technology
- MgO (100) Surface Influence on Physisorbed Composite Bilayer Film (Krypton – Methane) Observation of an Kr-CD4 Alloy. Khadija Madin-Ayadi¹, Isabelle Mirebeau², Jean-Paul Coulombe³, Faculté des Sciences; ²Laboratoire Léon Brillouin; ³CNRS
- Bypass-SMB: An Improved Process for Reduced Purity Separations. Jani Siltonen¹, Tuomo Sainio¹, Arvind Rajendran², Lappeenranta University of Technology; ²University of Alberta
- Adsorption Separation of N₂ from CH₄ by Chabazite with Controllable Reversible Selectivity. Jin Shang, Gang Li¹, Ranjeet Singh¹, Penny Xiao¹, Qinfen Gu², Zhe Liu³, Paul Webley¹, ¹The University of Melbourne; ²Australian Synchrotron, Melbourne; ³Monash University

- Water Adsorption Kinetics on Microporous Carbon: From a Dependency on Pore Size. Hironobu Ito, Taku Iiyama, Atom Hamasaki, Sumio Ozeki, Shinshu University
- Investigation of Phase Transition Phenomena in Confined Spaces by Measuring Adsorption Isotherm and Isobar. Tomohiro Ochiai, Taku Iiyama, Sumio Ozeki, Shinshu University
- Heavy Metal Ions Adsorption from Aqua Solutions by Activated Carbon Fibers. Olga V. Astashkina, Nadejda V. Rusova, Vladimir A. Lysenko, Alexander A. Lysenko, St. Petersburg State University of Technology and Design
- Comparative Study of Protein Adsorption onto Silica Nanoparticles. Jens Meissner, Bhuvnesh Bharti, Gerhard Finkenegg, Technical University Berlin
- Ab-initio Model of Molecule-templated Mesoporous Silicas: Structural, Morphological and Adsorption Properties. Benoit Coasne, Piero Ugliengo, CNRS - MIT; University of Torino
- Limitations of Overall Mass Transfer Model for Fixed-bed Operations. Huan-jung Fan¹, Takashi Kawakita², Junpei Fujii³, Akitomo Murata³, Eiji Furuya³, Hungkuang University, Zenkosha Co. Ltd., Meiji University
- Water and Nitrogen in Cement: Sorption in Complex Microstructures. Elena Sirekalova, Enrico Masero, Roland Pellenq, Hamlin Jennings, Massachusetts Institute of Technology
- Embedded Sensor Approach via Fiber Optics and Diffuse Reflectance Spectroscopy of Doped Temperature. Achintya Sujati, Bruce Tatarchuk, Auburn University
- Investigation of the Structure of Confined Molecules in Crystal Porous Solids. Takuya Ota¹, Taku Iiyama, Atom Hamasaki¹, Takahiro Ueda¹, Shinshu University, Osaka University
- The Role of the Solvent in Determining the Surface Texture of Calcium Hydroxide. Charis Theocaris, University of Cyprus
- Dye Encapsulation Inside a New Mesoporous Metal-Organic Framework **DUT-25** for Multifunctional Solvatochromic Resonance Function. Ronny Grünker, Volodymyr Bon, Nicole Klein, Philipp Müller, Ulrich Stoeck, Irena Senkovska, Stefan Kaskel, Dresden University of Technology
- Adsorption of Organics on **MSC5A** in Supercritical CO₂, Chromatographic Measurements and Molecular Simulation. Kazuyuki Chihara, Takaki Yasuda, Masashi Shinsako, Shingo Ito, Meiji University
- Multi-Component Gas Adsorption on **MSC5A** by Chromatographic Method and Simulation Study. Kazuyuki Chihara, Masashi Nomoto, Shohei Koide, Yuzo Amari, Yuki Teramura, Meiji University
- Adsorption of Organics on **MSC5A** in a Supercritical CO₂ Fluid: Chromatographic Measurements and Stop and Go Simulation. Kazuyuki Chihara, Masashi Shinsako, Takaki Yasuda, Shingo Ito, Meiji University
- Multi-component Gas Adsorption on **MSC3A** by Volumetric Technique Method and Simulation. Kazuyuki Chihara, Shohei Koide, Masashi Nomoto, Yuzo Amari, Yuki Teramura, Meiji University
- Examination of Solvent Recovery by Pressure Swing Adsorption (PSA) Method – Influence of Coexistence Humidity. Kazuyuki Chihara, Teruhisa Katoh, Katsuhira Kawahara, Jun Kobayashi, Kouki Aoshima, Takuwa Chiyoda, Meiji University
