

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 13 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2012～2014

課題番号：24360318

研究課題名(和文) 細孔壁原子ラフネスの合理的同定法開発と統合的ナノ空間評価への展開

研究課題名(英文) Development of rational method for determining atomic surface roughness and integrated characterization method of nanopores

研究代表者

宮原 稔 (Miyahara, Minoru)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：60200200

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 15,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では極低温He物理吸着TPD測定と分子シミュレーションを援用することで、合理的なラフネス同定法を構築し、表面と空間という、統合的なナノ空間の特性評価手法を開発することを目的とした。本TPD装置は、極低温環境(～4 K)とすることで、吸着力の弱いHe原子に対しても、その物理吸着エネルギーが熱運動エネルギーを凌駕する状態を創出し、昇温脱離法の適用を可能としたものである。当該研究ではMCM-41やSBA-15のAtomistic modelの構築とその吸着エネルギー分布の評価を行い、極低温He物理吸着TPD測定結果との比較検討を行うことで、合理的なラフネス同定法構築についての指針を得た。

研究成果の概要(英文)：We have aimed the development of integrated characterization method of nanopores by a combined study using a cryogenic temperature-programmed desorption (TPD) measurement of physisorbed He and molecular simulation. The measurement of TPD curve of weakly physisorbed He on porous solids was achieved by lowering the system temperature to 4 K so that the solid-He interaction potential became larger than the thermal energy of He atom. We have succeeded in reproducing adsorption behavior of mesoporous silicas (MCM-41 and SBA-15) by the molecular simulation using atomistic silica pore model with appropriate surface roughness, which was determined from the small angle X-ray scattering measurement. Moreover, by comparing adsorption energy distribution of the atomistic silica pore model and the experimental result from the cryogenic TPD measurement of physisorbed He, we have provided a guideline for developing of the rational method for determining the surface roughness.

研究分野：吸着工学

キーワード：吸着 細孔壁原子密度分布 分子シミュレーション 極低温He物理吸着TPD

1. 研究開始当初の背景

1990年代以降、「均質メソ多孔体 Ordered Mesoporous Materials」と呼ばれる新規ナノ多孔体が数多く開発され、界面活性剤ミセルを鋳型とする一連のMCMや、ブロック共重合体を鋳型とするSBAシリーズなどがその代表例として知られている。これらの材料は均一な細孔径を有するために、ナノ細孔径の解析手法に対する検証用材料として多用され、以後、2000年代にかけて、物理吸着によるナノ細孔径の評価手法は格段の進展を見ている。つまり、それ以前はKelvinの毛管凝縮モデルが多用され、簡略な理論モデルゆえに1nmほど細孔径が過小評価されていたが、研究代表者らによる新規毛管凝縮モデル[Miyahara et al., *J. Chem. Phys.* **106**, 8124 (1997); *Langmuir* **16**, 4293 (2000)]や、A.V. Neimarkらによる密度汎関数法(DFT)を用いた細孔径解析法などの開発によって、上述の問題の解決がなされている。しかし、これらの解析手法によって、ナノ多孔体の細孔表面に微細構造についての情報を得ることはできない。言うまでも無く、ナノ多孔体やナノ材料は比表面積の大きさゆえに表面の物性が支配的であり、その物性は表面原子が生み出す表面ラフネスによって大きく左右される。例えば均質メソ多孔体の触媒能や、その表面への金属触媒ナノ粒子の担持性能は、表面ラフネスの程度に大きく依存することから、触媒材料の開発において表面構造の定量的評価は必要不可欠である。しかし、ガス吸着等温線測定のみによって、その表面ラフネスを評価することは困難であり、研究開始当初まで効果的かつ有効な解析手法は確立されていなかった。

上述の均質メソ多孔体におけるもう一つの重要な特性は、その空間的周期性ゆえに、他のランダム構造の材料では測りようのなかった細孔壁近傍での電子密度分布が、X線回折により実測可能なことである。Muroyamaらよると[*J. Phys. Chem. B* **110**, 10630 (2006)], MCM-41のX線回折パターンから構造因子を抽出し、それに対するモデルフィッティングを行うことで、細孔壁近傍における原子スケールの表面ラフネスに起因するdiffuseな電子密度分布を定量的に得ることができる。つまり、MCM-41などの均質メソ多孔体は、細孔径解析法の検証材料として有用であったのと同様、これまで未開拓であった細孔表面ラフネス推定手法に関する極めて有力な検証材料であると言える。ゆえに、本材料による検証を行うことで、一般的な非晶質材料に適用可能な表面ラフネス同定手法を確立することが可能となり、これが申請者らの着想であり独創である。

