

長崎大学第3期中期目標・中期計画重点研究課題「次世代エネルギー関連技術に向けた革新的物質科学研究拠点」第17回講演会

第716回 化学・物質工学セミナー

この度、長崎大学第3期中期目標・中期計画重点研究課題の第17回講演会を第716回化学・物質工学セミナーも兼ねて企画致しました。万障お繰り合わせの上、ご参加下さい。

記

日時：令和2年3月9日（月） 14：30～16：00

場所：長崎大学文教キャンパス 総合教育研究棟 2F 207 番講義室

講演：計算科学的手法を援用した多孔性固体のモデル化と吸着特性評価

講師：信州大学 先鋭領域融合研究群 先鋭材料研究所 教授
田中 秀樹 博士

概要：セミナー前半では、吸着等温線を用いた多孔性固体の細孔径分布解析の理論と実際についてお話しします。具体的には、密度汎関数(NLDFT)法やグランドカノニカルモンテカルロ(GCMC)法を援用した従来の解析手法(BET法、Horvath-Kawazoe法、Dollimore-Heal法、Broekhoff-de Bore法など)の理解、および、NLDFT法、GCMC法、QSDFT法によって得られる理論吸着等温線群(kernel)のフィッティングに基づく細孔径分布解析手法の実際についてお話しします。セミナー後半では、以下の最近の研究例を紹介します。「メタン貯蔵材料開発を指向したゼオライト鑄型炭素(ZTC)合成の分子シミュレーション」－ 種々のゼオライトを鑄型として得られるZTC合成の反応分子動力学シミュレーションを行い、新規ZTCを探索すると同時に、GCMC法によって、それらのメタン貯蔵材料としての応用可能性について検討。「分子篩炭素(CMS)合成の分子シミュレーションとその空気分離特性評価」－ 反応分子動力学法を用いた活性炭表面への炭素被膜形成シミュレーションを行い、得られたCMSモデルの酸素・窒素分子吸着の速度定数を推算することで、その空気分離特性を評価。「金属有機構造体(MOF)の水同位体分子認識」－ MOFの一種である $[\text{Ca}(\text{C}_4\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})]_n$ (Ca錯体)の水同位体吸着実験(吸着等温線・in situ X線粉末回折測定)およびab initio分子動力学シミュレーションを用いた計算科学的検討を行い、Ca錯体が水同位体の分子認識能を有することを見出した。

講演会世話人
工学研究科物質科学部門
瓜田 幸幾 (2668)