- MD Simulation Macroscopic Experimental and Adsorption Rate of Organic Chlorine Compounds in the High Silica FAU Zeolite. Kazuyuki Chihara, Natsuki Yamada, Tatsujiro Taira, Yuzo Amari, Yusuke Suzuki, Shinji Tomita, Meiji University
- In Situ Powder Diffraction during the Gas Adsorption on Metal-organic Frameworks. Andreas Heerwig¹, Volodymyr Bon¹, Irena Senkovska¹, Nicole Klein¹, Dirk Wallacher², Ivo Zizak², Esther Dudzik², Ralf Feyerherm², Stefan Kaskel¹, Dresden University of Technology¹, Helmholtz-Zentrum Berlin
- Experimental and Molecular Simulation of Adsorption Equilibrium of Organic Chlorine Compounds on to High Silica FAU Type Zeolite. Kazuyuki Chihara, Natsuki Yamada, Tatsujiro Taira, Yuzo Amari, Yusuke Suzuki, Shinji Tomita, Meiji University
- The Studies of Particle Diffusion on a Patchwise Bivariate Surface. Alexander Tarasenko, Lubomir Jastrabik, Institute of Physics AS CR, Prague
- Corrections of Higher Order Frequency Response Functions of Adsorption Systems based on Blank Experiments. Danica Brzic, Meilka Petkovska, University of Belgrade
- New Hydrolytically Stable Zr and Hf based Metal-organic Frameworks. Volodymyr Bon¹, Volodymyr Senkovsyy¹, Irena Senkovska², Stefan Kaskel¹, Dresden University of Technology¹, Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e. V.
- Biogas Purification by PSA Processes using MOF as Adsorbent: From the Pure Compound Isotherms to the Breakthrough Curves. Sébastien Vaesen¹, Jong-San Chang², Iu-Hwang Lee², Guy De Weireld¹, Université de Mons, KRICT
- Measuring Energetic Heterogeneity of Solids using Inverse Gas Chromatography. Daniel Burnett, Surface Measurement Systems Ltd.
- Adsorption and Catalytic Oxidation of VOCs: From Laboratory to Pilot Scale. Sonia Carré¹, Manuel Franoó², Tarek Barakat³, Renaud Cousin³, Jean-Marc Giraudon², André Decroy¹, Jean-François Lamonié², Stéphane Siffert³, Diane Thomas¹, Guy De Weireld¹, Université de Mons, Université Lille 1, Université du Littoral Côte d'Opale
- Suitability of HMOF-1 for the Separation of Pentanol Isomers. Rocio Buepo-Perez, Andrea Soledad Do-Cugno, Patrick Jacques Merkling, Sofía Callejo, University Pablo de Olavide
- Tailoring Metal-organic Frameworks for Industrial Applications using Molecular Simulations. Sofía Callejo, University Pablo de Olavide
- Probing Density Effects within Nanoconfined Benzene with Molecular Dynamics Simulations of the Optical Kerr Effect. John Bender¹, Xiao He¹, Benoit Coasne¹, John Fourkas¹, University of Maryland, Massachusetts Institute of Technology
- Adsorption and Dynamics of MOF-based Hierarchical Solids. François Villeneuve¹, Benoit Coasne², Anne Galanneau¹, ENSCM, CNRS - MIT¹, Monash University
- An Adsorbent/MIEA Hybrid Process for Post-combustion CO₂ Capture. Gongkui Xiao¹, Penny Xiao¹, Jun Zhang¹, Andrew Hadley², Paul Webley¹, The University of Melbourne, CNRS - MIT¹, Tatsujiro Taira¹, Dioung D Do², Meiji University, The University of Queensland
- Azeotropic Adsorption Equilibrium of Mixed Organic Solvents on FAU Type High Silica Zeolite - Molecular Simulation and Do's Method. Kazuyuki Chihara, Natsuki Yamada¹, Tatsujiro Taira¹, Dioung D Do², Meiji University, The University of Queensland
- Characterization of Solid and Liquid Sorbent Materials for Bio Gas Cleaning Applications and Evaluation of IAST Mixture Sorption Predicting Model with Quaternary Gas Mixtures. Tobias M. Flieback¹, Jens Röther¹, Frieder Dreisbach², Ruhr-University Bochum, Rubotherm GmbH

