

你的 BJH 方法用对了吗？

BJH 方法是介孔孔径分布的计算模型。也是目前普遍被接受的孔径分布计算模型，它是基于 Kelvin 毛细管凝聚理论发展得到的。它假设孔型是圆柱孔。根据吸附曲线数据和脱附曲线数据都可以得到孔径分布。

那么，到底是用吸附支还是脱附支？现在很多人都看喜好进行选择。喜欢哪个就用哪个。但是，小编还要弱弱的说一句：不可以。的确，无论从理论还是方法上脱附支的数据点都更好的反应了平衡相变。这也是人们不得不使用脱附支去计算孔径分布的一个原因。这里需要说明的一点是，使用脱附支计算有个风险，那就是假峰的出现。脱附支计算出现假峰的时候，我们就只能用吸附分支去计算。很多时候人们是意识不到这一点的。所以，给大家介绍用吸附数据做计算，是因为这是一个比较保险的方法。

如何判断有假峰呢？最简单的方法就是：分别使用脱附支和吸附支数据去计算，然后将两个图对比一下，如果只在脱附支数据计算的结果上明显有一个在约 3.8 nm 处的尖锐的峰。那么此时就要必须选择吸附数据去做计算。

下面小编就要多啰嗦几句了。

BJH 作为介孔孔径分布计算的经典方法目前发现主要存在以下问题：

1. 4 nm 以下低估孔径达 10%—20%。(经常有人问，你看别人家的 BJH 数据能低到 1nm，为啥你们的不行？这种问题，额...我能少回答几个么？)

2. 按教科书的方法，用脱附曲线求孔径分布常出现假峰（因为教科书上都是以氧化铝为例，这是非常规矩的 IV 类等温线 H1 迟滞环—介孔窄分布样品，而目前研究的课题都是微孔或微介孔样品）