2. 研究の目的

この着想によって、研究代表者らは実験により得られた電子密度分布をもとに、表面ラフネスを有するAtomisticなMCM-41のシリ

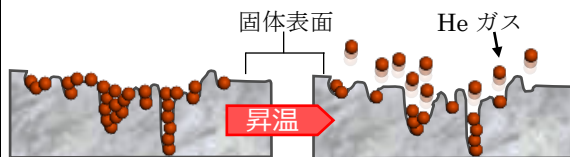


Fig. 1 TPDによる表面原子ラフネス評価

カ細孔モデルを計算機上に構築し、数学的に平滑な表面を持つ従来シリカ細孔モデルと比較することで、表面吸着領域に顕著な吸着挙動の差異が生じるとともに、毛管凝縮の吸脱着ヒステリシス—特に吸着枝の挙動—に少なからぬ影響を与えることを明らかにした。しかし、本手法は、シリカ細孔モデルに設定すべきラフネスの設定原理については任意性が残るものであった。そこで本研究では、Heガスをプローブ分子とする昇温脱離測定装置(Temperature Programmed Desorption: TPD)を開発し、分子シミュレーションを援用することで、合理的な表面ラフネス同定法を構築し、表面と空間という、統合的なナノ空間の特性評価手法に結実させることを目的とした。

3. 研究の方法

上述のTPD装置では、低温・低圧下において、固体表面にHeを吸着させ、それを昇温することで脱離させる(Fig. 1)。脱離HeはTPDカーブとして検出され、これを解析することで表面原子ラフネスに由来する吸着エネルギー分布(Adsorption Energy Distribution: AED)を得ることができる。オングストロームオーダーの表面原子ラフネスに由来するAEDを正しく評価するためには、十分に小さなプローブ分子を用いるべきことから、本研究では最小の中性プローブ分子であるHeを用いる。また、本研究のような分散力による物理吸着系においてTPD法を適用するためには、極低温環境(≒4K)が必要となる。従来、TPD法は、触媒酸点へのNH₃吸着などの化学吸着系や非常に相互作用の強い物理吸着系を主な対象としており、本研究のような極低温物理吸着TPD装置の開発はこれまでに例を見ない。

ここで、AEDの測定のみでは表面ラフネスの大きさを定性的には評価できるものの、表面原子ラフネスの物理的構造を特定することはできない。ゆえに、分子シミュレーションによって固体表面構造のモデリングを行い、そのTPDカーブの予測、実験結果との比較・検討を行うことで、表面原子ラフネスの統合的な評価を行う。

3.1 分子シミュレーション

3.1.1 Atomisticシリカ細孔モデルの構築

MCM-41のAtomisticシリカ細孔モデルの構築には、kinetic Monte Carlo (kMC)法を採用したシミュレーションコードを用いた。本シミュレーションコードは、MCM-41の水熱合成法をmimicしたものとなっており、各種

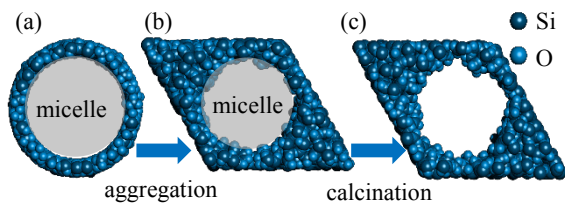


Fig. 2 kMCシミュレーションにおけるモデル構築

の試行(シリカモノマー間における縮合, 分解, 移動, 振動)を繰り返し実施することで, エネルギー的に安定なシリカネットワークを構築するものである。本シミュレーションのスキームは以下の通りである。① ロッド状ミセルの周りにシリカモノマーのレイヤーを形成させる (Fig. 2a)。② モノマー間における脱水縮合を行う (Fig. 2b)。③ 温度を 600 K まで昇温することでミセルを除去し (calcination), 室温まで冷却する (Fig. 2c)。