- **CO₂ Capture from Wet Diluted Streams using Polyamine/Silica Materials: Sorbent and Process Considerations.** Stephane Walsburger, Jan Wilco Dijkstra, Gerard Elzinga, ECN
- **Study of Structure Analysis, Ion Exchange and Adsorption Properties of Iron Compound/Fe Substituted Zeolite Hybrid Materials.** Satoshi Yamazaki¹, Yuji Ohsuna¹, Hideki Nishino², Hiroshi Isobe², Shizuoka Inst. of Sci & Tech;²Fuji Chemical
- **Gas-phase Removal of Hydrogen Sulfide using Adsorbent - Measurement of Breakthrough Curve and Modelling of Sulfidation Mechanism.** Takaji Yamamoto¹, Mélaz Tayakout-Fayolle², Christophe Geantet², AIST;²IRCELYON
- **Hydrothermal Stability of Adsorbent Materials for Thermal Energy Storage Applications.** Fabian Fischer, Andreas Hauer, Eberhard Lävemann, Bavarian Center for Applied Energy Research (ZAE Bayern)
- **Study of a Dynamic One-column PSA Process and its Response to Feed Disturbances.** Mónica Santos¹, Carlos Grande², Alírio Rodrigues¹, University of Porto; SINTEF Materials and Chemistry, University of Leipzig
- **PSA Process for Upgrading Natural Gas and Integrated CO₂ Capture.** Carlos Grande, Richard Blom, SINTEF Materials and Chemistry
- **Screening of Commercial Resins for Fructo-oligosaccharides Separation by Simulated Moving Bed.** Cláisse Nobre, Paul Suvakov, Anne-Lise Hanston, Guy De Weirfle, University of Mons
- **Two-step Adsorption of Caffeine from Solution on Activated Carbons.** Rocío J. Carmona,¹ Marta Andrade², María Haro¹, Ana S. Mestre¹, Ana P. Carvalho², Conchi O. Anía¹, Instituto Nacional del Carbon², Universidad de Lisboa
- **Pre-Combustion CO₂ Capture by PSA: Comparison of Laboratory PSA Experiments and Simulations.** Johanna Schell, Nathalie Casas, Marco Mazzotti, ETH Zurich
- **Mesoporous Hybrid Nanocomposites Ni Nanoparticles/Carbon for the Hydrogen Storage.** Deborah Fernand, Philip L. Llewellyn, Virginie Homebeq, Aix-Marseille University
- **Biocatalysts Adsorption onto Carbons for the Design of Biofuel Cells.** Véronique Wernert¹, Renaud Bouchet¹, Elisabeth Lojou², Anne De Pouliquen², Renaud Denoyel¹, MADIREL¹, BIP
- **Material Structure Parameters for Transport Properties.** Véronique Wernert, Renaud Bouchet, Renaud Denoyel, MADIREL
- **Insights on the Molecular Mechanisms of Hydrogen Adsorption in Zeolites.** Kathryn S. Deeg¹, Juan Jose Gutierrez-Sevillano¹, Rocío Bueno-Perez¹, Jose Parra², Conchi Ania², Sofia Calero¹, Universidad Pablo de Olavide, INCAR
- **Experimental and Theoretical Investigation of Binary CO₂ and H₂O Adsorption on Activated Carbon, Zeolite-13X and ZSM-5.** Max Heitl, Dorian Marx, Lisa Joss, Marco Mazzotti, ETH Zurich
- **Automated Estimation of Kinetic and Isotherm Parameters from ZLC Experiments.** Daniel Friedrich, Enzo Mangano, Xiayi Hu, Stefano Brandani, University of Edinburgh
- **Surrogate based Multi-objective Optimisation for the Design of Pressure Swing Adsorption Systems.** Joakim Beck¹, Daniel Friedrich², Stefano Brandani², Eric S. Fraga¹, University College London;²University of Edinburgh
- **Design of a Small Scale Air Capture System.** Maria-Chiara Ferrari¹, Daniel Friedrich¹, Giulio Santori², Stefano Brandani¹, Scottish Carbon Capture and Storage Centre, ²Università degli Studi e-Campus
- **Single Pellet DP-PSA Experiments for the Characterization of Heat and Mass Transfer Parameters.** Wenli Dang, Daniel Friedrich, Stefano Brandani, University of Edinburgh
- **Understanding Selective Carbon Dioxide Adsorption on Univalent Cation Forms of the Flexible Zeolite Rho.** Magdalena Lozinska¹, Enzo Mangano¹, John Mowat¹, Ashley Shepherd¹, Russell Howe³, Stephen Thompson⁴, Julia Parker⁴, Stefano Brandani², Paul Wright¹, University of St. Andrews;²University of Edinburgh;³University of Aberdeen;⁴Diamond Light Source Ltd.
- **Diffusion of CH₄ and CH₄ - CO₂ and CO₂ - N₂ Mixtures Confined in Nanoporous Carbons.** Andrew Santos¹, Joshua Moore¹, Jeremy Palmer³, Keith Gubbins¹, North Carolina State University;²US Army Research Laboratory;
- **Binary Adsorption of Light Gases: Experiments and Modeling for Henry's Law Behavior with One Component in Excess.** Lucas Mitchell¹, Douglas LeVan, Vanderbilt University
- **Carbon Silica Composites with Active Metal Sites for Enhanced Gas Adsorption.** Dushyant Baraga¹, M. Douglas LeVan, Vanderbilt University
- **Multi-component Biosorption of Cu(II) and Pb(II) in a Regenerable Fixed-bed Column by Modified Aquatic Macrophyte Azolla Pinnata.** Arielle Muniz de Barros, Sritei Jaiana Kleinhabing, Meuris Gurgei Carlos da Silva, University of Campinas
- **Separation of Galacto-oligosaccharides using Simulated Moving Bed Chromatography.** Lukasz Wisniewski¹, Carla Sofia Marques Pereira¹, Alírio Egídio Rodrigues¹, Milian Polakovic², University of Porto;²Slovak University of Technology
- **Molecular Simulation of the Adsorption and Diffusion of Toluene in a Mesoporous ZSM-5 Zeolite.** Baoyu Liu, Hongqixi Xie, South China University of Technology
- **Adsorption of Cesium, Cobalt, or Strontium using Microorganism.** Takehiko Tsuruta, Kazuya Sawamukai, Rihitoaroh Nakamura, Shun Ogasawara, Rie Natuhori, Daishi Umenai, Hachinohe Institute of Technology
- **Analysis of a Operation for Gas Separation from Four Component-mixture of Blast Furnace Gas PSA from Blast Furnace Gas.** Hideaki Kuronuma, Noriyuki Kobayashi, Nagoya University
- **Morphological Effect on Gas Adsorption Properties of Two Cu²⁺ based Metal-organic Framework.** Ying Xiong, Shao-Lei Peng, Sha Chen, Ji-Jun Jiang, Cheng-Yong Su, Sun Yat-Sen University
- **Removal of CO₂ from Biogas by Vacuum Swing Adsorption (VSA) Technology.** Ranjeet Singh¹, Penny Xiao¹, Gongkui Xiao¹, Paul Webley¹, Anshu Nanot¹, Amar Goswami², S Dasgupta², M. O. Garg², The University of Melbourne; ²Indian Institute of Petroleum
- **Methyl Iodide Adsorption in DABCO Impregnated Activated Carbons - A Molecular Simulation Approach.** Carmelo Herdes¹, Erich A. Müller¹, Claudia Prosenjak², Silvia Román³, Imperial College London; ²Evonik Industries AG; ³Universidad de Extremadura
- **Molecular Simulation of the Adsorption of Carbon Dioxide, Sulfur Dioxide and their Mixtures on Microporous Carbons.** Kok C. Tan, Carmelo Herdes, Erich A. Müller, Imperial College London
- **A New Generalized Model for Supercritical Sorption in Nanoporous Materials.** Jessica Sharpe, Nuno Bimbo, Antonio Noguera Diaz, Yaleska Ting, Tim Mays, University of Bath

