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）

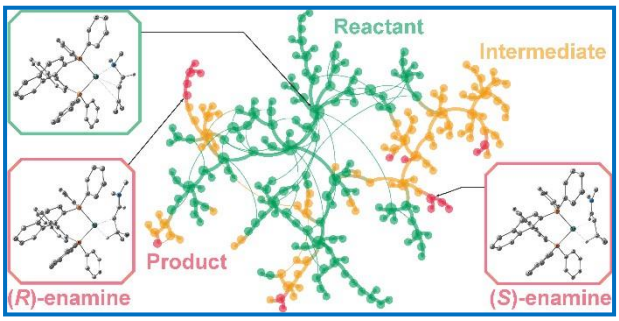
①選択的分子変換反応の理論的研究
（Theoretical Studies on Selective Molecular Transformation Reactions）

②QM/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）

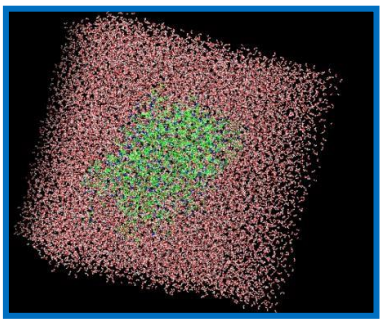
当研究室では、有機・無機，生化学を問わず化学反応のコンピュータシミュレーションに基づいた研究を行っています。原子核、電子レベルの深いところから化学現象を理解することが特徴です.

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 触媒の複雑な選択的分子変換反応経路探索：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

Exploration of pathways in complexed catalytic selective reactions, for example, Nobel-prize awarded Rh-catalyzed isomerizations of allylic amines, by using quantum chemical calculations and big data analysis. (Chem. Asian J. 2006, Chem. Eur. J. 2013, Chem. Eur. J. 2009, J. Am. Chem. Soc. 2012, 2014, 2017, Dalton Trans. 2014, 2016, Chem. Sci. 2017, 2018, Org. Lett. 2021, J. Org. Chem. 2020, 2021, 2022, J. Comput. Chem. 2019, Adv. Syn. Cat. 2020, ACS Catalysis 2020 and 2021, 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 reductase-catalyzed reactions. (Chem. Asian J. 2008: Chem. Eur. J. 2009: J. Inorg. Biochem. 2010, Theor. Chem. Acc. 2011; ChemPhysChem 2018; J. Phys. Chem. B. 2021; J. Chem. Phys. 2021; J. Biol. Chem. 2023）

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や有機化合物の異性化や絶対立体配置に関する実験との共同研究

Structures and reactivities of metal complexes/organic compounds, and interactions between metal and ligands. Close collaborations with experimental chemists. （Talanta 2009, 2016, Theor. Chem. Acc. 2011, Inorg. Chem. 2014, Chem. Commun. 2022, Bull. Chem. Soc. Jpn, 2021, Phytochemistry 2022, etc.）

キーワード（Keywords）	量子化学計算（Quantum chemical calculations）化学反応機構 （Reaction mechanisms） 金属触媒(metal catalysis) 酵素反応 （Enzymatic reactions）
専門分野（Specialized Field）	計算化学（Computational Chemistry）
共同研究可能技術（Possible Technology of Cooperative research）	均一系触媒の合理的設計 （Rational design of homogeneous catalysis）
関連論文・特許情報 website （Related articles･patent information）	https://info.ibaraki.ac.jp/Profiles/5/0000478/profile.html
研究設備（Research Facility）	計算機サーバー(Computer servers running in Linux OS)
研究室URL（Lab. URL）	http://smori.sci.ibaraki.ac.jp（日本語＆English pages）
E-mail	seiji.mori.compchem@vc.ibaraki.ac.jp