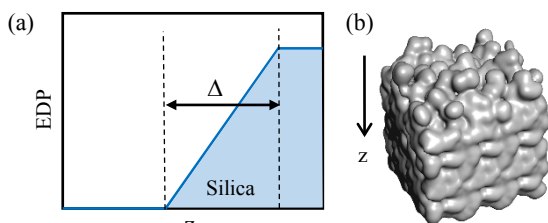


Fig. 3 (a) ランプ波状 EDP
(b) Atomistic シリカ表面モデル

3.1.2 Atomistic シリカ表面モデルの構築

実験により EDP を得ることが出来ないマクロポーラスシリカやシリカナノ粒子を想定し, 分子シミュレーションによる Atomistic シリカ表面モデルの構築を行った。本モデルの構築では, まず BKS ポテンシャルを用いた分子動力学法により融解シリカを 300 K まで急冷することでアモルファスシリカブロックを構築した。そして, Fig. 3a のようにランプ波状として設定した EDP (幅を Δ とする) を再現するように表面の Si および O 原子をランダムに取り除くことで, 表面原子ラフネスが異なる Atomistic シリカ表面モデルを構築した (Fig. 3b)。

3.1.3 吸着シミュレーションおよび AED 計算

得られた Atomistic シリカ細孔モデルおよび Atomistic シリカ表面モデルに対し, グランドカノニカルモンテカルロ (GCMC) 法による吸着シミュレーションを行った。吸着分子としては, まず古典的な取り扱いが可能な Lennard-Jones Ne ($\sigma_{\text{ff}} = 0.275 \text{ nm}$, $\varepsilon_{\text{ff}}/k_{\text{B}} = 35.8 \text{ K}$), Ar ($\sigma_{\text{ff}} = 0.341 \text{ nm}$, $\varepsilon_{\text{ff}}/k_{\text{B}} = 119.8 \text{ K}$), Kr ($\sigma_{\text{ff}} = 0.369 \text{ nm}$, $\varepsilon_{\text{ff}}/k_{\text{B}} = 164.4 \text{ K}$) を用いた。一方, He については, 極低温下での吸着となるために, 原子位置の不確定性に起因する量子効果を考慮する必要がある。そこで, Feynman の経路積分法を適用した GCMC シミュレーションコードの開発を行った。

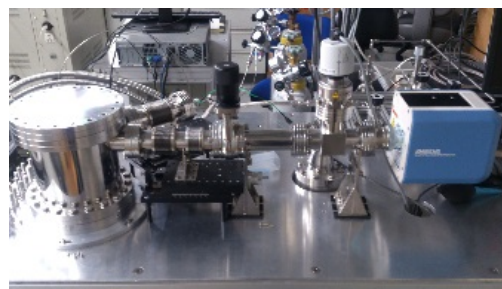


Fig. 4 TPD-MS 実験装置の外観

3.2. 極低温物理吸着 TPD-MS 装置の開発

本装置の外観およびサンプル室の概略図を Fig. 4 および Fig. 5 に示す。本装置では, 真空チャンバー内にサンプル室を設け, 極低温下において, その圧力が $5 \times 10^{-7} \text{ Pa}$ 以下となるように設計した。サンプルホルダーは Gifford-McMahon 冷凍機 ($0.5 \text{ W}@4 \text{ K}$) によって冷却する。TPD カーブは以下のスキームにて測定することを想定し, 設計・開発を行った。① サンプル室内にガス導入ノズルを導入し, サンプルへ He ガスを噴きつける (導入ガス量は電磁式のパルスバルブによって制御)。② ガス導入ノズルを退避させ, 脱離 He を四重極質量分析計 (QMS) へ導くためのノズルを導入した後, サンプル温度を一定の速度で上昇させる。

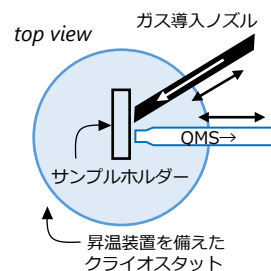


Fig. 5 TPD-MS サンプル室

4. 研究成果

構築した Atomistic シリカ細孔モデルの EDP を Fig. 6 に示す。X 線回折測定によって得られた MCM-41 の EDP を良好に再現していることがわかる。また, このモデルについて, GCMC 法により Ar 吸着等温線 (87.3 K) を計算した結果を Fig. 7 に示す。表面原子ラフネスを持たない平滑シリカ細孔モデルに対して, 本モデルでは, より低相対圧から吸着が進行しており, かつ, 実験結果と良好に一致していることが分かる。これは, シリカ細孔壁に存在する分子サイズの空隙に Ar が強く吸着されるためであり, 表面原子ラフネスを考慮することの重要性を示唆している。同時に, 規則シリカ多孔体の EDP を基に Atomistic シリカ細孔モデルを構築する本手法の妥当性を確認することができた。