- **A Novel Method for the Analysis of Liquid-on-Solid Surface Adsorption Kinetics.** Thomas Luxbacher, Anton Paar GmbH
- **Study of Nitrogen-Hydroxyl Interactions on Mesoporous Silicas by Adsorption Microcalorimetry at 77 K.** Débora Maia¹, Karim Sapag¹, Redouane Melouti², Jean Rouquerol¹, Philip Lielewijn¹, IFA Univ. National San Luis; ²CNRS / Aix-Marseille Univ.
- **Using Metal Organic Framework for Liquid Phase Adsorption of Aromatic Compounds.** Mohammed Boulhout¹, Renaud Denoyel¹, Dirk De Vos², Isabelle Beurroies¹, MADIREI; ²Centre for Surface Chemistry and Catalysis
- **Towards the Computational Screening of MOFs for Xylene Separation.** Matthew Lennox, Peyman Moghadam, Alastair Gelan, Tina Düren, University of Edinburgh
- **Effect of the Pore Geometry in Activated Carbon Characterization.** Juan Toso¹, Débora Soares-Maia¹, José Oliveira¹, Valeria Cornette¹, Diana Azevedo², Raul Lopez², Universidade Federal do Ceará
- **Synthesis and Characterization of SBA-15 and SBA-16 for the Adsorption of Biomolecules.** Sandra Santos, Karina Nogueira, Marion Gama, Ivanildo Silva, Jr., Diana Azevedo, Universidade Federal do Ceará
- **Effect of Chitosan as Copper Ion Adsorbent in Presence of Amyloid- β Protein or Equivalent.** Cynthia R. A. Mahi¹, Rodrigo B. Rabelo¹, Marisa Beppu¹, Rodrigo Vieira², University of Campinas; ²Universidade Federal do Ceará
- **CO₂ Adsorption on Amine-modified Activated Carbon.** Diogo P. Bezerra, Francisco W. Miranda Silva, Pedro A. Moura, Celio L. Cavalcante, Jr., Rededito S. Vieira, Diana C. S. Azevedo, Universidade Federal do Ceará
- **Theoretical Study on Impregnated NaX Zeolite.** Adriano E.O. Lima, Victor A.M. Gomes, Paulo G.M. Millo, Diana C.S. Azevedo, Sébastião M.P. de Lucena, Universidade Federal do Ceará
- **Quaternized Chitosan Electropun Membranes for Virus Adsorption and Removal.** Xue Mi, Bingyu Bai, Xiang Xu, Patricia A. Heidén, Caryn L. Heldt, Michigan Technological University
- **Adsorption Equilibrium and Selectivity of CO₂/N₂ Mixtures in Faujasites with Mono and Divalent Cations.** Victor Gomes, Breno Braga, Caio Sousa, Luis Silva, Sébastião Lucena, Universidade Federal do Ceará
- **The Effect of Operating Conditions on Mass Transfer Coefficients for Methane and Nitrogen Adsorption Measured in a Dynamic Column Breakthrough Apparatus.** Thomas Saleman, Thomas Rufford, Eric May, The University of Western Australia
- **Thermal Energy Storage using Adsorption: Applications for Solar or Waste Heat.** Burcu Ugru, Sheida Stephens, F. Handan Tezel, University of Ottawa
- **Comparison of the Sticking Coefficients of Different Gaseous Molecules on Silicalite-1 by Molecular Dynamics Simulations.** Jean-Marc Simon, Jean-Pierre Belat, University of Burgundy
- **Preliminary Results of Adsorption Assays for Improved Phosphate Removal by Selective Layered Double Hydroxides.** S.M. Ashekuzzaman, Jia-Qian Jiang, Glasgow Caledonian University
- **Equilibrium Theory Solver for PSA Modelling Applied to Carbon Capture Applications.** Gabriel David Oreggioni, Hyungwoong Ahn, Daniel Friedrich, Stefano Brandani, University of Edinburgh
- **Nanostructural Changes of Highly Pure Double-walled Carbon Nanotubes with High Temperature Annealing.** Yousheng Tao, Hiroyuki Muramatsu², Morinobu Endo³, Kyoichi Oshida², Katsumi Kaneko³, Chinese Academy of Sciences; ²Nagaoka University of Technology; ³Shinshu University
- **Optimal Design of Dual-reflux Pressure Swing Adsorption Units via Equilibrium Theory.** Tushar Bhaital, Giuseppe Storti², Renato Roita¹, Politecnico di Milano; ²ETH Zurich
- **Correlating Phase State and Transport in Hierarchical Mesoporous Materials.** Philipp Zeigermann, Rüstem Yalullin, University of Leipzig
- **Nitrogen Adsorption Studies Combining Experimental Isotherms and GCMC Simulations to Obtain PSD for CMK-3 Type Carbons.** Valeria Cornette, José C.A. de Oliveira, Deicy Barreras, Mara Davila, Karim Sapag, Raúl López, Universidad Nacional de San Luis-CONICET
- **Capture of CO₂ from Natural Gas by Pressure Swing Adsorption Technology using Zeolite NaUSY as Adsorbent.** Penny Xiao¹, Ranjeet Singh, Gongkui Xiao, David Dahaci Danaci, Gang Li, Jin Shang, Paul Webley, The University of Melbourne
- **On the Justification of the Capillary Condensation and Evaporation Equations of Open-Ended Cylindrical Pores.** Atchatch Wongkoblap¹, Duong Do², Suranaree University of Technology; ²University of Queensland
- **Mathematic Modeling for the Mercury Sorption from Gaseous Stream by Phosphate-based Sorbents Modified with Copper Sulfide.** Carla Camardo, Neuman Resende, Vera Salim, Frederico Tavares, Federal University of Rio de Janeiro
- **CO₂ Capture from High Humidity Flue Gas Streams by Vacuum Swing Adsorption Technology, Using Activated Carbon as Adsorbent.** Dong Xu¹, Gongkui Xiao², Penny Xiao², Jun Zhang², Gong Li², Augustine Niamoah², Paul Webley², Guodian New Energy Technology Research Institute; ²The University of Melbourne
- **Covalet Organic Framework for Methane Adsorption.** Sagar Svetamber, Umprasana Ojha, Balathranigamani Mariyappan, Rajiv Gandhi Institute of Petroleum Technology
- **Separation of CO₂ and CH₄ using a Novel "Molecular Trapdoor" Zeolite.** Materials and Process Study, Jin Shand¹, Gang Li¹, Ranjeet Singh¹, Penny Xiao¹, Zhe Liu², Paul Webley¹, ¹the University of Melbourne; ²Monash University
- **Adsorption Study of Lactose in Hydrophobic Matrix.** Acenini L. Balleiro¹, Rafaela A. Santos¹, Renan Tavares¹, Lislane S. Freitas², Odeisa L. S. Alisna¹, Álvaro S. Lima¹, Cláudia M. F. Soares¹, Tiradentes University, Aracaju; ²Federal University of Sergipe
- **Characterization of Porous Texture of Activated Carbon Fibers by GCMC and α -method.** Masayuki Yoshida¹, Yuko Tateishi¹, Taichi Funahashi¹, Hiromitsu Naono¹, Kazuyuki Nakai¹, Hideki Tanaka², Minoru Miyahara², BEL Japan Inc.; ²Kyoto University
- **On the Use of Volumetric Frequency Response for Determining Mass Transfer Mechanisms in Microporous Adsorbents.** James A. Ritter, M. Iftekhar Hossain, Armin D. Ebner, University of South Carolina
- **Adsorption Sites and Methane Adsorption Equilibrium in MIL-100(Fe).** Daniel Gonçalves, Pedro Silvino, Sébastião Lucena, Universidade Federal do Ceará

