氏名： 森　寛敏（MORI Hirotoshi）
所属： お茶大アカデミック・プロダクション
職名： 特任助教
学位： 博士（工学）
専門分野： 理論化学／ Theoretical Chemistry、計算化学／ Computational Chemistry
量子化学／ Quantum Chemistry
URL： http://homepage.mac.com/qc_forest/index.html
E-mail： mori.hirotoshi@ocha.ac.jp

◆研究キーワード　／　Keywords

モデル内殻ポテンシャル法／フラグメント分子軌道法／重元素含有ナノ・バイオ系／
大規模相対論的量子化学計算
model core potential ／ fragment molecular orbital method ／ biomolecules containing heavy elements ／
relativistic quantum chemical calculation

◆主要業績　　総数（9）件

・Mori H., Takeshita K, Miyoshi E., Ohta N,  Theoretical Quest for Photoconversion Molecules having Opposite Directions of the Electric Dipole Moment in the S0 and S1 states,  J. Chem. Phys., (2009) in press.
・Zeng T., Mori H., Miyoshi E., Klobukowski M, Calibration of New Model Core Potentials for Main Group Elements,  Int. J. Quantum Chem., (2009) in press.
・Mon M S, Mori H., Miyoshi E., Theoretical study of low-lying electronic states of Mn2 using a newly developed relativistic model core potential,  Chem. Phys. Lett, 462, 23-26 (2008).
・Osanai Y., Soejima E., Noro T, Mori H., Mon M S, Klobukowski M, Miyoshi E., Revised Model Core Potentials for Second Row Transition Metal Atoms from Y to Cd,  Chem. Phys. Lett., 463, 230-234 (2008).
・Osanai Y., Ma San Mon, Noro T, Mori H., Nakashima H, Klobukowski M, Miyoshi E., Revised Model Core Potentials for First Row Transition Metal Atoms from Sc to Zn Chem. Phys. Lett., 452, 210-214 (2008).

◆研究内容　／　Research Pursuits

量子化学分野では、近年、フラグメント分子軌道（FMO）法に代表されるスケーラブル分子軌道理論の台頭により、軽元素のみからなる分子であれば、数千 〜 数万原子からなる生体大規模系をまるごと取り扱った ab initio 分子軌道計算が可能になりつつある．しかし、生体系の多様な機能発現機構を理解するためには、多くの生体分子において中心的な役割を演じている「遷移金属元素」の役割を分子レベルで明らかにすることが不可欠となる．本研究室では、大規模系を志向した、現代量子化学において未だ困難な課題となっている「遷移金属元素を含有した生化学・機能性ナノ物質の大規模相対論的量子化学計算」に挑戦している．

With recent development of fragment molecular orbital (FMO) method, it is gradually being possible to perform large-scale quantum chemical calculation of very large molecules like protein, DNA, and so on. However, large-scale quantum chemical calculation containing heavy elements (transition metals) is still difficult, since we have to treat two big problems, electron-electron correlation and relativistic effects at the same time even in such a big system. Meanwhile, in my laboratory, we' ve ever focused on relatively small molecules and developed a relativistic quantum chemical theory named model core potential (MCP) to overcome these two problems in molecules containing heavy elements. With these backgrounds, now, we' re trying to expand MCP and develop large-scale relativistic quantum chemistry.

◆教育内容　／　Educational Pursuits

平成 20 年度は、理学部化学科の 2 年生を対象として、コンピューター実習を交えた講義「計算化学」を開講した。量子化学計算プログラム MOPAC を使用し、量子化学計算がどのように現代化学の発展に役立つのか、基礎理論と応用計算の双方の立場からの解説を行った。

◆研究計画

モデル内殻ポテンシャル（MCP）法を基盤に、電子相関・相対論効果を同時に精度良く取り扱った非経験的分子軌道計算手法の確立を目指す。具体的には、MCP 法と、大規模分子軌道理論、フラグメント分子軌道法の連動法、およびそのエネルギー勾配法（MCP/FMOgrd）の開発、MCP 法を用いた振動数解析実行・遷移構造探索のための、MCP エネルギー二次微分（MCPhss）の開発を計画している。来年度は、開発したプログラムを応用し、リアルな化学系の問題を紐解いていくことに着手したい。1．各種金属錯体、金属クラスターなどの化学反応性に関する理論的研究、2．金属含有蛋白質の電子状態に関する理論研究、「金属含有ナノ・バイオ系」に関するこれらのテーマについて、理論 + 実験のタイアップによる共同研究が展開できれば、と考えている。