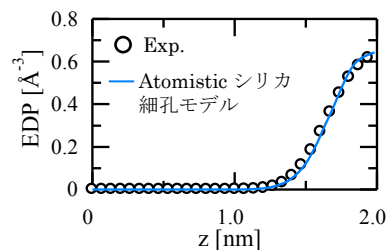


Fig. 6 Atomistic シリカ細孔モデルの EDP

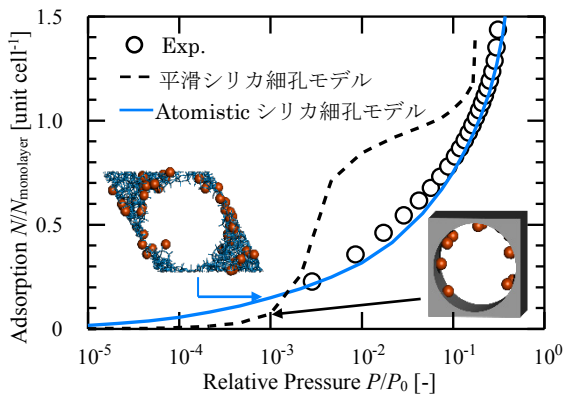


Fig. 7 87.3 Kにおける Ar 吸着等温線

Ar をプローブとする Atomistic シリカ細孔モデルの AED を、飽和蒸気圧下 (87.3 K) において Ar が受けるポテンシャルエネルギーとして計算した結果が Fig. 8 である。得られた AED はバルク液体での分子間相互作用に相当するエネルギー領域において極大値を持っているが、これは細孔の中心部に毛管凝縮した分子が大多数を占めているためである。一方、細孔表面近傍の Ar のみを選定し、それらが受けるエネルギーの平均を計算したところ、表面原子ラフネス部に吸着した Ar のエネルギーは-14 以下 (Fig. 8 破線) であることが分かった。

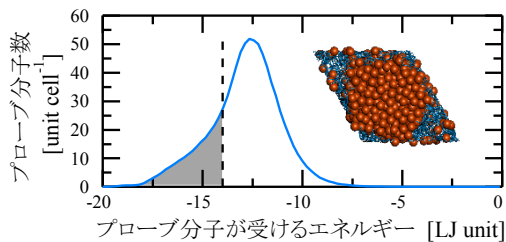


Fig. 8 Atomistic シリカ細孔モデルの AED

4.2 表面原子ラフネスと AED の相関関係

種々の表面原子ラフネスを有する Atomistic シリカ表面モデルを構築し ($\Delta = 0, 1.5, 3.0$ nm), 各モデルの AED を Ar プローブによって計算 (87.3 K, 飽和蒸気圧下) した結果が Fig. 9 である。また、吸着状態のス