BJH 孔径分布的应用条件：

1. 孔隙是刚性的，不能用于软孔样品
2. 适用于筒形孔或圆柱孔条件
3. 4 nm 以上孔径分析误差较小

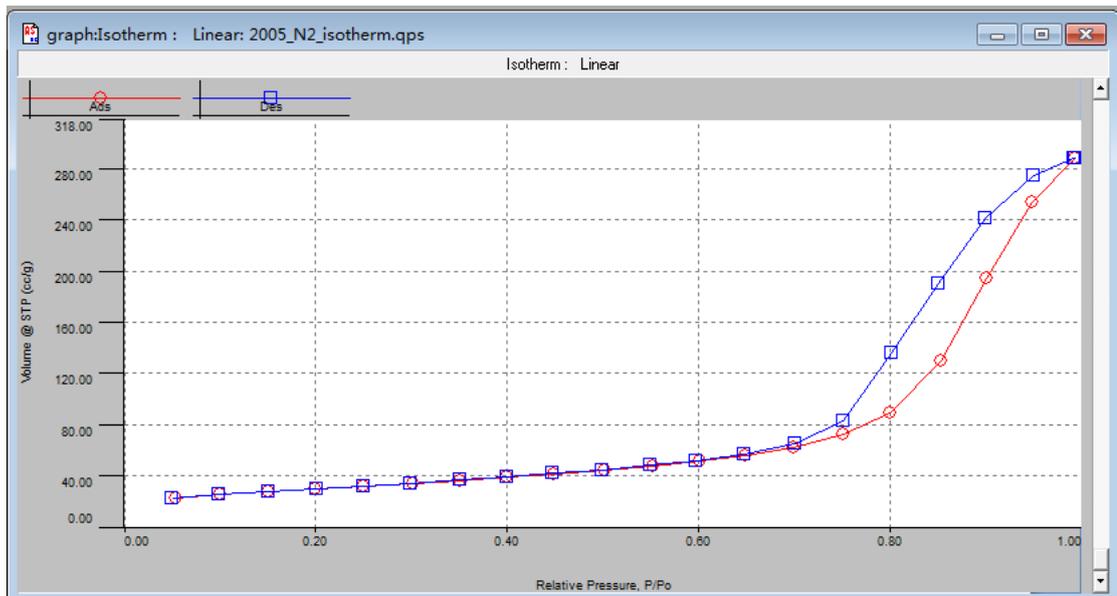
想算的更准确？请访问我们给大家推荐的博客。

http://blog.sina.com.cn/s/blog_80d22a3f0100u3vt.html

下面进入正题。

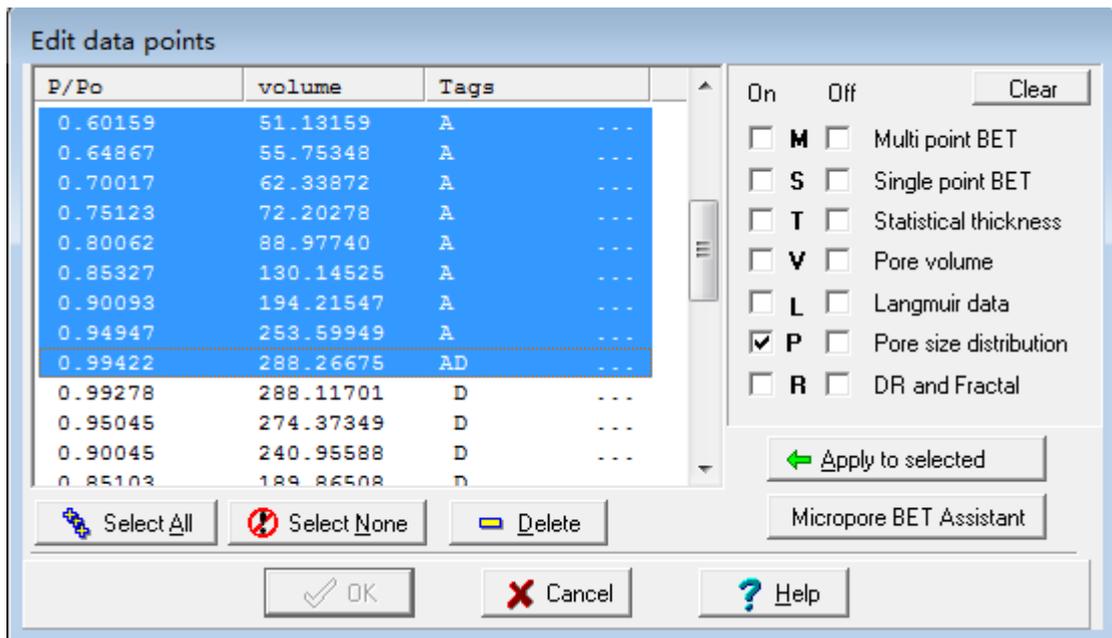
BJH 方法在使用的时候需要对数据进行选点，对参与计算的数据点需要给出“P”标签。选点时软件默认选取相对压力大于 0.35 的点。实例中我们以介孔氧化铝为例。

1、通过 file-open 打开数据。示意如下图。



2、任意处右键点击→edit data tags

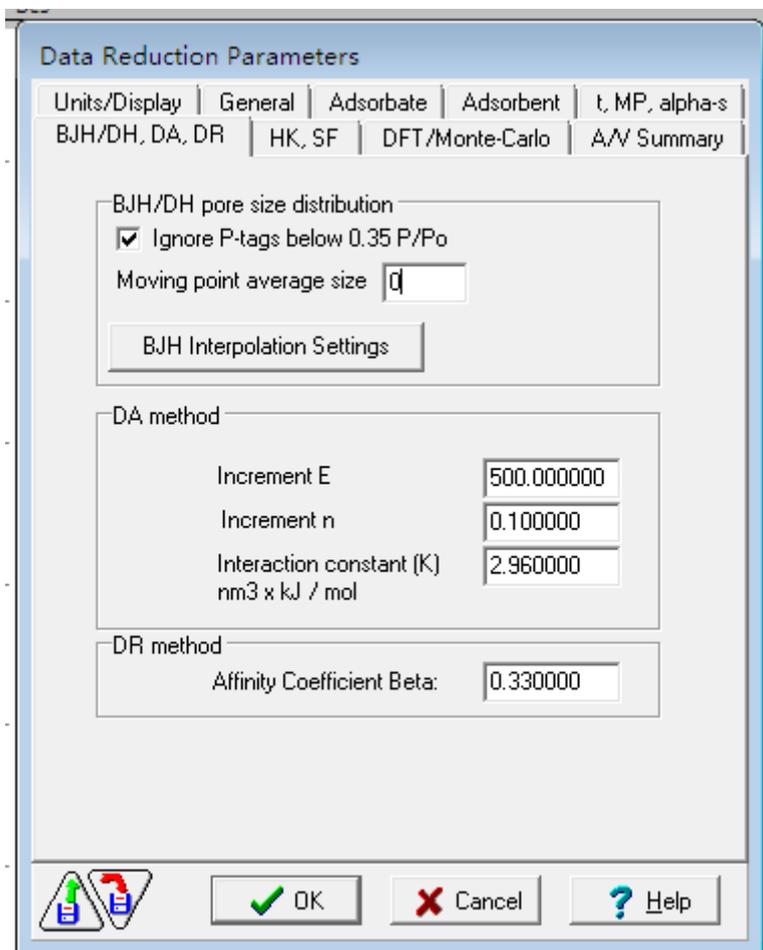
勾选 P 标签(on),选中 0.35-0.994(最后一个吸附点)所有的数据。点击 apply to selected →ok。



