

森田明弘（もりたあきひろ）

【研究課題名】 溶液・高分子系界面の構造および機能の理論解析



東北大学大学院理学研究科化学専攻 教授

【E-mail】 morita@m.tohoku.ac.jp

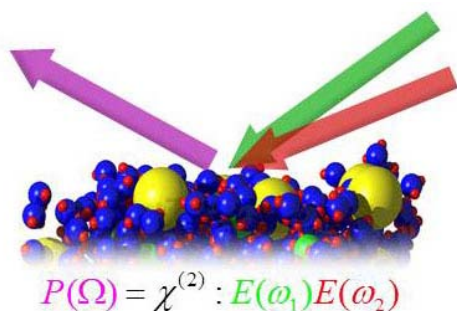
【専門】 凝集系の理論化学、計算分子科学

【キーワード】 分子シミュレーション、電子状態、界面、和周波分光

液体のような柔らかく動的な界面での化学を、電子状態および分子シミュレーションを用いてリアルに解明します。分光計測との共同研究にも強みを持ち、新たな共同研究の領域を開拓します。

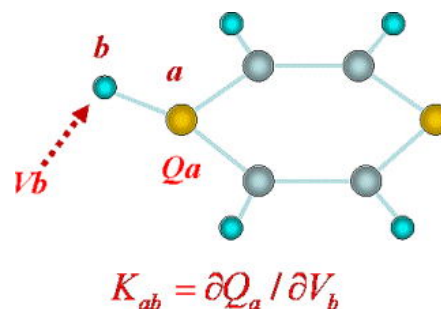
〈研究グループアクティビティー〉

和周波発生分光の理論計算



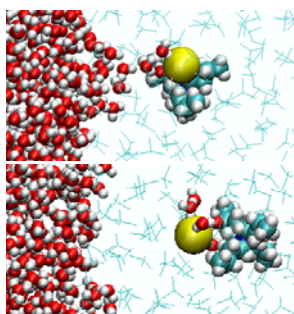
界面分光理論の開発と分光実験の共同

電子分極と分子モデリング



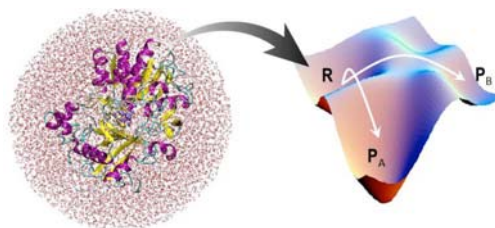
電子ゆらぎを含めた精密な分子モデリング理論の開発とシミュレーションへの応用

界面物質移動と界面反応



界面物質移動と構造ゆらぎのマイクロな解明

溶液反応の自由エネルギー計算



新たな QM/MM 法の開発に基づく自由エネルギーの高速計算

Akihiro MORITA

【Research Subject】 Theory of Structure and Functions of Liquid and Polymer Interfaces



Professor

Department of Chemistry, Tohoku University

【E-mail】 morita@m.tohoku.ac.jp

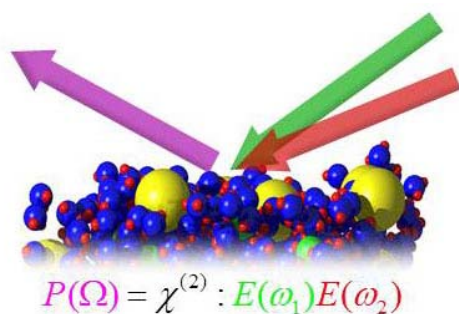
【Speciality】 Computational Chemistry of Liquids and Liquid Interfaces

【Keywords】 molecular simulation, electronic structure, interfaces, sum frequency generation (SFG) spectroscopy

We explore realistic chemical phenomena at soft and dynamic interfaces of liquids and polymers by close collaboration with experimental spectroscopy.

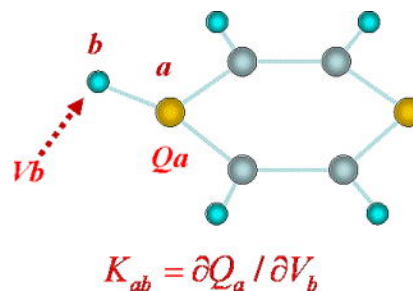
Research Group Activity

Theory of SFG spectroscopy



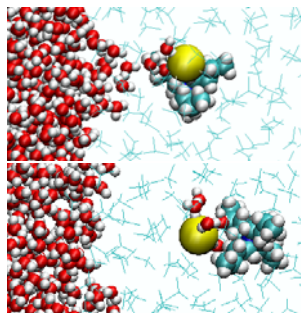
detailed and reliable analysis

Molecular modeling for electronic polarization



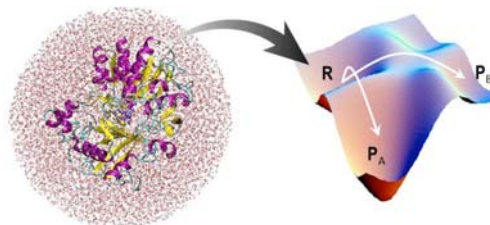
Charge Response Kernel

Interfacial mass transfer and reactions



coupling to structural fluctuation

Free energy calculation for reactions in solutions



efficient QM/MM method