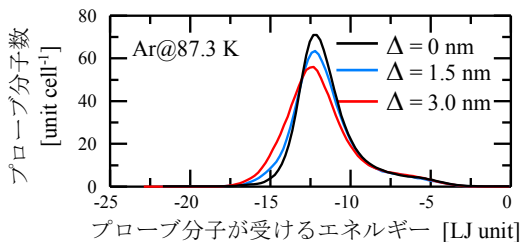


Fig. 9 各種 Atomistic シリカ表面モデルの AED

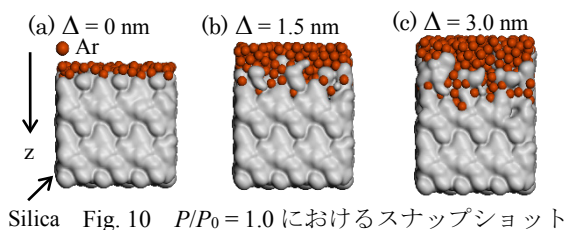


Fig. 10 $P/P_0 = 1.0$ におけるスナップショット

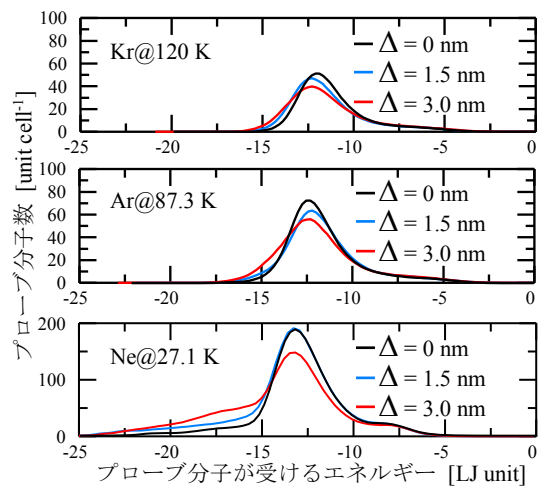


Fig. 11 各プローブ分子に対する AED の依存性

ナップショットを Fig. 10 に示す。Fig. 9 より、 Δ の値が大きくなるに従って、強い相互作用を受ける Ar の個数が多くなっていることが分かる。これは、 $\Delta = 0$ nm では、シリカの表面上にのみ Ar が存在しているのに対し (Fig. 10a), $\Delta = 1.5$ nm から $\Delta = 3.0$ nm へと表面原子ラフネスが大きくなるに従って、シリカ内部にまで Ar が吸着するためと考えられる (Fig. 10b および Fig. 10c)。このように、表面原子ラフネスと AED には明らかな相関関係があることが分かった。

4.3 プローブ分子に対する AED の依存性

上述の Atomistic シリカ表面モデルを用いて、プローブ分子を Kr (120 K) および Ne (27.1 K) とした時の AED を、Ar をプローブとした結果と共に Fig. 11 に示す。Kr から Ne へとプローブ分子サイズが小さくなるに従って、強い相互作用を受けるプローブ分子数が増えることが分かる。つまり、分子サイズが小さいもの程、微細な表面原子ラフネス部の評価が可能であって、Ne (直径 0.27 nm) よりも小さな He (直径 0.23 nm) をプローブ分子として用いることで、より正確な情報が得られるべきことを示唆する結果と言える。

4.4 極低温物理吸着 TPD-MS 実験

MCM-41 をサンプルとする He の TPD カーブ測定 (昇温速度 3.0 K/min) を行った結果を Fig. 12 に示す。He の沸点が 4.2 K であるのに対して、MCM-41 に吸着した He は、10 K から 20 K という高い温度において脱離しており、He が表面原子ラフネス部に強く捉えられ

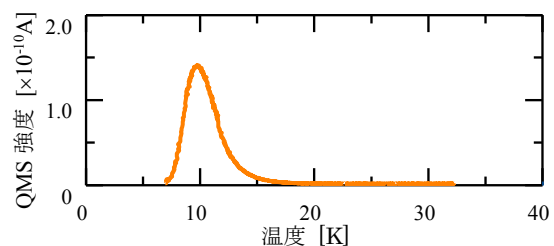


Fig. 12 TPD-MS 実験結果 (TPD カーブ)

ていることを示唆している。ここで、得られた TPD カーブの横軸は温度であるが、これをエネルギーに変換し、AED を得ることで、シミュレーション結果と比較する必要がある。現在までに、本比較によって、合理的なラフネス同定法構築についての指針を得ることに成功しており、近く成果を公開する予定である。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 7 件)

- 1) R. Numaguchi, H. Tanaka, S. Hiraide, and M. T. Miyahara, "Potential Theory for Gate Adsorption on Soft Porous Crystals", *Mol. Phys.* 査読有, DOI: 10.1080/08927022.2015.1047369
- 2) H. Tanaka, S. Hiraide, A. Kondo, and M. T. Miyahara, "Modelling and Visualization of CO₂ Adsorption on Elastic Layer-Structured Metal-Organic Framework-11: Toward a Better Understanding of Gate Adsorption Behavior," *J. Phys. Chem. C* **119**, 11533–11543 (2015), 査読有, DOI: 10.1021/jp512870p
- 3) H. Tanaka, S. Ohsaki, S. Hiraide, D. Yamamoto, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, "Adsorption-Induced Structural Transition of ZIF-8: A Combined Experimental and Simulation Study", *J. Phys. Chem. C* **118**, 8445–8454 (2014), 査読有, DOI: 10.1021/jp500931g
- 4) M. T. Miyahara, R. Numaguchi, T. Hiratsuka, K. Nakai, and H. Tanaka, "Fluids in nanospaces: molecular simulation studies to find out key mechanisms for engineering", *Adsorption* **20**, 213–223 (2014) 査読有, DOI: 10.1007/s10450-013-9588-2
- 5) R. Numaguchi, H. Tanaka, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, "Dependence of adsorption-induced structural transition on framework structure of porous coordination polymers", *J. Chem. Phys.* **140**, 044707 (2014), 査読有, DOI: 10.1063/1.4862735
- 6) M. T. Miyahara and H. Tanaka, "Determination of Phase Equilibria in Confined Systems by Open Pore Cell Monte Carlo Method", *J. Chem. Phys.* **138**, 084709 (2013), 査読有, DOI: 10.1063/1.4792715
- 7) H. Tanaka, T. Hiratsuka, N. Nishiyama, K. Mori and M. T. Miyahara, "Capillary Condensation in Mesoporous Silica with Surface Roughness", *Adsorption* **19**, 631–641 (2013) 査読有, DOI: 10.1007/s10450-013-9486-7

