

触媒

CODEN:SHKUAJ ISSN 0559-8958

Catalysts
&
Catalysis

OCT.2008 Vol.50 No.7

特集 触媒・化学反応における計算化学の
進歩

- 固体表面の計算化学
- 溶液内化学反応理論の開発と応用
- 触媒表面に対するエネルギー密度解析
- 人工変異酵素の設計と機能制御をめざして
- ゼオライト酸点に関する研究

- 配位エネルギーと反応タイプ
- メソスケールの計算化学とその応用
- 触媒反応中心のキャラクタリゼーション
- 触媒開発のための計算化学

解説

- 界面活性剤の分子集合体とメソ多孔体構造
- 非定常反応操作を用いる触媒反応機構の解明

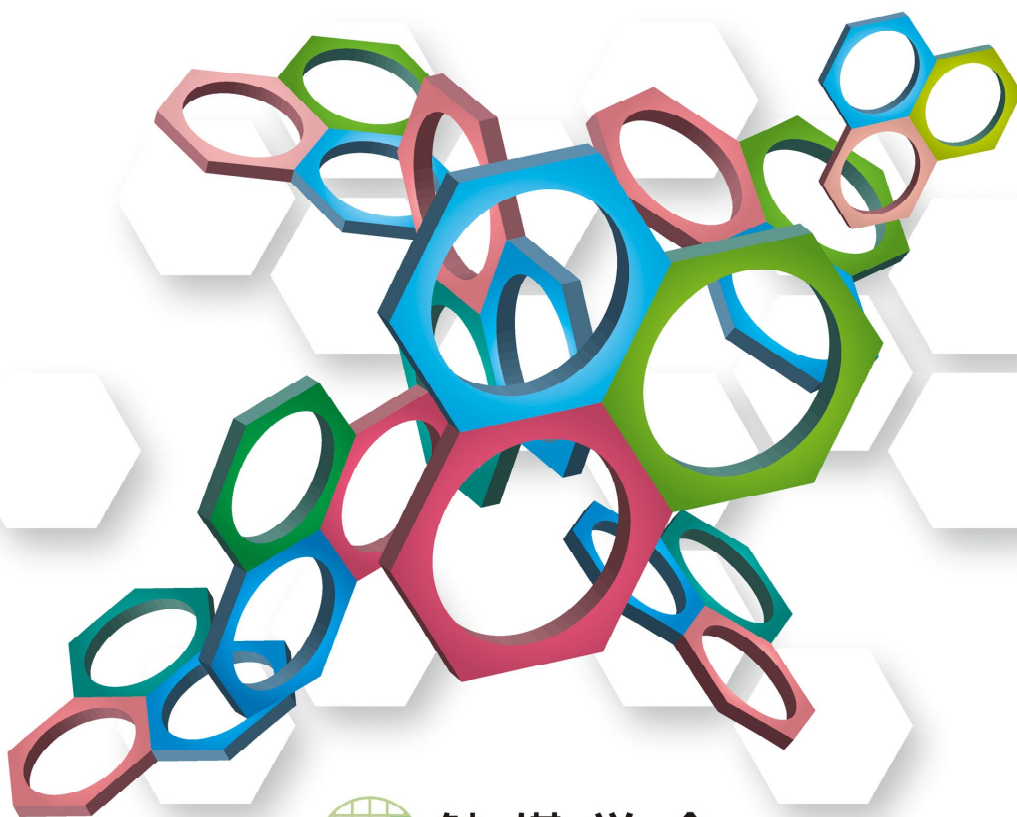
589—660

〈特集〉

触媒・化学反応における計算化学の進歩

〔7〕

触媒学会



触媒学会
Catalysis Society of Japan