

GCMC シミュレーションによるスリット型炭素細孔への低級アルコール吸着に関する研究

(東京電機大理工) ○ 佐藤 和輝・延澤 聡美・類家 正稔

【緒言】我々はナノメートル程度の細孔内に吸着したアルコール分子の充填構造に関する知見を得るために、実験及び分子シミュレーションによる検討を行ってきた。今回は、温度変化による吸着構造への影響について検討するために、273 K から 398 K におけるスリット型炭素細孔へのメタノール、エタノール、1-プロパノール、2-プロパノールの吸着シミュレーションを行った結果を報告する。

【シミュレーション】細孔径が 0.8 nm のスリット型の細孔モデルを用い、分子のモデルには OPLS モデル¹⁾ を使用し、さらに分子内回転を考慮した。吸着質間ポテンシャルの計算には Lennard-Jones 12-6 ポテンシャルと Coulomb ポテンシャルの和を用い、細孔内ポテンシャルの計算には Steele 10-4-3 ポテンシャルを用いた。また分子内の捻じれに起因するトーションポテンシャルも考慮した。メタノールとエタノール及び1-プロパノールの飽和蒸気圧の計算には Wagner 式を用い、2-プロパノールの飽和蒸気圧の計算には Antoine 式を用いた。

【結果および考察】298 K における吸着等温線では全ての吸着質で吸着量のジャンプが確認された。そこで、298 K における吸着等温線と吸着量のジャンプが見られなくなった温度における吸着等温線を Fig.1 に示した。273 K から 25 K 毎に行ったシミュレーションではエタノールと1-プロパノール、2-プロパノールの吸着等温線においてそれぞれ 373 K, 398 K, 398 K 以上の温度では吸着量のジャンプが現れなかったため、0.8 nm のスリット型炭素細孔内における臨界温度 T_{cp} がメタノールは 373 K (± 25 K), 1-プロパノールと 2-プロパノールは 398 K (± 25 K) であると考えられる。Fig.2 に吸着量のジャンプ直前と直後におけるエタノールの酸素原子の動径分布関数を示した。298 K と 373 K 共に吸着量に関係なく第一近接のピークは 0.28 nm 付近に現れ、そのピークは 298 K の場合によりはっきりと現れた。また、298 K では吸着量のジャンプ直前の点から 0.5 nm の辺りに緩やかな第二近接のピークが現れるが、373 K ではほとんど現れないことから高温に比べ低温における構造化が顕著であることを確認した。

【参考文献】1) William L. Jorgensen *et al.* *J. Phys. Chem.*, 90(1986), 1267-1284

Grand Canonical Monte Carlo study of alcohol adsorption in carbon slit pores.

K.SATO, S.NOBUSAWA, M.RUIKE

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

GCMC simulation was applied to the adsorption of methanol, ethanol and propanol onto carbon slit pores over a temperature range 273-398 K to investigate the effect of temperature on the configuration and the mechanism for the adsorption of lower alcohols in the confined space. There is a discontinuous transition in the amount adsorbed that decreases in magnitude as temperature is increased and eventually disappears at the pore critical temperature, T_{cp} . Values of T_{cp} for ethanol, 1-propanol and 2-propanol for a pore width of 0.8 nm were estimated at 373 K (± 25 K), 398 K (± 25 K) and 398 K (± 25 K), respectively.

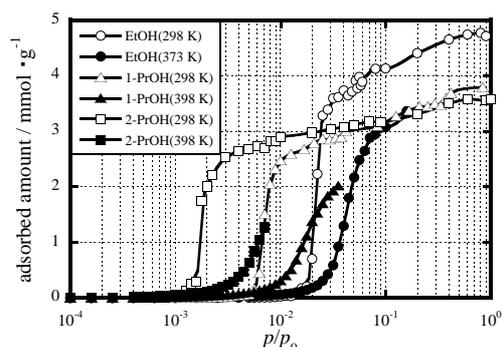


Fig. 1: Simulated adsorption isotherms for alcohols into the slit pore at 298 K and T_{cp} .

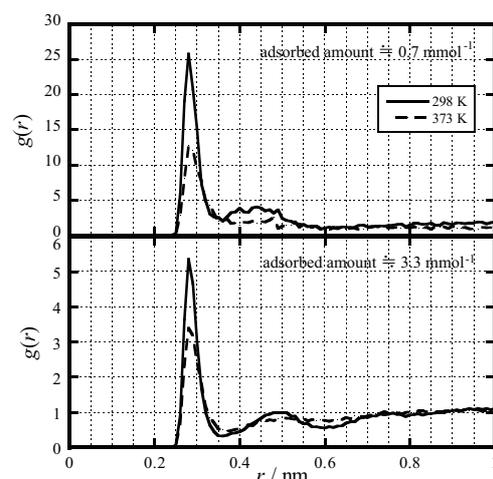


Fig. 2: Radial distribution functions between O sites of ethanol adsorbed in 0.8 nm slit pore at 298 K and $T_{cp} = 373$ K.