[学会発表] (計 28 件)

- 1) 平塚 龍将, 田中 秀樹, 宮原 稔, "規則シリカ多孔体が示す毛管凝縮挙動の速度論的検討とそのモデル化", 化学工学会第 80 年会, 2015 年 3 月 19-21 日, 東京

- 2) H. Tanaka and M. T. Miyahara, "Hydrogen Isotope Separation by Carbon Nanopores", The 4th Symposium on Future Challenges for Carbon-Based Nanoporous Materials (CBNM-4), 16-18 March, 2015, Nagano, Japan
- 3) T. Hiratsuka, H. Tanaka and M. T. Miyahara, "Molecular modeling of ordered mesoporous silica with combined adsorption and XRD analysis", Fourth International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, 9-13 March, 2015, Sitges, Spain
- 4) 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆, 宮原 稔, "新規ゼオライト鑄型炭素の in silico 合成およびその応用可能性の検討", 第 40 回炭素材料学会年会, 2014 年 12 月 8-10 日, 福岡
- 5) 平塚 龍将, 田中 秀樹, 宮原 稔, "吸着挙動の予測を可能にする規則シリカ多孔体モデル構築手法の開発", 化学工学会姫路大会, 2014 年 12 月 8-9 日, 兵庫
- 6) T. Hiratsuka, H. Tanaka and M. T. Miyahara, "Molecular modeling of ordered mesoporous silica with surface roughness", AIChE Annual Meeting, 16-21 November, 2014, Atlanta, USA
- 7) H. Tanaka, S. Hiraide, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, Modeling and Visualization of Elastic Layer-Structured Metal-Organic Framework-11 Encapsulating CO₂: Toward a Better Understanding of Gate Adsorption Behavior, AIChE Annual Meeting, 16-21 November, 2014, Atlanta, USA
- 8) T. Hiratsuka, H. Tanaka and M. T. Miyahara, "Molecular modeling of ordered mesoporous silica with a focus on its surface roughness", 11th Korea-Japan Symposium on Materials and Interfaces, 5-8 November, 2014, Jeju Korea
- 9) H. Tanaka, S. Hiraide, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, "Modeling and Visualization of Elastic Layer-Structured Metal-Organic Framework-11 Encapsulating CO₂: Toward a Better Understanding of Gate Adsorption Behavior", 4th International Conference on Metal-Organic Frameworks & Open Framework Compounds (MOF2014), 28 September-1 October, 2014, Kobe, Japan
- 10) 平塚 龍将, 田中 秀樹, 宮原 稔, 規則シリカ多孔体の細孔構造同定および毛管凝縮挙動の速度論的検討, 第 28 回日本吸着学会研究発表会, 2014 年 10 月 23-24 日, 北海道
- 11) 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 近藤 篤, 渡邊 哲, 加納 博文, 金子 克美, 宮原 稔, 金属有機構造体 ELM-11 におけるゲート吸着挙動のモデリング, 第 28 回日本吸着学会研究発表会, 2014 年 10 月 23-24 日, 北海道