- Investigation of Adsorption Mechanisms of Metal-organic Complexes on Sulphonic Acid Ion Exchange Resin. Anat Deepatana, Marjorie Valix², Burapha University; ¹Burapha University; ²Huay-Jung Fan², Takashi Kawakita³, Eiji Furuya¹, Meiji University; Tomohiro Kinoshita¹, Junpei Fukiki¹, Hungkiang University; ²Zenkosha Co. Ltd.
- Equilibrium and Kinetic Adsorption of Reactive Dyes onto Activated Carbon. Anat Deepatana, Thanyathom Sutheekammorn, Runglawan Pimpakan, Burapha University
- Use of Waste Material and Modified Corn Cob (Zea mays) for the Adsorption of Cr3+ from Aqueous Solution. Liliana Giraldo, Juan Carlos Moreno-Prajan², Rafael A. Fonseca², Universidad Nacional de Colombia; ²Universidad de los Andes
- Biomass Sorbents for Metalloid Removal. Linda Ansone, Maris Klavins, University of Latvia
- Batch and Fixed Bed Adsorption of Bovine Serum Albumin on Non-calcined Mg-Al Layered Double Hydroxide. Karina Nogueira, Bruna Cavalcante, José Aguilar, Diana Azevedo, Sebastião Lucena, Ivanildo Silva, Jr., Universidade Federal do Ceará
- Steam Sorption Enhanced Reaction Processes. Stephanie Walspurger, Jan Wilco Dijkstra, Marija Sanci, Wim Haile, Energy Research Centre of Nederland
- Tuning of Pore Sizes of Flexible MIL 53 (Al) MOF to Increase CO₂ Loading. Prashant Mishra, Satyannarayana Edubili, Hari Uppara, Bishnupada Mandal, Sasidhara Gumma, Indian Institute of Technology Guwahati
- Adsorption of CO₂, CH₄, CO, N₂, C₂H₆, C₃H₈, Ar and O₂ on MgDOBDC Metal Organic Framework. MIL-101(Fe), Emanuela Zunkovic, Matiaz Mazaj, Venecsay Kaucu, Natasa Zubukovic Logar, National Institute of Chemistry
- Influence of Different Activation Processes on Hydrogen Sorption Properties of the Large Pore MIL-101(Fe). Emanuela Zunkovic, Matiaz Mazaj, Venecsay Kaucu, Natasa Zubukovic Logar, National Institute of Chemistry
- From Microscopic Dynamics to Mesoscale Transport in Porous Materials: Application to Kerogen in Gas Shale. Alexandru Botan, Roland Pellenq, F J Ulm, Benoit Coasne, Massachusetts Institute of Technology
- The Role of Structure and Commensurability for Capillary Filling and Mass Transport of Liquids in Carbon Nanotubes. Kerstin Falk¹, Laurent Joly², Lydéric Bocquet², Massachusetts Institute of Technology; ²Université de Lyon
- A Novel Equation for Determining Binary Adsorption Isotherms using Concentration Pulse Chromatography: Adsorption of Carbon Dioxide and Nitrogen on Silicalite. Dean A. Kennedy, E. Handan Tezel, University of Ottawa
- Methane Adsorbed in Silt Pores – Low Temperature Mechanism of Adsorption and Phase Diagram. Lucyna Filej¹, Peter Pfeifer², Bogdan Kuchta³, University Montpellier; ³University Aix-Marseille
- Copper Adsorption on Glass Beads Coated With Chitosan: Kinetic Modelling. Marlon de Souza Gama¹, Francisco M. T. Luna¹, Juliana Q. Albarelli², Marisa M. Beppu², Rodrigo S. Vieira¹, Universidade Federal do Ceará; ²Universidade Estadual de Campinas
- DNA Adsorption Molecules on Modified Clay Surface. Adan Quiroga-Almaguer¹, Patricia Ponce-Noyola¹, Heriberto Pfeiffer-Pereira², Gustavo Rangel-Pontas¹, University of Guanajuato; ²Universidad Nacional Autónoma de Mexico
- Simplified Measurement Technique of Micro Pore Volume within Synthetic Resin Particles. Tomohiro Kinoshita, Junpei Fukiki¹, Huan-Jung Fan², Takashi Kawakita³, Eiji Furuya¹, Meiji University; ²Hungkiang University; ²Zenkosha Co. Ltd.
- Metal-organic Framework-metal Oxide Nanoparticle Composites for Toxic Gas Adsorption. Katrina Stults, Krista Walton, Georgia Institute of Technology
- Evaluation of Cu2+ and Ni2+ Ions Removal using Sugar Cane Bagasse Fly Ash. Jean Manuel Rodriguez Diaz¹, Valdinei Lins da Silva¹, Mauris Gurgel Carlos da Silva², Federal University of Pernambuco; ²University of Campinas
- Textural Characterization of Ordered Mesoporous Silica Materials with Cylindrical Pores from N₂ Adsorption Isotherms at 77 K using Grand Canonical Monte Carlo Simulation. Jhony Villarroel-Rocha, Raúl Lopez, Karim Sapag, Universidad Nacional de San Luis
- Theoretical Study of Environmental Contaminant Chlordecone and B-HCH Adsorption onto Bagasse Activated Carbons. Carlos Enriquez-Victorero¹, Axelle Duimel², Daniel Hernández-Yáñez¹, Roger Gadou³, Ulises Jauregui-Haza¹, Saïrra Gaspard², INSTEC; ³Université des Antilles et de la Guyane; ¹SG2M
- Activated Carbon Supported Vitamin B12 as Hybrid Material Chlordecone and Hexachlorocyclohexane for Simultaneous Adsorption and Degradation. Ronald Ranguin, Mohamed Chaker Neibi, Thierry Cesaire, Saïrra Gaspard, Université des Antilles et de la Guyane
- Carbons Prepared from Sugarcane Bagasse. Laetitia Maisonneuve, Saïrra Gaspard, Université des Antilles et de la Guyane
- Analysis of Alkane Adsorption on 13X Zeolite through the Gaussian Adsorption Model. Salam Taiji, Dana Abouelnasr², Kevin Louglin¹, American University of Sharjah; ²California State University
- A Simple Equation of State Based in Ideal Constants of Adsorption. Manuel Velasquez
- Application of Magnetic Nanoparticles Obtained by a New Synthesis Route as Adsorbent of 99Mo in Batch Technique and with Fixed Bed Column. Heber Holland, Mitiko Yamaura, Nuclear and Energy Research Institute - IPEN
- The Immobilization of Proteins on Carbon Nanofibers Composites for Electrocatalytic Oxidation of Hydrogen. Helena Marques-Knöpfel, Joseph Denizer, Anne De Pouliquet², Alexandre Ciaccafava², Elisabeth Loijou², Roger Gadou¹, LCR-CNRS, BiP-UMR-CNRS
- A Sensitivity Analysis of Parameters Affecting on Heat and Mass Transfer in Adsorbent Bed of Adsorption Heat Pump. Gamze Gediz Ilis¹, Moghada Mobeidi¹, Hasan Demir², Semra Ulku¹, Izmir Institute of Technology; ²Osmanye Korkut Ata University
- Proposing a New Adsorption Isotherm Known as Adejo-Ekwuchi Isotherm. Sylvester O Adejo¹, Martha Ekwuchi¹, Enye State State University; ²University of Jos
- Hydrogen Adsorption in MIL-53(Al) Metal-organic Framework Under Low-pressure, Cryogenic Conditions. José P. B. Mota¹, Isabel Catartino², Gregoire Bonait¹, Requiem(CQFB - FC17/UNL; ²Cefitec - FCT/UNL
- Encapsulation of DNA Nucleobases in Carbon Nanotubes: Free-energies. Fernando J.A.L. Cruz¹, José P. B. Mota¹, Juan J. de Pablo², ¹Universidade Nova de Lisboa; ²University of Chicago

