

氏名： 森 寛敏
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）／ Ph D
専門分野： 理論計算化学・量子化学
E-mail： mori.hirotoshi@ocha.ac.jp
URL： http://web.me.com/qc_forest/SimulationScienceLab/Home.html

◆研究キーワード / Keywords

分子シミュレーション／相対論的分子軌道法／分子動力学法／機能性分子／金属含有ナノ・バイオ系
Molecular Simulation / Relativistic Molecular Orbital Calculation / Molecular Dynamics /
Functional & Bio-molecules / Metals

◆主要業績

総数（5）件

- Fujiwara T., Mori H., Mochizuki Y., Tatewaki H., Miyoshi E.,
Theoretical study of hydration models of trivalent rare-earth ions using model core potentials,
THEOCHEM, 949, 28-35 (2010).
- Fujiwara T., Mochizuki Y., Komeiji Y., Okiyama Y., Mori H., Miyoshi E.,
Fragment-Molecular Orbital based molecular dynamics (FMO-MD) simulations on hydrated Zn(II) ion,
Chem. Phys. Lett., 490, 41-45 (2010).
- Mori H., Ueno-Noto K., Osanai Y., Noro T., Fujiwara T., Klobukowski M., Miyoshi E.,
Revised Model Core Potentials for Third Row Transition Metal Atoms from Hf to Hg,
Chem. Phys. Lett., 476, 317-322 (2009).
- Tsukamoto S., Mori H., Tatewaki H., Miyoshi E.,
CASSCF and CASPT2 Calculations for Lanthanide Trihalides LnX₃ using Model Core Potentials,
Chem. Phys. Lett., 474, 28-32 (2009).
- 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., 130, 184311-1-6 (2009).

◆研究内容 / Research Pursuits

近年、ナノテク分野，生命科学・創薬分野などの最先端科学分野で，コンピューターを利用した分子シミュレーションに基づく理論分子科学への期待が高まっています。分子科学の究極目標は，分子を電子レベルで統一理解し，分子構造・分子物性（分子機能）・化学反応を自在にデザイン・設計することです。本研究室では，量子力学に基づき精密に化学現象を予測することのできる分子軌道計算と，フラスコや生体内での分子揺らぎを考慮できる分子動力学計算を駆使し，理論的立場から実験を行うこと無く，機能材料の理論設計や生体分子の機能解析を実施しています。

By developing relativistic quantum chemical methods and using molecular dynamics technique, we' re designing functional materials and studying functions of bio-molecules containing metal elements. We' re tackling the complicated (but interesting & important) metal-chemistry from theoretical point of view.

◆教育内容 / Educational Pursuits

理学部化学科・大学院人間文化創成科学研究科にて、計算化学・量子化学・計算化学特論，理学総論を担当した。
また，オムニバス形式講義，統合バイオインフォマティクス特論にて，現代計算化学事情についても紹介した。

◆研究計画

相対論的分子シミュレーションにより，金属が関わる「工学」「生化学」を展開します（図参照）。