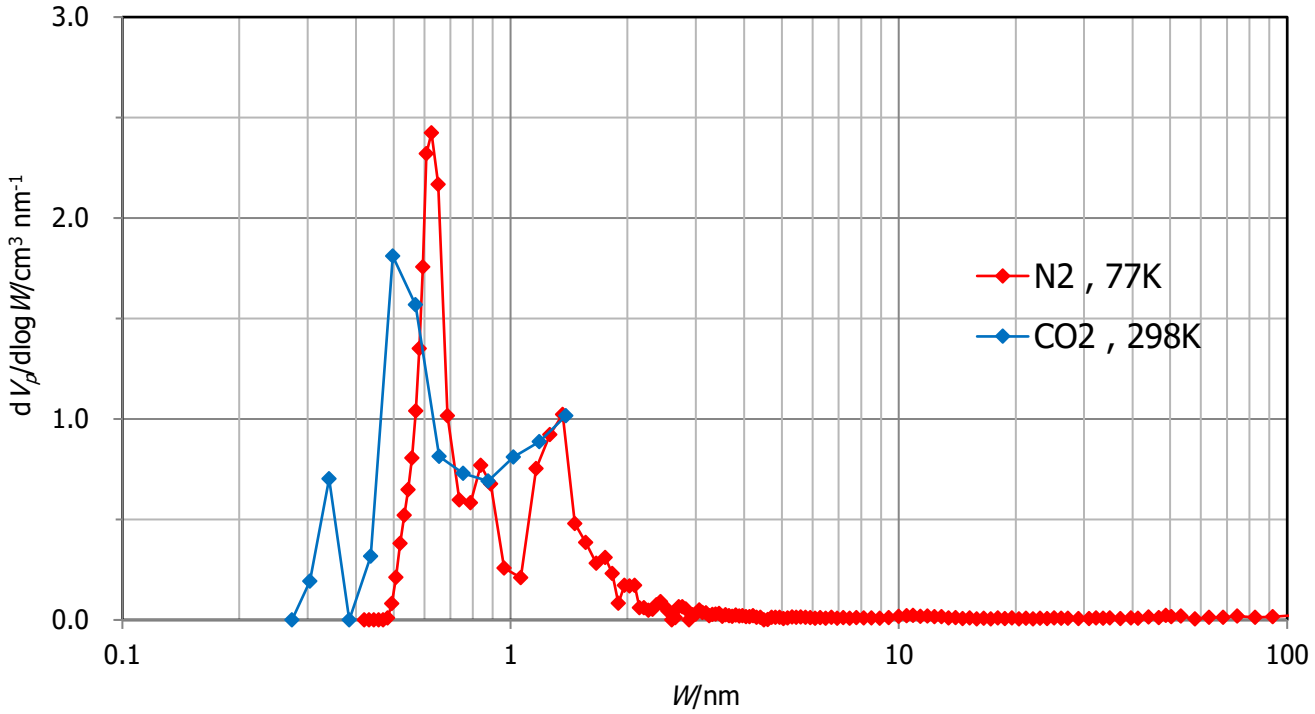
◆細孔分布解析（NLDFT法、GCMC法）

【概要】

電池材料やCO_2回収・貯留（CCS）分野において、マイクロ孔解析が注目されている。従来のガス吸着測定による解析手法では、細孔径の範囲により解析方法が異なっていたが、近年、NLDFT法、GCMC法といったシミュレーション解析が行われるようになり、全範囲を単一理論で表すことが可能になった。

【測定事例】活性炭の細孔分布解析



細孔分布解析（GCMC法）

活性炭をN_2吸着(吸着温度77K)及びCO_2吸着(吸着温度298K)で測定し、GCMC法で解析を行った。CO_2吸着測定では0.35nm付近のウルトラマイクロ孔に分類されるピークが確認された。この測定では、298Kと比較的高温での測定となるため、吸着ガス分子の拡散速度が上がることで、より小さな細孔まで入りやすくなっていると考えられる。

NLDFT, Non Localized Density Functional Theory
GCMC, Grand Canonical Monte Carlo method

株式会社MCエバテック
分析事業部 営業部 ：06-6416-5200 FAX: 06-6416-5311
お問い合わせ https://www.mcet.co.jp/contact/analysis/