

計算化学による吸着物質の吸着挙動予測技術

技 - MZ2 - 3

技術内容

熱分解LPG、LG中の硫黄分吸着脱硫に関する
計算化学による吸着物質の吸着挙動予測技術

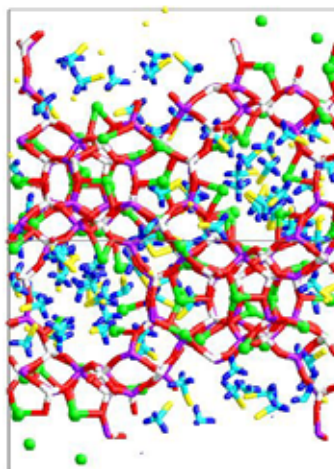
特徴

熱分解LPG、LG中の各吸着物質の吸着エネルギーを算出することができる。この計算結果から、競争吸着するであろう吸着阻害物質の挙動を予測することが可能

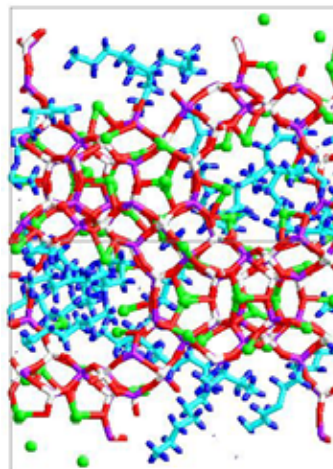
用途(応用範囲)

吸着剤のタイプや構造、また、吸着除去される含硫黄化合物や吸着阻害を考えると考えられる各種物質の化学種や物質構造等のパラメータが既知であれば、どのような吸着剤と硫黄化合物との組合せでも、本技術の適用が可能である。

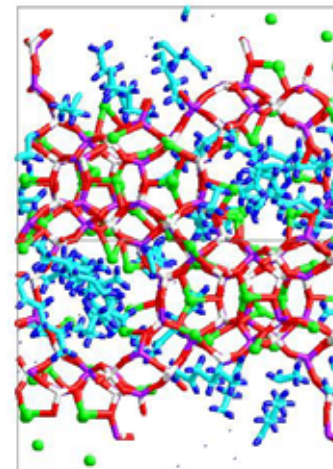
● C
● H
● S
● Al
● Na
● Si
● O



DMDS



n-デカン



1-ヘキセン

図 吸着状態の比較 (298K, 1×10^{-7} kPa)