- 12) 平塚 龍将, 田中 秀樹, 宮原 稔, 表面ラフネスに着目した規則シリカ多孔体の分子モデリング法の開発, 化学工学会第46回秋季大会, 2014年9月17-19日, 福岡
- 13) 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆, 宮原 稔, 分子シミュレーションによる新規ゼオライト鋳型炭素の探索, 化学工学会第46回秋季大会, 2014年9月17-19日, 福岡
- 14) 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆, 宮原 稔, 分子シミュレーションによる新規ゼオライト鋳型炭素の探索, 第65回コロイドおよび界面化学討論会, 2014年9月3-5日, 東京
- 15) H. Tanaka, S. Hiraide, R. Numaguchi, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, “Gate opening in ELM-11 induced by CO₂ adsorption”, 10th International Symposium on the Characterization of Porous Solids (COPS-X), May 11-14, 2014, Granada, Spain
- 16) 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 大崎 修司, 渡邊 哲, 宮原 稔, “多孔性配位錯体における吸着誘起構造転移の自由エネルギー解析”, 化学工学会第79年会, 2014年3月18-20日, 岐阜
- 17) 宮原 稔, “ナノ空間内流体の相転移および吸着誘起ナノ配位空間構造転移の機構解明”, 化学工学会第79年会, 2014年3月18-20日, 岐阜, (化学工学会賞 研究賞 (内藤雅喜記念賞) 受賞講演)
- 18) 田中 秀樹, 北川 真史, 宮原 稔, “分子シミュレーションによるゼオライト鋳型炭素の吸着挙動検討と吸着ヒートポンプへの応用展開”, 化学工学会第45回秋季大会, 2013年9月16-18日, 岡山
- 19) H. Tanaka, K. Nakamura, A. Maki and M. T. Miyahara, “Hydrogen Isotope Separation in Zeolite-Carbon Complex”, 11th International Conference on Fundamentals of Adsorption (FOA11), May 19-24, 2013, Baltimore, USA
- 20) H. Tanaka, S. Ohsaki, D. Yamamoto, R. Numaguchi, S. Watanabe and M. T. Miyahara, Adsorption-Induced Structural Transition of ZIF-8, 11th International Conference on Fundamentals of Adsorption (FOA11), May 19-24, 2013, Baltimore, USA
- 21) M. T. Miyahara and H. Tanaka, “Fluids in Nanospace: Molecular Simulation Studies to Find out Key Mechanisms for Engineering”, 11th International Conference on Fundamentals of Adsorption (FOA11), May 19-24, 2013, Baltimore, USA, (Keynote Lecture)
- 22) 平塚 龍将, 西山 奈津美, 森 健吾, 田中 秀樹, 宮原 稔, “ラフネスを考慮したシリカ細孔モデルによる吸着ヒステリシス機構の解明”, 第26回日本吸着学会研究発表会, 2012年11月14-15日, 茨城
- 23) 宮原 稔, 福岡 恭兵, 田中 秀樹, “ナノ細孔内臨界点の分子シミュレーションによる特定とその考察”, 化学工学会第44回秋季大会, 2012年9月19-21日, 宮城
- 24) H. Tanaka, N. Nishiyama and M. T. Miyahara, “Adsorption Hysteresis in Mesoporous Silica with Surface Roughness: A Molecular Simulation Study”, 8th International Symposium Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids, August 27, 2012, Krakow, Poland
- 25) H. Tanaka, N. Nishiyama, K. Mori, T. Nishino, and M. T. Miyahara, “Capillary Condensation in Mesoporous Silica with Surface Roughness: A Molecular Simulation Study”, International Symposium on Zeolites and Microporous Crystals, July 28-1 August, 2012, Hiroshima, Japan
- 26) M. T. Miyahara and H. Tanaka, “Critical Point of Simple Fluid Confined in Carbon Nanopores”, The 3rd Symposium on Future Challenges for Carbon-Based Nanoporous Materials (CBNM-3), May 26-29, 2012, Nagano, Japan (invited)
- 27) H. Tanaka, N. Nishiyama, K. Mori, T. Nishino, and M. T. Miyahara, “Adsorption Hysteresis of Argon in Mesoporous Silica with Surface Roughness”, 6th Pacific Basin Conference on Adsorption and Technology (PBAST-6), May 20-23, 2012, Taipei, Taiwan
- 28) M. T. Miyahara and H. Tanaka, “Toward the Cutting-Edge Characterization of Nanopores Based Totally on Molecular Simulation Kernel”, 6th Pacific Basin Conference on Adsorption and Technology (PBAST-6), May 20-23, 2012, Taipei, Taiwan (invited)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/2koza/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

宮原 稔 (MIYAHARA, Minoru)
京都大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：60200200

(2) 研究分担者

田中 秀樹 (TANAKA, Hideki)
京都大学・大学院工学研究科・講師
研究者番号：80376368