

## 生体分子や有機分子の反応機構に関する理論的研究

## ◆キーワード

量子化学計算、タンパク質の構造予測

## ◆産業界の相談に対応できる分野

分子設計、反応設計

理学部理学科 教授

森 聖治

URL <http://www.ipc.ibaraki.ac.jp/~smori>e-mail [smori@mx.ibaraki.ac.jp](mailto:smori@mx.ibaraki.ac.jp)一言  
アピール

本研究は、化学反応のメカニズムをコンピュータを用いて解明するものです。

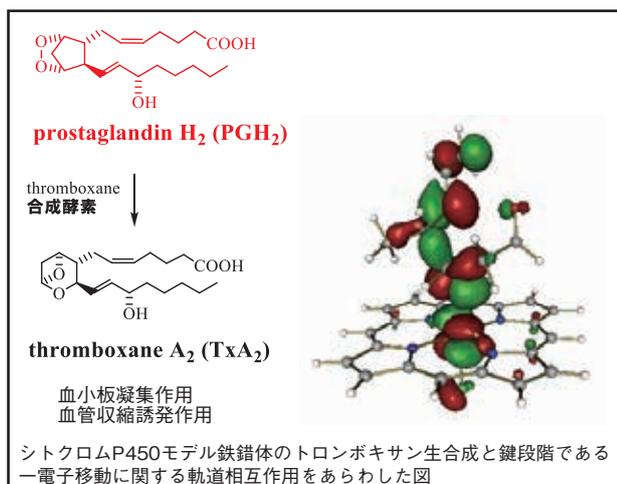
## 研究概要

理学部森研究室では、物理化学の原理にもとづき、有機分子や生体分子の構造と性質、反応の理論解析を行っております。

## I. 生体内、環境中の分子の機能と反応に関する研究

1. 生体分子と金属との相互作用に関する研究、金属イオンの生体内での役割の解明、医学、薬学につながる今後の金属選択的配位子の設計をも志向しています。
2. プロスタグランジン類など生理活性物質の生体内での反応機構に関する研究

ヘム酵素であるシトクロムP450による生理活性物質の生合成反応機構は、農学的、薬学的に重要であるにもかかわらず不明な点が多い、当研究室では、これらの未知な反応機構の解明を行っています。

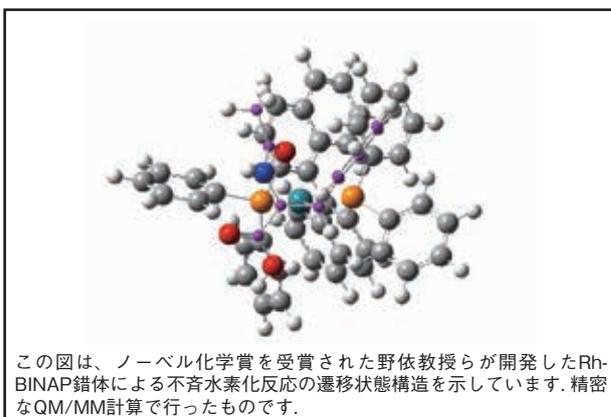


## II. 欲しい有機化合物だけをつくる反応のメカニズム

- ★ひずみのある環状有機化合物の開環反応による選択性
  - ★金属触媒による有機化合物の環生成反応機構
  - ★光学活性有機（金属）反応の解明と設計
- これらの反応機構の詳細な解明により、今後の合成反応の設計に役立てることが期待されます。

## 参考文献・著書等

- ・野内哲也、森 聖治, Chem. Asian J. 3, 1900-1911 (2008).
- ・森 聖治, Thom Vreven, 諸熊奎治, Chem. Asian J. 1, 391-403 (2006).
- ・森 聖治, 新藤 充, Org. Lett., 6, 3945 (2004).
- ・第5版 実験化学講座, 「計算化学」, 丸善 (2004). [分担執筆]
- ・「量子物理化学入門」, 三共出版, 2007年4月 (分担執筆).

何に  
使える？

反応機構の解明によって、選択的な触媒の設計、新薬の設計に利用できます。