

城塚 達也 (Tatsuya Joutsuka)

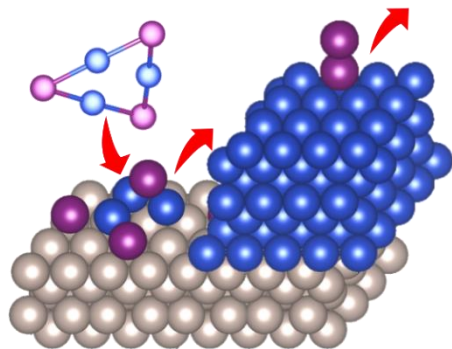
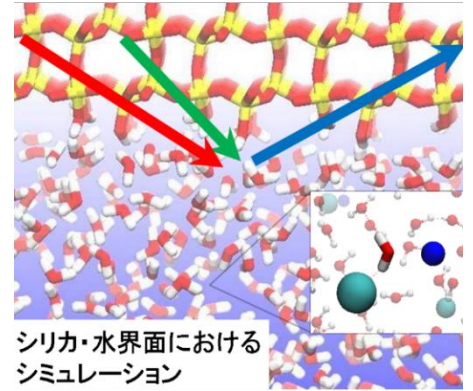
所属 (Domain) 物質科学工学領域 (Domain of Materials Science and Engineering)

●研究テーマ (Research theme)

- ①固体と液体の界面での分子科学
(Molecular Science at Solid/Liquid Interfaces)
- ②界面での化学反応
(Chemical Reactions at Interfaces)

①シリカなどの固体と液体の界面での様々な化学反応は実験で直接観測することは難しいため、MDシミュレーションを使ってどのような分子構造やダイナミクスが界面での存在し、界面現象を引き起こしているかを明らかにしています。埋もれた界面での分子動力学シミュレーションと電子状態計算により界面現象を研究しています。特に分光などの実験と比較し解析することで、無機物や金属や生体系など様々な界面における微視的・分子メカニズムの解明を目指しています。

Various chemical reactions at the interface between solid and liquid, such as silica and titanium oxide, are difficult to directly observe in experiments, so using MD simulation, it is difficult to observe what molecular structure and dynamics exist at the interface, It is clarifying whether it causes interface phenomenon. We are studying interface phenomena by molecular dynamics simulation and electronic state calculation at the buried interface. In particular, by comparing with experiments such as spectroscopy, we aim to elucidate the microscopic and molecular mechanisms at various interfaces such as inorganic materials, metals and biological systems.



②化学反応中の詳細なメカニズムは、新しい高性能材料の開発、生物学的機能の解明において極めて重要です。反応動力学のその場測定は非常に難しい場合がありますが、我々はab initio電子構造計算やMDシミュレーションを用いて化学反応を分子レベルで解明することを目指しています。本研究では、理論モデリングを検証し、分子レベルのメカニズムを提供するために実験との共同研究を推進しています。

Detailed mechanisms during chemical reaction are significant to further develop new high-performance materials, to reveal biological functions etc. Whereas in situ measurement of reaction dynamics can be quite hard, electronic structure calculations can provide valuable information to elucidate the molecular mechanism such as reaction energies, electronic structure, dynamics and so on. Therefore, we aim at elucidating chemical reactions at a molecular level by ab initio electronic structure calculations and/or MD simulation. We are here collaborating with experiment groups to validate theoretical modeling and offer the molecular-level mechanism.

キーワード (Keyword)

分子動力学 (Molecular Dynamics) 界面 (Interface) 電子状態 (Electronic Structure)

専門分野 (Specialized Field)

理論化学 (Theoretical Chemistry)

共同研究可能技術 (Possible Technology of Cooperative research)

分子動力学法 (Molecular Dynamics Simulation)

関連論文・特許情報 website (Related articles・patent information)

<https://info.ibaraki.ac.jp/Profiles/104/0010400/profile.html>

研究設備 (Research Facility)

ワークステーション (Workstation)

研究室URL (Lab. URL)

<https://sites.google.com/view/theorchem/home>

E-mail

tatsuya.joutsuka.joe@vc.ibaraki.ac.jp