

城塚 達也 (じょうつか たつや)

所属：理工学研究科（工学系） 機能材料工学講座

専門分野： 計算科学, 触媒化学

学位：博士（理学）

所属学会：日本化学会, 分子科学会, 理論化学会, 分子シミュレーション学会
触媒学会

e-mail : joutsuka.tatsuya.zk @ehime-u.ac.jp

研究室 Web : <https://sites.google.com/view/theorchem/> (QR コード
<https://chemene.mat.ehime-u.ac.jp/> (QR コード

研究者詳細情報 (Research map) : <https://researchmap.jp/7000010065> (QR コード



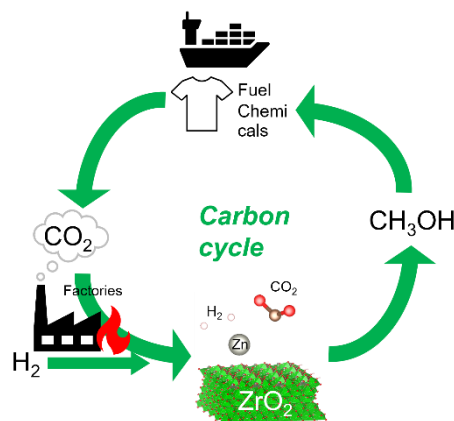
【研究・技術紹介】

新しい高性能触媒を開発するためには, 触媒反応の反応機構を原子レベルで理解することが重要です. 触媒構造などに関する実験による解析に加えて, 分子シミュレーションを用いることにより触媒の電子や原子の構造, 反応機構, ダイナミクスなどを原子レベルで明らかにすることができます. 第一原理電子状態計算などの計算科学的手法により, 触媒の構造や反応機構を原子レベルで解明することを目指しています.

テーマ 1 : CO₂ 水素化による有機物合成



CO₂ の再資源化は, 大気への CO₂ 排出を緩和するだけでなく, 燃料や多くの化学物質の原料を生成することによりエネルギー問題を解決する (右図, カーボンサイクル) ため有望です. CO₂ の再資源化技術の 1 つとして CO₂ 水素化によるメタノール合成の解析を計算科学により実施してきました. 特に, ZnZrO_x などのジルコニア (ZrO₂) 系固溶体触媒は高い活性と選択性を示すことが知られているため, この触媒の構造や反応の解析に加えて新規触媒探索を目指しています.



CO₂ 水素化によるカーボンサイクル

キーワード：触媒, 表面, 計算科学

特許・論文: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 26, 14037–14045 (2024); *J. Phys. Chem. C*, 127, 6998–7008 (2023); *ACS Catal.*, 12, 7748–7759 (2022).

社会実装について (どのような実用化につながる研究・技術であるか) :

新規触媒の探索技術.

【研究者から一言】

様々な触媒の構造や反応の解析に加えて新規触媒探索の手法開発を目指しており, 計算科学の普及にも貢献できればと思っています.