- Endohedral Confinement of a DNA Dodecamer onto Pristine Carbon Nanotubes and the Stability of the Canonical B Form. Fernando J.A.L. Cruz, José P.B. Mota, Juan J. de Pablo², Universidade Nova de Lisboa; ²University of Chicago
- The Adsorption Properties of Organic Sulfur Compound on the Zeolite-based Sorbents Impregnated with Rare-earth Metals. Suk Yong Jung, Jung Mo Moon, Soo Chool Lee, Jae Chang Kim, Kyungpook National University
- Detection of Hg, Cd, and Pb Ions in Water by PAA/CNTs Nanosensor. Mohamed Shaban, Amin Hussein, Favez Shahini, Beni-Suef University
- Fabrication of New Solid State Phosphate Selective Electrodes for Environmental Monitoring. Martin Enemchukwu, Fikru Tafesse, Department of Chemistry University of South Africa
- Effects of Alumina Phases on CO₂ Capture and Regeneration Properties of Potassium-based Alumina Sorbents. Soo Chool Lee, Min Sun Cho, Suk Yong Jung, Jae Chang Kim, Kyungpook National University
- Ab initio Modeling of the Hydrogen Adsorption on Pt(111) Surface. Tran Thi Thu Hanh, Yoshinari Takimoto, Osamu Sugino, The University of Tokyo
- Cadmium (II) Ion Removal from Aqueous Solution using a Low Cost Chemically Activated Carbon from Agricultural Waste Material: Characterisation, Isotherm and Kinetic Modelling. Edizioni Asuquo, Alastair Martin, University of Manchester
- Development of Adsorbent Hollow Fibres for Environmental Applications. Chin-Chih Tai, Yun-Hsin Wang, Technology Research Institute
- Bismuth Adsorption by Activated Carbon Fibers. Ekaterina Saklakova, Olga Astashkina, Alexander Lisenko, St. Petersburg State University of Technology and Design
- NIST Infrastructure for Cataloging and Curating Adsorbent Materials, Data, and Properties. Daniel Siderius, Laura Espinal, Russell Johnson, Roger van Zee, National Institute of Standards and Technology
- Capacity Assessment and Potential for Reuse of Calcined Bøfe Bentontitic Clay for Adsorption of Nickel. Melissa Vieira¹, Ambrosio Neto¹, Marcelino Gimenes², Meuris Silva¹, UNICAMP; ²JEM
- Characterization of the Complex Metal-clay Obtained in the Process of Cadmium and Lead Adsorption. Melissa Vieira¹, Ambrosio Neto¹, Marcelino Gimenes², Meuris Silva¹, UNICAMP; ²JEM
- Biosorption of Acid Dye from Textile Industry Wastewaters onto Macrophyte *Salvinia cucullata*. Bruno Tosi Pelosi¹, Lívia Kátia dos Santos Lima¹, Bruno Tosi Vieira¹, UNICAMP; ²UERM
- Cr3+ Biosorption by Aquatic Macrophyte *Salvinia Natans*. Lívia Kátia dos Santos Lima¹, Bruno Tosi Pelosi¹, Marcelino Gimenes², Meuris Gurgel Carlos da Silva¹, Melissa Gurgel Adeodato Vieira¹, UNICAMP; ²UERM
- Framework Flexibility of ZIF-8 as Evidenced by Adsorption of C3 and C4 Hydrocarbons at Ambient Temperature. Chen Zhang¹, Ryan Lively², Ke Zhang¹, Justin Johnson¹, Oguz Karvan¹, William Koros¹, Georgia Tech; Agenor Biofuels
- Removal of Bromate from Water using De-Acidite FF-IP Resin and Determination by Ultra-performance Liquid Chromatography-tandem Mass Spectrometry. Zeid Al Othman, Mu Naushad, M.R. Khan, S.M. Wabaidur, King Saud University
- Modelling and Optimization of Hybrid PSA/Membrane Processes. Dragana Nikolic, Eustathios Kikkindes, University of Western Macedonia
- Effect of Vanadium Guest Phase on Textural Properties of V-SBA-15 Catalysts. Roman Bulánek¹, Pavel Čiřmanec¹, Michal Šenčík¹, Eva Koudeleková¹, Vesa-Fekka Lehto², Joakim RiiKKonen², Nikola Djenčev¹, University of Pardubice; ²University of Eastern Finland
- Adsorption Studies of Aminosilica AdSORBents for CO₂ Capture. Stephanie Didás, Rongshun Zhu, Nicholas Brunelli, David Snoll, Christopher Jones, Georgia Institute of Technology
- Adsorption of Toluene into Commercial Organoclay in Liquid Phase: Kinetic and Equilibrium Study. Sara Stoief¹, Ambrósio Almeida Neto¹, Marcelino Gimenes², Onélia Santos², Melissa Vieira¹, University of Campinas; ²University of Mainga
- Shale Gas – Estimating the Capacity of Non-conventional Natural Gas Reservoirs by Highest Pressure Adsorption Measurements. Frieder Dreisbach, Rubotherm
- Removal of Xe and Kr from Air Using Metal-Organic Frameworks. Jian Liu, Praveen Thallapally, Carlos Fernandez, Denis Strachan, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA, USA
- Kinetic Model for the Immobilized Biosorbents: Uptake of Cationic Dye. Nityanand Singh Maurya¹, Atul Kumar Mittal², NITT Patna; ²Indian Institute of Technology, Delhi
- A Sensitivity Analysis of Parameters Affecting on Heat and Mass Transfer in Adsorbent Bed of Adsorption Heat Pump. Gamze Gediz Ilis¹, Moghadas Mobedi¹, Hasan Demir², Semra Ülkü¹, Izmir Institute of Technology; ²Osmancıye Korkut Ata University
- Effects of Temperature on Water Adsorption on ACFS. Toshihide Horikawa¹, Masanori Takenouchi¹, Takahiro Muguruma¹, D. D. Do², Ken-Ichiro Sotowa¹, The University of Tokushima; ²The University of Queensland
- Supercritical Carbon Dioxide Adsorption on Norway Spruce Wood. Isabel A.A.C. Esteves¹, Andriy Lyubchik¹, João Fernandes¹, José P.B. Mota¹, FCCT/JNLI; Hampen Træforarbejdning
- Surface Functionalization of Mesoporous Sorbents for CO₂ Capture. Erik Rupp, Reza Taghipanah, J. Brannon Gary, John To, Daniel Stack, Zhenan Bao, Jennifer Wilcox, Jialun He, Stanford University
- Adsorption Study of Lactose in Hydrophobic Matrix. Acenlli Lima Balleiro, Rafaela de Almeida Santos, Renan Tavares, Lisiâne Santos Freitas, Odete Leonor Sanchez de Alcina, Álvaro Silva Lima, Cléide Mara Faria Soares, Universidade Tiradentes
- Electrically Conductive Zeolite-Carbon Composite Sorbents for CO₂ Capture. Maha Alsayedeh, Klaus Hellgardt, Imperial College London
- Pilot-Scale Study of Ventilation Air Methane Recovery by Pressure Swing Adsorption. Yingshu Liu, Chuanzhao Zhang, Yu Meng, Yongling Li, Xiong Yang, University of Science and Technology Beijing
- Analysis of an Adsorption/Desorption Cycle used as a Concentrator for the Catalytic Incineration of VOCs. María Agustina Campesi, Guillermo Fernando Barreto, Osvaldo Miguel Martínez, Facultad de Ingeniería
- An Improved Vacuum Pressure-Swing Adsorption Cycle for Upgrading Ventilation Air Methane. Chuanzhao Zhang, Yingshu Liu, Yongling Li, Xiong Yang, Yu Meng, University of Science and Technology