P/Po	volume	Tags
0.60159	51.13159	A
0.64867	55.75348	A
0.70017	62.33872	A
0.75123	72.20278	A
0.80062	88.97740	A
0.85327	130.14525	A
0.90093	194.21547	A
0.94947	253.59949	A
0.99422	288.26675	AD
0.99278	288.11701	D
0.95045	274.37349	D
0.90045	240.95588	D
0.85103	189.86508	D

3、模型参数设置查看

右键点击任意处→Data Reduction Parameters→OK



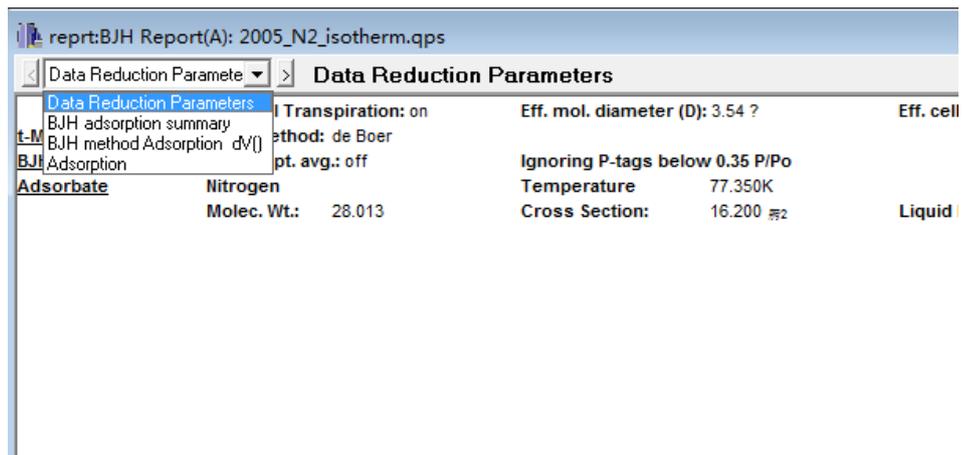
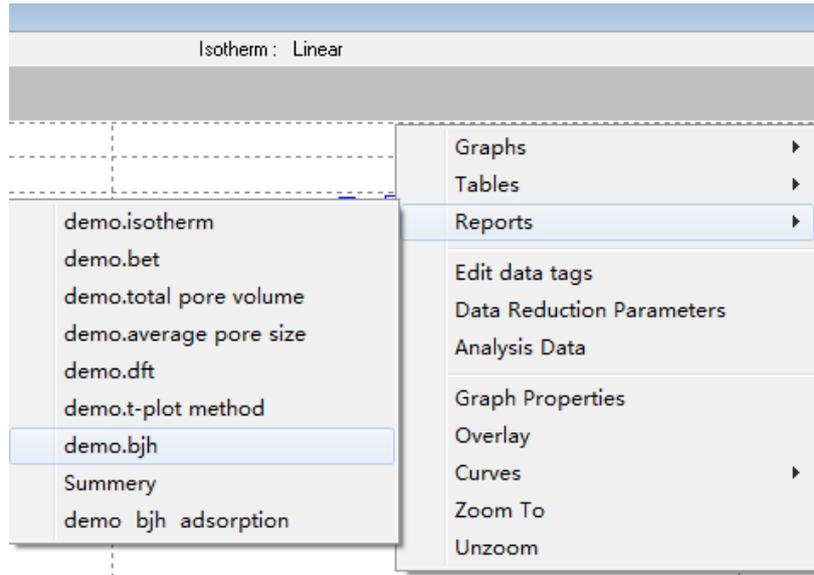
必须要用所有吸附点数据的 BJH 孔径分布结果的朋友，请去掉那个对勾。但是由此带来的数据结果不准确，小编不负责的。

