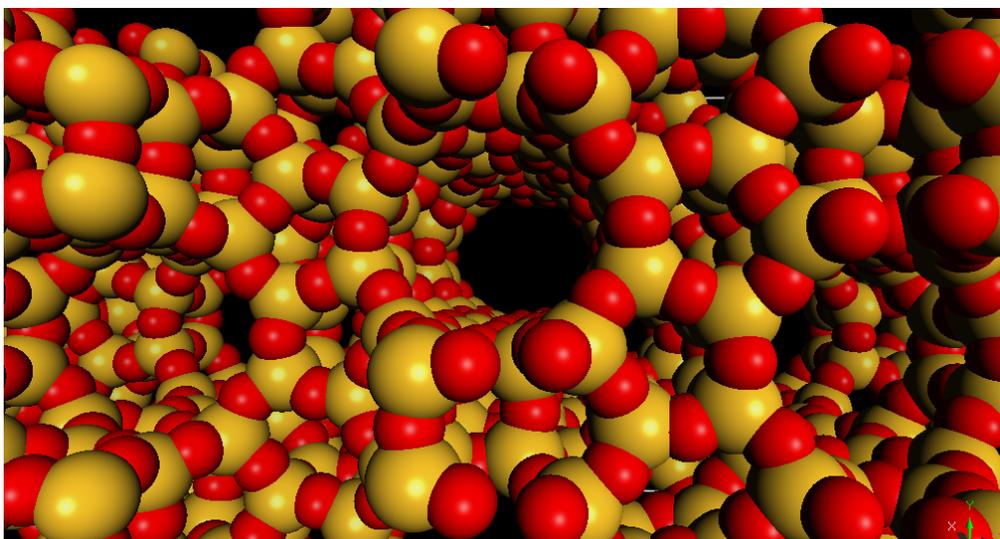


触媒反応シミュレーション・デモンストレーション

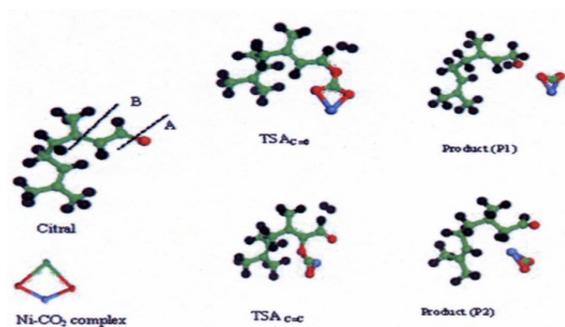
～合成, キャラクターリゼーション, 反応, 被毒について～

アクセルリス株式会社アビジット・チャタジー 東京都千代田区霞が関 3-7-1 霞が関東急ビル 17 階

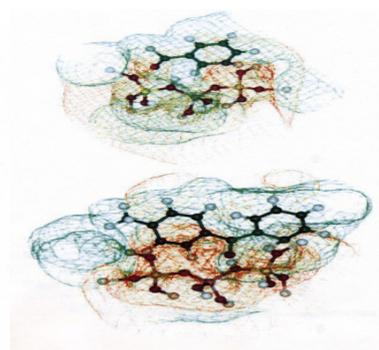
最近のコンピュータ技術の進歩により、広範囲の触媒材料についてより現実的なシミュレーションが可能になってきました。本セミナーでは、触媒材料の合成とキャラクターリゼーション、材料の触媒能、ナノ細孔内の分子形状選択反応、触媒上への化学吸着反応、接触分解、反応機構などについて、遷移状態理論を用いて、特に活性化エネルギー、固有反応座標、触媒反応における溶媒の影響に関するデモを行います。これにより、実際の実験での評価をなるべくせずにどのようにして分子モデリングが触媒反応過程を予測できるかをご紹介します。



Zeolite BETA pore



Reaction mechanism



Electrostatic potential

Reference: Chatterjee et al Advanced Synthesis and Catalysis. 2012, 354, 2009 – 2018