- **Gas Adsorption and GCMC Simulations to Study Structural Flexibility in Metal-Organic Frameworks.** David Fairén-Jiménez, Chemical Engineering & Biotechnology
- **NIST Facility for Adsorbent Characterization and Testing.** Laura Espinal¹, Carlos Gonzalez¹, Martin Green¹, Roger van Zee¹, Dane Boyesen², NIST, Gaithersburg, MD, USA; ²ARPA-E, USA
- **Preliminary Findings in a Pilot Inter-laboratory Comparison of High Pressure Gas Sorption Data.** Laura Espinal¹, Daniel Siderius¹, Russell Johnson III¹, Peter Soutou², Cameron Keiper², Philip Panella³, NIST¹; University of Sydney²; NREL³
- **Stratospheric Particle Injection for Climate Engineering: Adsorption and Reaction Studies.** Layla Rkiouak¹, James McGregor², Markus Kalberer¹, Francis Pope³, R. A. Cox¹, University of Cambridge¹; University of Sheffield²; University of Birmingham³
- **Structure-Property Relationships of Metal-Organic Frameworks for CO₂ Separation and Capture.** Youn-Sang Bae¹, Christopher E. Wimer², Min Bum Kim¹, Randall Q. Snurr², Yonsei University¹; Northwestern University²
- **Olefin/Paraffin Separations Using Metal-Organic Frameworks.** Youn-Sang Bae¹, Chang-Yeon Lee², Ki-Chul Kim², Seung-Jun Lee¹, Joseph T. Hupp², SonBinh T. Nguyen¹, Randall Q. Snurr², Yonsei University¹; Northwestern University²
- **Metal-Organic Framework with Optimal Adsorption Thermodynamics and Kinetics for CO₂ Separations.** Youssef Belmabkhout, Mohamed Eddaoudi, KAUST
- **Wetting Layer Absorption using Amines for Carbon Capture.** Thomas W. S. Yip, Ashleigh J. Fletcher, Siddharth V. Patwardhan, Martin B. Sweatman, University of Strathclyde
- **Amidoxime Functionalized Carbon Fibers for Uranium Recovery from Seawater.** Joanna Gorka, Richard T. Mayes, Sheng Dai, Oak Ridge National Laboratory
- **Combined Experimental and Molecular Modeling of Structure and Gas Transport in Porous Carbon-based Systems.** Erik Rupp, Mannaz Firouzi, Jennifer Wilcox, Stanford University
- **Behaviors of Activated Carbons with Various Surface Functional Groups for Chlorobenzene Adsorption.** Yuran Li, Yangyang Guo, Tingyu Zhu, Wen Liu, Chinese Academy of Sciences
- **Synthesis and Nanostructures of Ruthenium/Graphene Composites.** K.P Annamalai, Yousheng Tao, Chinese Academy of Sciences
- **Controlled Assembly of Titanate Nanotubes and Reduced-Graphene Oxides (r-GO) to Transparent Hybrid Films via Layer-by-Layer Fabrication towards Enhanced Photocatalytic Activity.** Jianbo Liang, Zheng-Ming Wang, AIST
- **Synthesis and Characterization of Fe-Doped Ti-MCM-41.** Bao-Wan Lu, Zheng-Ming Wang, Takahiro Hirotsu, AIST
- **Effects of Chitosan as a Copper Ion Adsorbent in Presence of Amyloid-β Protein or Equivalent.** Cynthia Regina Albrecht Mahi, Rodrigo Balloni Rabelo, Marisa Masumi Beppu, University of Campinas
- **Preparation and Characterization of Nanoporous Carbon-Supported Transition Metal Sulfide Nanoparticles.** Xiaoshuang Zheng, Jianping Gao, Yousheng Tao, Chinese Academy of Sciences
- **Physical and Chemical Adsorption for the Characterization of Metal-Organic Framework Materials.** Katie Cychoz, Quantachrome Instruments, Boynton Beach, FL, USA
- **Matthias Thommes, Quantachrome Instruments, Boynton Beach, FL, USA**

