

森 寛敏 / MORI, Hirotochi

アカデミック・プロダクション

お茶大アカデミック・プロダクション / シミュレーション科学分野

http://web.me.com/qc\_forest/SimulationScienceLab/Home.html

■ 研究者情報

連絡先

Email: mori.hirotochi@ocha.ac.jp / TEL: 03-5978-5068

専門分野

理論計算化学、量子化学、分子科学

■ 研究成果情報

## 大規模分子シミュレーション技術の開発とその工学・生化学への応用

### キーワード

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, 生体分子, 金属含有ナノ・バイオ系

### 研究内容

■ 概要 (背景・目的・内容)

量子力学に基づき精密に化学現象を予測できる「相対論的分子軌道法」を開発, 更に, 分子揺らぎを考慮できる「分子動力学法」を駆使することで, 金属を含む機能材料や生体分子の機能解析を行っています。金属が生む化学機能に, 理論的に迫ります。

■ 研究事例

- 1) 周期表上の全元素を統一的に取り扱える相対論的量子化学理論の開発
- 2) 第一原理分子動力学法によるレアメタル選択抽出キレート剤の理論設計
- 3) 第一原理分子動力学法による白金系抗がん剤の抗腫瘍活性発現に関する理論的研究

物質の性質は電子の振る舞いで決まる!

様々な化学現象を...

$$H\Psi = E\Psi$$

色・反応性・磁性 etc...

理論的に説明・予測!

シミュレーティング方程式を解くことにより, 様々な化学現象を理論的に説明・予測する!

コンピュータを利用した理論計算

## 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!

金属の電子状態は相対論効果により支配

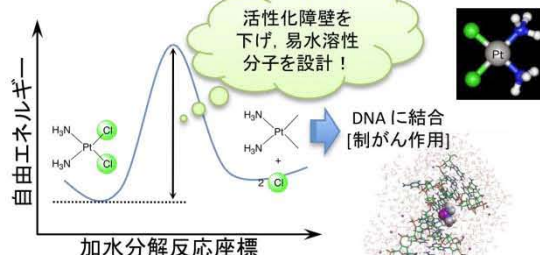
抽出!

レアメタル抽出剤は溶媒中で揺らぐ!

どんなキレート剤が良い? 分子構造・配位原子を理論設計

### 工学的展開例

レアメタル選択的抽出剤の設計



### 生化学的展開例

白金系抗がん剤の水溶性評価

特許・著作物等の知財情報、製品化情報、あるいは社会貢献実績

・量子化学計算ソフト「ABINIT-MPX」「GAMESS」上に相対論的分子軌道計算法・モデル内殻ポテンシャル(MCP)法を無償公開  
・レアメタル・希少金属リサイクル技術の最先端: 第6章「計算科学によるレアメタル抽出錯体設計の課題」(フロンティア出版: ISBN978-4-902410-22-8 C3057) 執筆

産学官・社会連携の可能性

■ 技術提供/知見の教授・共有/共同研究

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。分子シミュレーションに基づく理論的分子設計技術の提供・共同研究が可能です。