

森 聖治 (Seiji MORI)

所属 (Domain) 理学野化学領域 (Domain of Chemistry)

・ 博士後期課程量子線科学専攻 (Major in Quantum Beam Science)

● 研究テーマ (Research theme)

① 選択的分子変換反応の理論的研究

(Theoretical Studies on Selective Molecular Transformation Reactions)

② QM/MM法を用いた酵素反応機構の研究

(Mechanistic Insights into Enzymatic Reactions with the Aid of QM/MM methods)

③ 金属錯体の構造と反応性

(Structures and Reactivities of Metal Complexes)

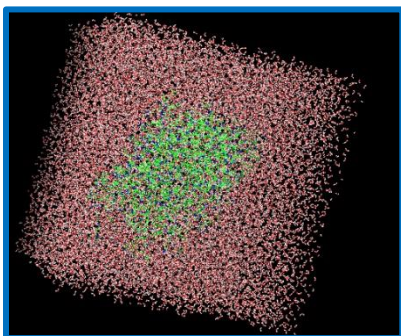
当研究室では、有機・無機、生化学を問わず化学反応のコンピュータシミュレーションに基づいた研究を行っています。原子核、電子レベルの深いところから化学現象を理解することが特徴です。

Our research interests span from organic, inorganic, and biological reactions by using the state-of-the-art molecular simulations to understand chemical phenomena from the view of quantum, nuclear and electronic levels. This research will be a key part of rational designs of highly functional chemicals/materials such as drugs and catalysis.

① 金属触媒の複雑な選択的反応経路探索を、量子化学計算や反応経路のビックデータ解析などを駆使しながら行っている。

Exploration of pathways in complexed metal-catalyzed selective reactions, for example, Nobel-prize awarded Rh-catalyzed isomerizations of allylic amines, by using quantum chemical

calculations and big data analyses. (Chem. Asian J. 2006, Chem. Eur. J. 2013, Angew. Chem. Int. Ed. 2000: 2001: 2005, Chem. Eur. J. 2009, J. Am. Chem. Soc. 2012, 2014, 2017, Dalton Trans. 2014, 2016, Chem. Sci. 2017, 2018, J. Comput. Chem. 2019, etc.)

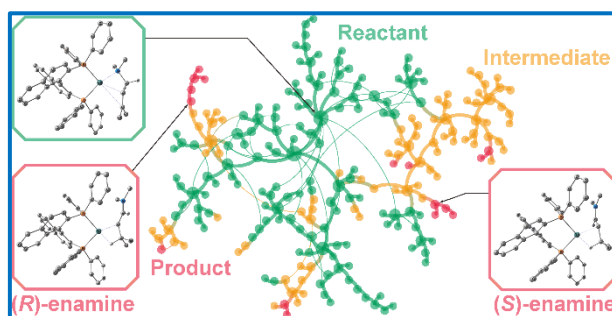


② 炎症作用、睡眠の原因および血小板凝集作用や心筋梗塞の原因物質とされているプロスタグランジン類の生合成反応、シトクロムP450の反応やビリベルジン還元酵素反応の機構解明

Reaction mechanisms on biosynthesis of prostaglandins which play a key role of allergic inflammations, sleep, cytochrome P450 catalyzed reactions, and bilin reductase-catalyzed reactions. (Chem. Asian J. 2008: Chem. Eur. J. 2009: J. Inorg. Biochem. 2010, Theor. Chem. Acc. 2011; ChemPhysChem 2018)

③ 金属錯体の構造、反応および電子状態解析、配位子との相互作用に関する実験との共同研究

Structures and reactivities of metal complexes, and interactions between metal and ligands. Close collaborations with experimental chemists. (Talanta 2009, 2016, Theor. Chem. Acc. 2011, Inorg. Chem. 2014)



キーワード (Keywords)

専門分野 (Specialized Field)

共同研究可能技術 (Possible Technology of Cooperative research)

関連論文・特許情報 website

(Related articles・patent information)

研究設備 (Research Facility)

研究室URL (Lab. URL)

E-mail

量子化学計算 (Quantum chemical calculations) 化学反応機構 (Reaction mechanisms) 酵素反応 (Enzymatic reactions)

計算化学 (Computational Chemistry)

均一系触媒の合理的設計

(Rational design of homogeneous catalysis)

<https://info.ibaraki.ac.jp/Profiles/5/0000478/profile.html>

計算機サーバー (Computer servers running in Linux OS)

<http://smori.sci.ibaraki.ac.jp> (日本語 & English pages)

seiji.mori.compchem@vc.ibaraki.ac.jp