関連学会のお知らせ

日本膜学会第35年会

会期：2013年5月20日～21日

開催場所：早稲田大学西早稲田キャンパス63号館

特別講演：「ガス分離膜実用化へのアプローチ—分離性を上げる？透過性を上げる？」

産業技術総合研究所 原谷 賢治

特別企画：生体膜と人工膜の研究融合のための相互理解にむけて」

人工膜シンポジウム1 「膜による水処理技術を展望するIV」

人工膜シンポジウム2 「無機膜が拓く新しいプロセス技術の展望I」

他、発表多数。

URL : <http://maku-jp.org/>

組織委員長：広島大学 高野 幹久

第24回キャタリシススクール

主催：一般社団法人触媒学会

共催(予定、順不同)：島津製作所、スペクトリス・マルバーン、日本電子、日本分光、日本ベル、日立ハイテクノロジーズ、ヘンミ計算尺、マイクロメリティックスジャパン、リガク

協賛(予定、順不同)：日本化学会、化学工学会、高分子学会、色材協会、石油学会、電気化学会、日本イオン交換学会、日本エネルギー学会、自動車技術会、日本機械学会、日本吸着学会、日本表面科学会、日本膜学会、有機合成化学協会、粉体工学会、ゼオライト学会

会期：平成25年6月17日（月）～21日（金）

会場：スクーリングは東京大学（本郷キャンパス）山上会館

参加申込締切：5月17日（金）、定員（50名）になり次第

6月17日（月）

- | | |
|-------------|------------------|
| 1. 触媒反応とは何か | (東 工 大) 和田 雄二 先生 |
| 2. 触媒調製I | (千 葉 大) 佐藤 智司 先生 |
| 3. 触媒調製II | (横 国 大) 窪田 好浩 先生 |
| 4. 吸着と反応速度 | (東 北 大) 富重 圭一 先生 |

6月18日（火）

- | | |
|-----------|------------------|
| 1. 触媒反応工学 | (静 岡 大) 福原 長寿 先生 |
|-----------|------------------|

2. キャラクタリゼーション：担持金属触媒 (産 総 研) 白井 誠之 先生
3. キャラクタリゼーション：固体酸・塩基触媒 (東 工 大) 小松 隆之 先生
4. 酸化触媒 (東 工 大) 山中 一郎 先生

6月19日（水）

キャラクタリゼーション実習（共催分析機器メーカーにおける実習）

6月20日（木）

触媒研究室一日体験（大学の研究室における実習）

6月21日（金）

1. 工業触媒Ⅰ：不均一系触媒 (コスモ石油) 藤川 貴志 先生
2. 工業触媒Ⅱ：均一系触媒 (三菱化学) 高橋 和成 先生
3. 実用触媒の開発 (東京農工大) 山松 節男 先生
4. 環境触媒と劣化 (成蹊大) 里川 重夫 先生

卒業式・卒業証書授与

参 加 費：80,000円（主催／協賛学会員）、100,000円（一般）、テキスト販売10,000円

申込方法：触媒学会HPより申込書をダウンロードし、下記へメール又はFAXにてお送りください。

問合せ・申込先：菊地隆司（第24回キャラクタリゼーションスクール運営委員長）

FAX: 03-5841-1167、E-mail : rkikuchi@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

〒113-8656 文京区本郷 7-3-1 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻

維持会員一覧

維持会員として、以下の企業各社にご協力を頂いております。

(平成25年4月現在、50音順)

(株)アドール	(株)エア・ウォーター総合開発研究所
大阪ガス(株)	大阪ガスケミカル(株)
オルガノ(株)	カルゴン カーボン ジャパン(株)
(株)キャタラー	協和化学工業(株)
クラレケミカル(株)	栗田工業(株)
興研(株)	株重松製作所
システムエンジニアリング(株)	水ing(株)
スペクトリス(株)マルバーン事業部	(株)西部技研
大陽日酸(株)	谷口商会(株)
千代田化工建設(株)	月島環境エンジニアリング(株)
帝人ファーマ(株)	東京ガス(株)
東ソー(株)	東洋紡績(株)
日本エンバイロケミカルズ(株)	日本たばこ産業(株)
日本ベル(株)	富士シリシア化学(株)
フタムラ化学(株)	マイクロメリティックスジャパン合同会社
三菱重工業(株)	三菱樹脂(株)
ミドリ安全(株)	ユニオン昭和(株)
ローム・アンド・ハース・ジャパン(株)	

編集委員

委員長 黒田 泰重（岡山大学）

委員 遠藤 明（産業技術総合研究所） 田中 秀樹（京都大学）

大久保貴広（岡山大学）

宮部 寛志（立教大学）

神田 英輝（名古屋大学）

三輪 聰志（栗田工業株式会社）

清田 佳美（東洋大学）

向井 紳（北海道大学）

（五十音順）

Adsorption News Vol. 27 No. 1 (2013) 通巻 No. 104 2013年4月25日発行

事務局 〒920-1192 金沢市角間町 金沢大学理工研究域 機械工学系 内

Tel : 076-264-6472 Fax : 076-264-6496 E-mail: jsad@se.kanazawa-u.ac.jp

編集 大久保 貴広（岡山大学）

Tel & Fax : 086-251-7843 E-mail : ohkubo@okayama-u.ac.jp

ホームページ <http://www.j-ad.org/>

印刷 〒700-0942 岡山市南区豊成3-18-7 広和印刷株式会社

Tel : 086-264-5888 Fax : 086-262-1525

General Secretary

THE JAPAN SOCIETY ON ADSORPTION (JSAd)

School of Mechanical Engineering, College of Science and Engineering,

Kanazawa University

Kakuma-machi, Kanazawa, Ishikawa 920-1192, JAPAN

Tel : +81-76-264-6472 Fax : +81-76-264-6496

E-mail : jsad@se.kanazawa-u.ac.jp

Editorial Chairman

Professor Yasuhige KURODA

Faculty of Science, Okayama University, 3-1-1 Tsushima-naka, Kita-ku,

Okayama 700-8530 JAPAN

Tel & Fax : +81-86-251-7844 E-mail : kuroda@okayama-u.ac.jp

Editor

Takahiro OHKUBO, Okayama University

Tel & Fax : +81-86-251-7843 E-mail : ohkubo@okayama-u.ac.jp

WWW of JSAd: <http://www.j-ad.org/>