

研究タイトル:

計算化学を用いた分子の機能性評価方法の開発

氏名: 土田 裕介 / TSUCHIDA Yusuke

E-mail: tsuchida@yonago-k.ac.jp

職名: 講師

学位: 修士(工学)

所属学会・協会: 電気化学会 日本溶媒抽出学会 日本 MRS

キーワード: 電気化学測定, 分子軌道法, 密度汎関数法, 溶媒抽出, 金属資源リサイクル

技術相談

提供可能技術:

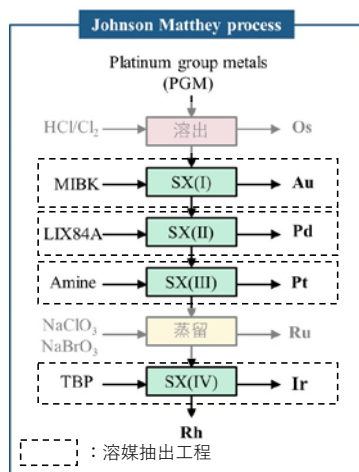
- ・分子モデリングを用いた、分子の電気化学的安定性の推定
- ・分子モデリングによるモデル分子の相互作用推定
- ・分子モデリングによる抽出剤の抽出性能予測
- ・溶媒抽出と電気化学の連動による金属回収手法の検討



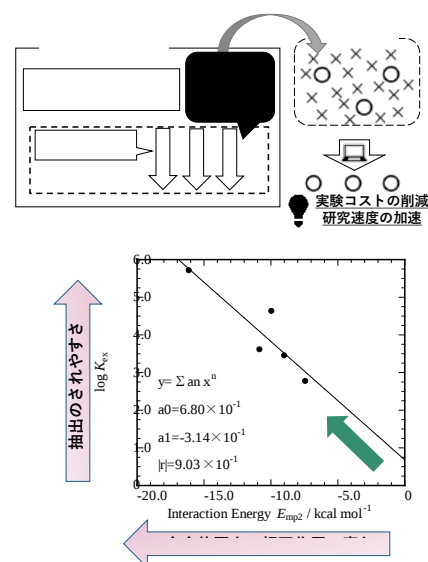
研究内容:

溶媒抽出法は金属資源リサイクルにおいて、重要な技術のひとつです。この手法は、水相と有機相における、金属錯体の安定性の差を利用して、片方の相に金属を濃縮する技術です。したがって、錯体を形成する配位子(抽出剤)設計が極めて重要な要素となります。本研究室では、抽出剤設計の指針を、計算化学によって示すことを目的としています。

現在は、金属の抽出のされやすさの指標である、抽出平衡定数(K_{ex})をなるべく正確に予測する手法を検討しています。特に現在は貴金属に着目して検討を行っており、将来的には、計算コスト(計算に必要な PC スペック)を抑えるための検討を併せて実施し、なるべく簡単な回帰式を提供することを目指しています。



既存プロセスにおける金属分離工程では、溶媒抽出が多くを占める。
→ 溶媒抽出の最適化が重要



担当科目	【本科】化学Ⅰ, 化学Ⅱ, 生化学Ⅱ, 生化学・微生物学基礎実験 【専攻科】バイオテクノロジー
過去の実績	【科研費採択・代表】研究活動スタート支援 2022-2023 【研究助成金・代表】令和3年度 加藤財団研究奨励費
近年の業績 (研究・教育論文、特許含む)	M. Matsumiya, Y. Tsuchida et al <i>J. Electrochem. Soc.</i> 168 (2021) 076508. M. Matsumiya, D. Nomizu, Y. Tsuchida et al <i>Solvent Extr. Ion Exch.</i> 39(7) (2021) 764-784. D. Nomizu, Y. Tsuchida et al <i>J. Mol. Liq.</i> 318(15) (2020) 1-5. Y. Sasaki, M. Matsumiya, Y. Tsuchida <i>Anal. Sci.</i> 36(11) (2020) 1303-1309 Y. Tsuchida et al <i>J. Mol. Liq.</i> 274 (2019) 204-208 Y. Tsuchida et al <i>J. Mol. Liq.</i> 274 (2019) 455-460. Y. Tsuchida et al <i>J. Mol. Liq.</i> 269 (2018) 8-13.

提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)

GAUSSIAN(量子化学計算ソフトウェア)

pH メータ