

電子状態理論による界面反応の解明と制御



キーワード 密度汎関数理論、機械学習、有機界面、不均一触媒、電気化学

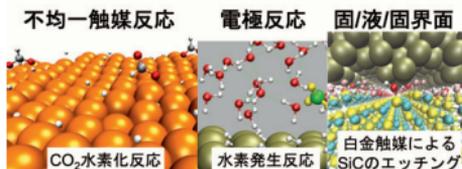
森川 良忠 MORIKAWA Yoshitada

物理学系専攻 教授
精密工学講座 計算物理領域



ここがポイント!【研究内容】

量子力学に基づく電子状態計算と統計力学的手法、機械学習法などと組み合わせたマルチスケールシミュレーションにより、物質の持つ電氣的、磁氣的、化学的性質の物理的要因を明らかにし、それに基づいてより望ましい性質を持つ物質を設計する指針を与えることを目指しています。具体的な課題としては、不均一触媒反応や電気化学反応、有機デバイスで重要な有機-金属界面など、固体表面や界面での構造や電子状態、化学反応過程の理論的解明とデザインをおこなっています。



応用分野

エネルギー、環境、有機半導体

論文・解説等

- [1] H. H. Halim and Y. Morikawa, *ACS Phys. Chem. Au*, DOI: 10.1021/acspyschemau.2c00017
- [2] T. Ota, M. Alaydrus, H. Kizaki and Y. Morikawa, *Phys. Rev. Mater.*, 6, 015801-1-12 (2022).
- [3] J. I. Enriquez, F. Muttaqien, M. Michiuchi, K. Inagaki, M. Geshi, I. Hamada, and Y. Morikawa, *Carbon*, 174, 36-51 (2021).

連絡先 URL

<http://www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp/>

