

研究タイトル:

溶液化学分野の研究



氏名:	松上 優 / MATSUGAMI Masaru	E-mail:	matsugami@kumamoto-nct.ac.jp
職名:	准教授	学位:	博士(理学)
所属学会・協会:	溶液化学研究会		
キーワード:	溶液化学、分子間相互作用、電池電解液、分子動力学シミュレーション		
技術相談 提供可能技術:	<ul style="list-style-type: none"> 各種溶液の分子動力学シミュレーション (GROMACS, LAMMPS) 電極界面と溶媒分子との相互作用の解析 電圧印加時の脱溶媒和過程の溶液構造解析 		

研究内容: アルコール-水混合溶液の ^1H NMR Chemical Shift 測定と MD シミュレーション

1. はじめに | 溶液化学とは?

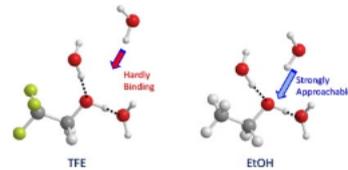
溶液中での物質のふるまいを中心に扱う化学の一分野。
溶液の熱力学、酸と塩基に代表される解離現象など、基礎的な物理化学研究のほか、化学反応における溶媒効果、**溶液中での分子構造や界面状態の解析**など他分野とも密接な関係を持つ。

2. 研究の手法 / 研究対象

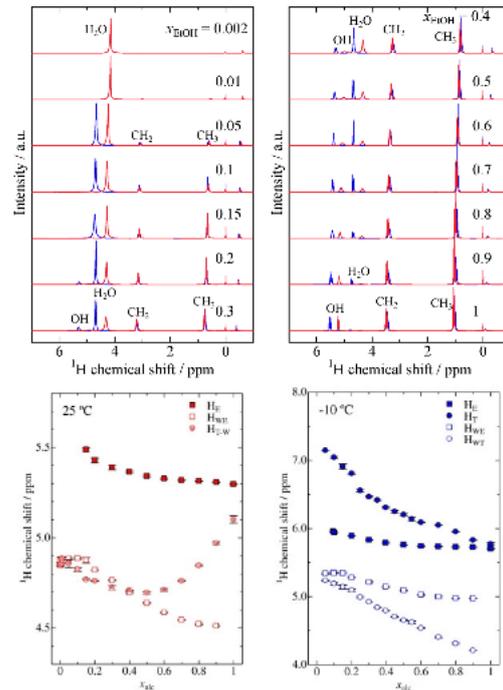
- ▶ 実験手法
 - 溶液 X 線回折測定
 - 中性子小角散乱測定
 - NMR ケミカルシフト測定

double external reference method
- ▶ 計算手法
 - Molecular Dynamics Simulation (MD)**
GROMACS/LAMMPS package
 - Reference Interaction Site Model 理論
RISM/DRISM/3D-RISM theory
- ▶ 研究対象
 - 混合溶液
 - アルコール-水混合溶液
 - ジオール-水混合溶液
 - 有機溶媒-水混合溶液
 - イオン液体
 - イミダゾリウム系イオン液体 etc.

3. 研究紹介 | 二成分混合溶液の構造



^1H NMR Chemical Shift (Double external reference method)



水とアルコールの水素結合を分離して解析

Journal of Molecular Liquids, 217, pp.3-11 (2016).

提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	