

大戸達彦（おおとたつひこ）

【研究課題名】第一原理分子動力学法による界面のシミュレーション



大阪大学大学院 基礎工学研究科 助教

【E-mail】 ohto@molectronics.jp

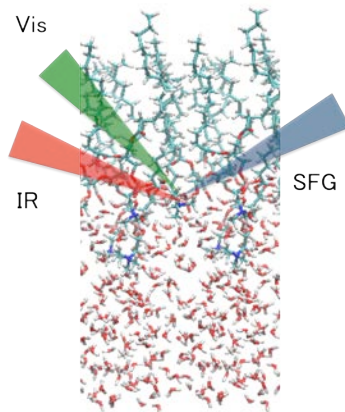
【専門】理論化学

【キーワード】表面・界面、分子エレクトロニクス

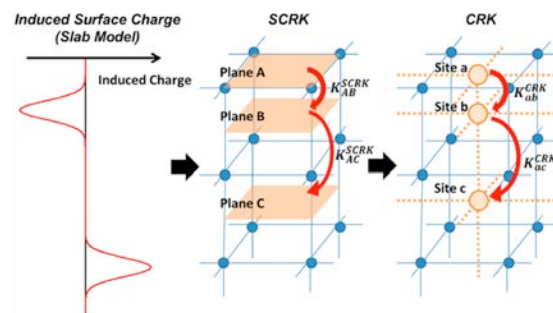
第一原理計算を駆使して、従来の古典力場による取り扱いが難しい系の構造やダイナミクスを解明します。実験との協働により、分子系の新しい機能発現を目指します。

〈研究グループアクティビティー〉

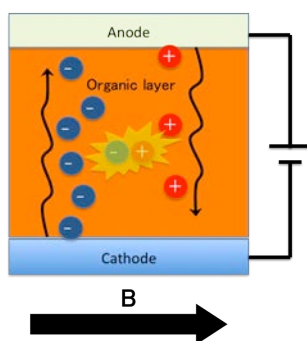
第一原理分子動力学法による
和周波分光スペクトル計算



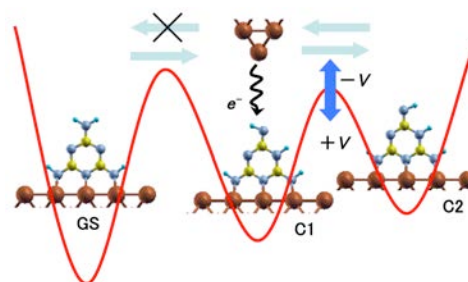
第一原理計算を基に構築した
分極力場による固液界面の計算



有機分子を用いたスイッチング
デバイスの創出



単分子スイッチの理論



Tatsuhiko OHTO

【Research Subject】 *Ab Initio* Molecular Dynamics Simulation of Interfaces



Research Associate

Graduate School of Engineering Science

Osaka University

【E-mail】 ohto@molelectronics.jp

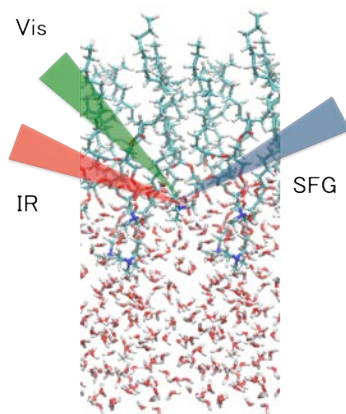
【Speciality】 Theoretical Chemistry

【Keywords】 Surface and interface, molecular electronics

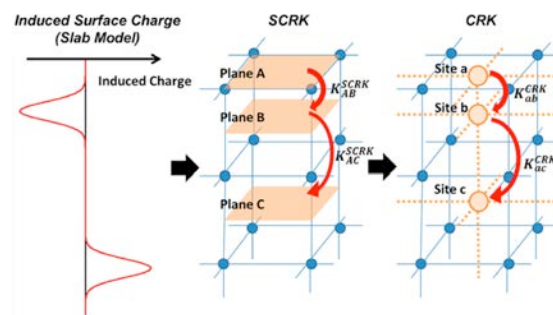
We reveal the structure and dynamics of systems, which force field models cannot describe properly, with the aid of first-principles calculations. We also develop organic materials having novel functions in collaboration with experiments.

Research Group Activity

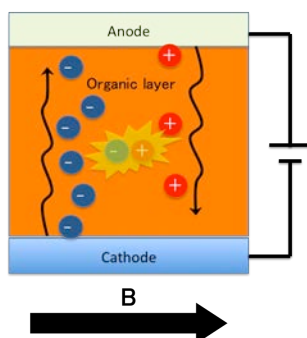
Ab initio SFG spectroscopy



Study of solid-liquid interfaces using polarizable force fields based on first-principles calculations



Development of organic switching devices



Ab initio theory for molecular switching

