

電容活性碳微孔/中孔比例分析測定

廖彥舜*，陳怡惠，陳勁中

台灣中油股份有限公司煉製研究所 079146@cpc.com.tw

摘要

台灣中油利用生產的石油瀝青活化成活性碳材，藉由改質導入超高電容器中，以提升其附加價值。碳材結構之微孔提供高表面積儲存電荷，中孔則是提供通道使電解質離子能進行快速充放電，不同的活性碳材會根據其所含微孔、中孔比例表現出不同的電容性能。氣體物理吸附分析方法常作為固體材料表面物理特性表徵的工具，但由於多孔材料的複雜性，並沒有統一的孔徑分布(Pore size distribution, PSD)計算方法，不論是用古典巨觀熱力學方法，還是以新興的密度泛函理論方法對孔分布的計算，孔模型的選擇及計算公式中相關的物理參數數值對結果都有很大影響，因此使用時要依據樣品種類和吸附氣體，合理選擇模型與參數。密度泛函理論(Density functional theory, DFT)是一種能正確描述在 2 nm 以下的孔洞孔徑分布的方法，相對於古典巨觀熱力學理論(BJH、D-R equation)而言，DFT 是微觀熱力學與氣體吸脫附資料庫相印證的結果。相較於古典方法只能單獨探討微孔或是中孔，DFT 可以套用橫跨微孔到中孔的孔徑分布，是利用流體和流體間或流體和固體分子間作用力變化情形，進而計算出流體吸附在孔洞表面的平衡密度分布。非定域密度泛函理論(non localized density functional theory, NLDFIT)為 DFT 的改進，由於在使用 DFT 時，流體的某些震盪行為無法精確描述，例如流體於孔洞中形成多層吸附，流體密度應隨著層間距離呈現起伏，然而套用 DFT 得到的密度分布無此情形。IUPAC 及 ISO 15901 都推薦使用 NLDFIT 來計算微孔及中孔孔徑分布。因此我們在液氮溫度下投以氮氣收集吸脫附等溫線，在套用 NLDFIT 得到微孔到中孔的孔徑分布，即可計算出微孔與中孔比例。

關鍵字：活性碳、非定域密度泛函理論、孔徑分布

Keywords：Activated carbon、NLDFIT、PSD