

分子反応モデリングの理論と手法、応用事例を解説

分子反応モデリング

その理論と応用

—石油・石炭・バイオマスの高度利用に向けて—

Michael T. Klein, Gang Hou, Ralph J. Bertolacini, Linda J. Broadbelt, Ankush Kumar

田中 隆三 (出光興産株式会社) 訳

阿尻 雅文 (東北大学原子分子材料科学高等研究機構) 監修

A5判 上製 352頁 定価(本体 16,000円+税) ISBN 978-4-621-08697-1

複雑な混合物の化学反応を、分子レベルで詳細に解析し、予測するための技術である“分子反応モデリング”について、その理論と方法、応用例を網羅的・系統的に解説。分子反応モデリングを実行するためのソフトウェアであるKMT(Kinetic Modeler's Toolbox)についても詳しく説明している。

応用例として、石油系留出油の改質や水素化処理、熱分解などの各種精製プロセスに加え、残油の熱分解、石炭の直接液化、リグニンの熱分解について、原著者による論文を翻訳して掲載。

石油・石炭・バイオマスといったさまざまな炭化水素資源に関する技術開発に携わる研究者や技術者にとって、分子反応モデリングを有効に活用するために、入門書として精読するのに最適な書。

丸善出版

