

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

点を有する)の反応モデルを機構レベルで構築した。まず、反応メカニズムについて考察し、次に、モデル構築過程について述べる。
機構モデルは、安定分子と不安定中間体の両方を含めた反応化学を厳密に表現するため、一般に、経路モデルに比べてサイズが大きくなる。そして、理論上可能な反応パスをすべて網羅しようとする、反応ネットワークはたちまち巨大化し、現実的なコンピュータ能力や計算時間の範囲では手に負えなくなる。したがって、機構モデリングでは、反応のメカニズムを厳密に表現しつつも、各反応の速度パラメータも考慮し、実際に生成物の分子組成に影響する主要な反応パスだけに絞り込むことが重要である。

多数の分子と反応からなる複雑な機構モデルの反応ネットワークも、原料分子の化合物クラスと反応ファミリーの観点で整理することで、少数の要素の組み合わせとして、系統立てて取り扱うことが可能となる。反応ファミリーは、類似の中間体を含む反応のグループである。同じファミリーに属する反応に対しては、定量的構造反応性相関(QSRC)や線形自由エネルギー関係(LFER)が成り立つ。それらの関係式を用いることで、膨大な数の速度パラメータを、少数のパラメータで表現することができるのである。

パラフィン水素化分解反応にかかわる分子の化合物クラスは、パラフィン、オレフィン、イオン、およびNH₃などの被毒物である。また、反応ファミリーは、金属サイト

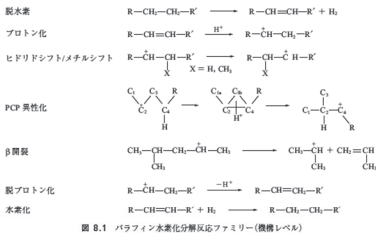


図 8.1 パラフィン水素化分解反応ファミリー(機構レベル)

トにおける脱水素と水素化、および酸点におけるプロトン化、ヒドリドシフト、メチルシフト、プロトン化シクロプロパン(PCP)異性化、β開裂、脱プロトン化である。これらの化合物クラスと反応ファミリーを組み合わせることで、水素化分解反応モデルに必要な多数の反応を作成した。その具体的な操作は、分子を表現する結合電子行列に、反応行列を繰り返し適用することである。KMTは、これを自動化する。パラフィン水素化分解の反応機構として、金属サイトと酸点がかわる二活性点反応メカニズムを考える。その機構レベルの反応ファミリーを図8.1に示す。これら反応ファミリーに対応する反応行列を表8.1に、反応ルールを表8.2に、それぞれまとめた。

速度定数情報は、反応ファミリーごとに式(8.1)にQSRC/LFERを用いて整理

表 8.1 パラフィン水素化分解の反応行列(機構レベル)

Table with 2 columns: 反応ファミリー, 反応行列. Rows include 脱水素, 水素化, プロトン化, 脱プロトン化, ヒドリドシフト/メチルシフト, PCP異性化, β開裂, 脱プロトン化, 水素化.

の2種類がある。H/C、平均分子量、沸点分布、化合物クラス分布、NMRなどの分析情報は、ある原料油に対して固定的な特性値である。調整可能なものは、化学構造の確率的なサブリングに用いるパラメータであり、具体的にはアロマ環数、ナフ

* 訳注: 現在のKMTはCME(Composition Model Editor)、INGen(Interactive Network Generator)、KME(Kinetic Model Editor)の3つのモジュールで構成されている。MolGenとNetGenは改良が重ねられて多くの機能が追加され、それぞれにグラフィカルユーザーインターフェースが与えられてCMEとINGenへと進化した。EqGen、SolGen、ProGenには既述のグラフユーザーインターフェースが与えられてKMEに統合された。KMEは、それだけで分子反応モデルの実行、編集、結果の表示が可能な非常に高機能で使いやすいモデリングツールに進化している。

組見本

6.2 分子反応モデリングツール(KMT)の開発 93

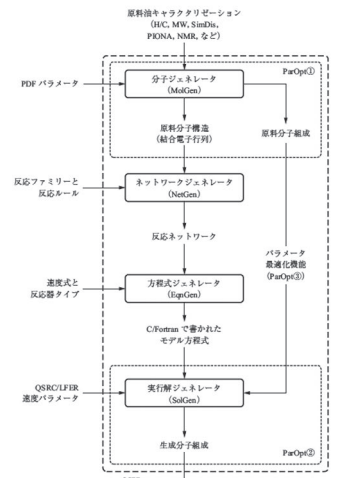


図 6.1 分子反応モデリングツールボックス(KMT)

第1章 緒言
第1部 分子反応モデリングの基礎
第2章 複雑な原料油の分子構造と組成のモデリング
第3章 複雑なプロセス化学の反応ネットワーク自動構築
第4章 速度パラメータの系統的整理
第5章 反応モデルのタイプに応じた方程式ソルバーの選択
第6章 総合的な分子反応モデリング用ツール
第2部 さまざまなプロセスへの応用
第7章 ナフサ改質の分子反応モデリング(経路レベル)
第8章 重質パラフィン水素化分解の分子反応モデリング(機構レベル)
第9章 ナフサ水素化処理の分子反応モデリング(経路レベル)
第10章 ガスオイル水素化処理の分子反応モデリング(経路レベル)
第11章 流動接触分解の分子反応モデリング(機構レベル・経路レベル)
第12章 ナフサ熱分解の分子反応モデリング(機構レベル)
第13章 残油熱分解の分子反応モデリング(経路レベル)
第14章 石炭直接液化の分子反応モデリング(機構レベル)
第15章 リグニン熱分解の分子反応モデリング(経路レベル)
第16章 まとめと結論
用語集

丸善出版株式会社

〒101-0051 東京都千代田区神田神保町 2-17 神田神保町ビル 書籍営業部 TEL(03)3512-3256 FAX(03)3512-3270 http://pub.maruzen.co.jp

丸善出版株式会社行 FAX 03-3512-3270

分子反応モデリング その理論と応用 A5判 352頁 定価(本体16,000円+税) ISBN978-4-621-08697-1

お名前
ご住所 〒
TEL

取扱店