

炭素細孔内に吸着したアセトンと2-プロパノールの熱量法による研究

(東京電機大理工) ○ 延澤聡美・塚田昇太郎・伊藤正彦・類家正稔

【緒言】ナノ空間内における分子はバルクとは異なる振舞いをする事が近年の様々な研究により明らかになりつつある。我々はこれまでに炭素細孔内へのアルコール分子の吸着メカニズムについて実験とシミュレーションにより検討を行ってきた¹⁾。細孔径 0.8 nm の細孔内に吸着した 1-propanol と 2-propanol の集団構造に着目すると、1-propanol では二層構造が形成されるが、2-propanol ではプロピル基の立体障害のため明確な二層構造を示せないことが明らかになった。今回、官能基が吸着メカニズムや集団構造に与える影響について検討するため、acetone と 2-propanol の吸着実験およびシミュレーションを行った。

【実験】多孔性固体として、細孔径 1.3 nm の活性炭素繊維 (ACF, A20, (株) 大阪ガスケミカル) を用いた。吸着実験に際し、前処理として真空加熱 (383 K, 2 h, < 1 mPa) を行った。吸着等温線・吸着熱測定には、双子型伝導熱量計 (MMC-5111, (株) 東京理工) を接続した容量法吸着測定装置を使用し、298 K で吸着等温線・吸着熱の同時測定を行った。

【シミュレーション】acetone および 2-propanol には Tra-PPE モデルを用いた。ACF のモデルとしてスリット型炭素細孔を仮定し、Steele potential の重ね合わせで細孔内ポテンシャルを表現した。表面にカルボニル基のクラスターを導入した細孔モデルでもシミュレーションも行った。

【結果および考察】シミュレーションにより得られた吸着等温線を Fig.1 に示した。実験で得られた吸着等温線同様、I 型の等温線が得られた。等温線の低相対圧領域に着目すると acetone よりも 2-propanol のほうが吸着量が大きくなった。また、シミュレーションで得られた微分吸着熱の吸着量依存性を Fig.2 に示した。初期の微分吸着熱は表面官能基と吸着質分子の相互作用のため、acetone, 2-propanol 共にそれぞれの凝縮熱よりも大きな値を示したが、acetone よりも 2-propanol のほうが吸着熱はなだらかに減少した。吸着熱をそれぞれの相互作用の寄与に分けた結果、2-propanol では表面官能基を核に水素結合により吸着が進行していくことが示唆された。

【参考文献】1) S.Nobusawa *et al.* *Colloid and Surface A*, 2012, **419**, 100

Microcalorimetric study of acetone and 2-propanol adsorption in micropores of activated carbon fiber
S.NOBUAWA, S.TSUKADA, M.ITO, M.RUIKE

(Tokyo Denki Univ. ru.i.ke@mail.dendai.ac.jp)

Adsorption isotherms and heats of adsorption for acetone and 2-propanol on activated carbon fiber whose pore width is 1.3 nm were measured and simulated by a GCMC method using the slit-shaped pore. Heats of adsorption for both adsorbates were larger than the heat of condensation for each adsorbates. In the initial stage of adsorption, heats of adsorption for 2-propanol decreased more gradually with an increase in the adsorbed amount than that for acetone. This indicates the difference in the adsorption mechanism for two adsorbates having different functional groups.

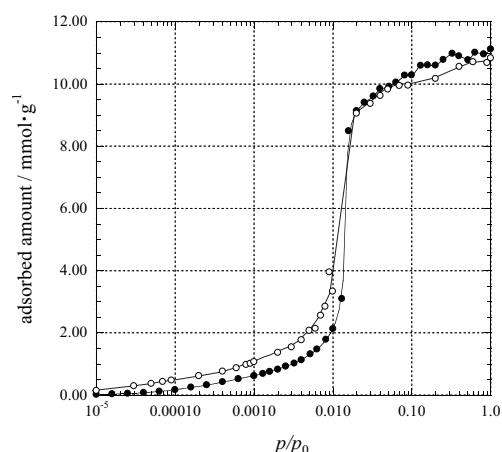


Fig. 1: Simulated adsorption isotherms for acetone and 2-propanol into the slit-shaped pore with surface functional groups at 298 K. ●: acetone, ○: 2-propanol.

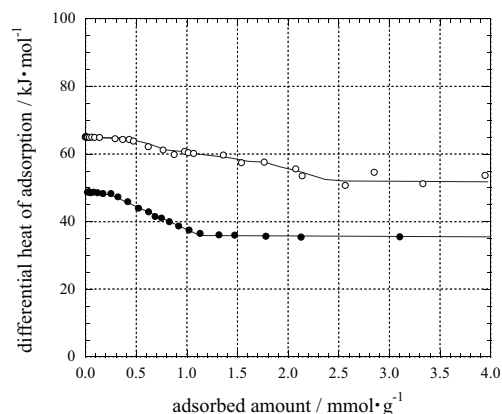


Fig. 2: Simulated heats of adsorption for acetone and 2-propanol into the slit-shaped pore with surface functional groups against adsorbed amount at 298 K. ●: acetone, ○: 2-propanol.