

化学工学における分子シミュレーションの活用

—基礎と応用—

分離技術会 編

本書は、二部構成であり、第一部基礎編では、企業における計算化学の応用に関する貴重な経験と、計算化学シミュレーションの基礎をまとめた。第二部応用編では、化学工学分野での応用事例を、各分野の第一人者が執筆している。この本を読むことによって、化学工学における分子シミュレーションについての多くの知識と経験を手に入れて頂けるものと期待している。

第1部基礎編

1. 計算化学シミュレーションとは

(三井化学)三戸 邦郎

- 1.1 はじめに ～化学製品開発における計算化学の位置付け～
- 1.2 計算環境の発達 ～計算化学が身近になった～
- 1.3 計算科学に用いられる計算手法
- 1.4 計算化学手法の進展 ～計算化学はどこまで計算可能か？
- 1.5 計算化学で何が分かるか
- 1.6 計算化学をどう役立てるか
- 1.7 計算科学利用上の注意点
- 1.8 計算化学をより有効に利用するために
- 1.9 計算化学で化学が変わる ～計算化学は知識化の有効なツール～
- 1.10 この章のおわりに

2. 計算化学の基礎

(法政大学)片岡 洋右

- 2.1 計算環境とソフトウェア
- 2.2 分子力学法
- 2.3 分子動力学法
- 2.4 モンテカルロ法
- 2.5 分子軌道法と密度汎関数法

第2部応用編

1. 相平衡への応用

(九州大学)岩井 芳夫・下山 裕介

- 1.1 高圧ガスに対する固体の溶解度の計算
- 1.2 気液および液液相平衡の計算

2. 吸着への応用

(大阪大学)古川 信一・新田 友茂

- 2.1 はじめに
- 2.2 吸着の分子シミュレーション法
- 2.3 吸着平衡状態のシミュレーション
- 2.4 吸着ダイナミクスのシミュレーション

2.5 おわりに

3. 溶媒抽出への応用

(北九州市立大学) 吉塚 和治・上江洲一也

3.1 はじめに

3.2 抽出試薬の分子設計

3.3 抽出試薬の分子設計

3.4 抽出過程の分子動力学シミュレーション

4. 膜分離への応用

(東北大学) 高羽 洋充

4.1 はじめに

4.2 シミュレーション方法の概要

4.3 ポリマー膜のシミュレーション

4.4 ゼオライト膜のシミュレーション

4.5 シリカ膜のシミュレーション

4.6 まとめ

5. 触媒工学への応用

(東北大学) 古山 通久・坪井 秀行

遠藤 明・高羽 洋充

久保 百司

Carlos A. Del Carpio

宮本 明

5.1 はじめに

5.2 有機金属錯体触媒上でのメチレンシクロプロパン開環反応機構

5.3 自動車排出ガス脱硝触媒の触媒活性高速スクリーニング

5.4 Ziegler-Natta 触媒上でのプロピレン重合反応ダイナミクス

5.5 新しい展開

5.6 おわりに

付 録

(東北大学) 高羽 洋充