Moving point average size 是进行数据点平滑的。建议谨慎使用。有时候，平滑会对 mode 结果产生比较大的影响。大家可以实践看看。

4、结果查看

右键点击 reports→demo.bjh。

通过点击黑色小三角可以看到下拉子菜单里关于 BJH 结果的 summery 和孔径分布图。



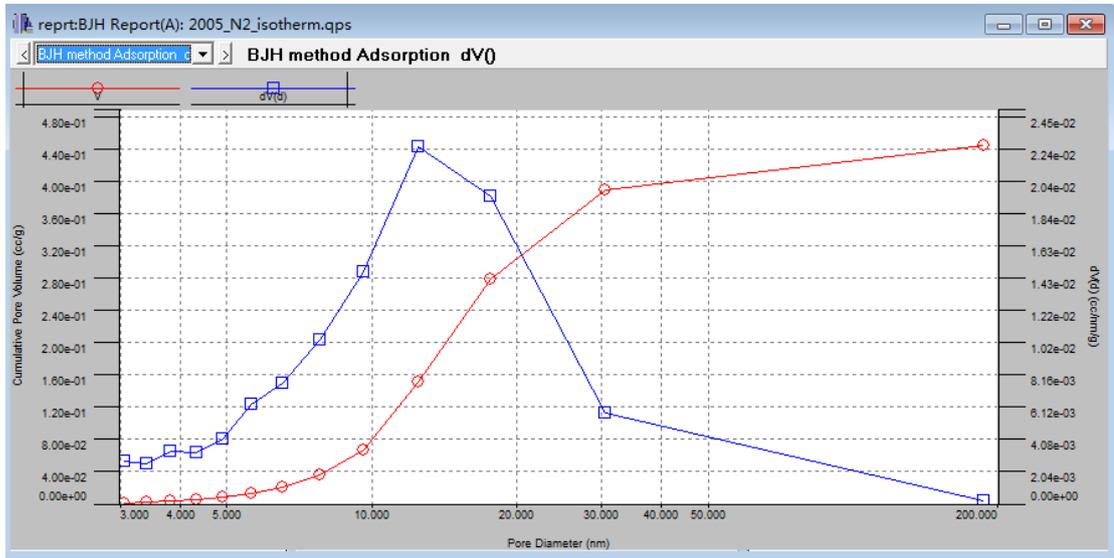


图 1: BJH 方法计算得到的孔径分布图

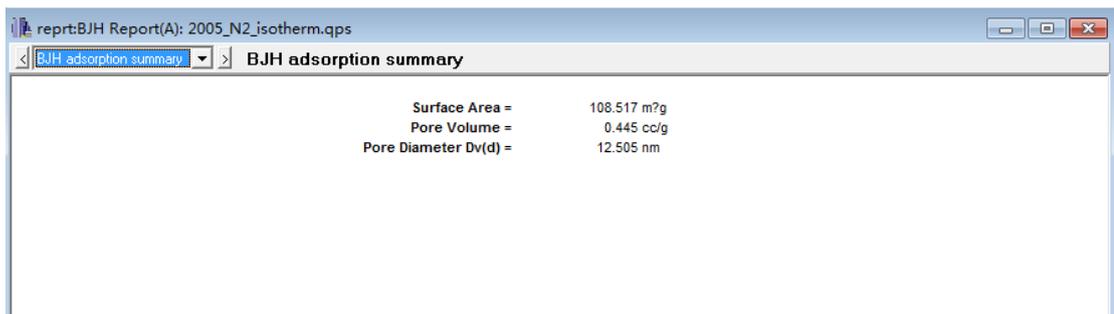


图 2: BJH 方法计算得到的孔径分布结果