

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【窒素吸着】

1B 21

BJH 法以外の細孔径分布解析法として、どのようなものがありますか？

作成日： 2019 年 2 月 4 日

担当者： 中村 元海

現在、細孔分布の解析は孔の大きさによって使い分けられている。IUPAC による定義では、細孔はマクロ孔(50 nm<)、メソ孔(2~50 nm)、ミクロ孔(<2 nm)に分けられる。ミクロ孔はさらにスーパーミクロ孔(2~0.7 nm)、ウルトラミクロ孔(<0.7 nm)に分けられる。BJH 法ではメソ孔領域の細孔を解析することができる。以下、各細孔における細孔分布解析法を羅列していく。

- ・マクロ孔

水銀圧入法

- ・メソ孔

BJH 法 DH 法 CI 法

- ・ミクロ孔

MP 法 HK 法 SF 法

- ・メソ孔～ミクロ孔

NLDFT

各細孔解析法の詳細な情報に関しては他 TIPS を参照されたい。

BJH 以外で、メソ孔領域の解析に用いられる解析方法に DH 法と CI 法がある。BJH 法を含むこれらの方法は、どれもシリンダー型の細孔を想定し、Kelvin 式に基づいて算出している。それぞれの方法の違いは吸着層の厚み t にどのような式を採用しているかにすぎない。ちなみに IUPAC が推奨している方法は BJH 法である。

ミクロ孔を解析する方法には MP 法、HK 法、SF 法がある。MP 法は吸着層厚み t に着目した方法である。相対圧と吸着層厚みにはいくつかの関係式が実験的に導出されているため、それを利用し吸着等温線を書き直したものが t -プロットと呼ばれる。この t -プロットの傾きから細孔分布を求めるものが MP 法である。しかし、この方法ではウルトラミクロ孔の解析が出来ない。HK 法、SF 法であればウルトラミクロ孔の解析が可能である。HK 法 SF 法は Lennard-Jones 関数を用いて、言い換えれば、吸着分子同士の相互作用や吸着分子と細孔壁原子の相互作用の計算から細孔径分布を求める方法である。HK 法ではスリット状の細孔を、SF 法ではシリンダー型の細孔を想定している。

これらの方法では、メソ孔およびミクロ孔の領域にまたがる解析が出来ない。そこで、近年研究が盛んになっているのが NLDFT である。この方法はシミュレーションにより、吸着等温線のフィッティングを行う方法で、従来の方法では解析の難しい 2 nm 近傍の解析が可能である。しかし、吸着等温線のモデルが未知の材料に適用することが難しいという難点もある。

参考

http://www.mono.titech.ac.jp/file/autosorb_seminar.pdf

https://www.sigmaaldrich.com/content/dam/sigma-aldrich/docs/SAJ/Brochure/1/saj1346_mmb5.pdf

http://carbon.cm.kyushu-u.ac.jp/handout/emef/2011_7.pdf

<http://www.jsac.or.jp/bunseki/pdf/bunseki2009/200907kaisetsu.pdf>