

AI for Science に向けた量子化学活用事始め

機能性色素および CO₂ 吸収液の設計を例として

森 寛敏

中央大学理工学術院 教授
基幹理工学部 応用化学科 理論化学研究室

2026 年 9 月 9 日 | 次世代 CCWG

この講習会の位置づけ

この講習会は、量子化学計算の理論や計算手法をすべて網羅することを目的としていません。

今日の目標

TmoleX と COSMOthermX を実際に操作し、「どのようなことができるか」を体験することです。

数式や計算手法は、操作の意味と得られる結果を理解するために、必要な範囲に絞って説明します。

今日お伝えしたいこと

量子化学計算は、分子の性質を説明するだけでなく、材料候補を選ぶための数値を与えます。

二つの事例

CO₂ をよく吸収する液体を探す

色が変わる分子の電子状態を調べる

分子計算を材料設計につなぐ流れ

分子構造 → 電子状態 → 物性値 → 候補選定

人が決めること

何を良い材料と考えるか
どの精度と計算時間を選ぶか

計算が助けること

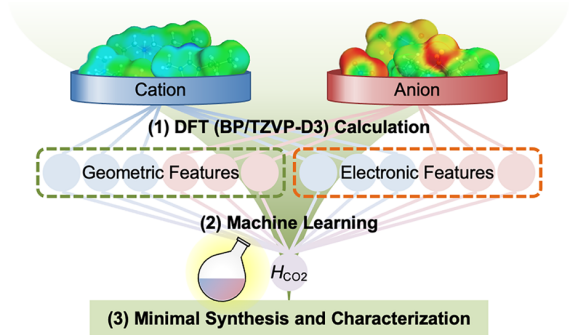
実験前に多数の候補を比べる
性質を電子レベルから解釈する

事例 1 : CO₂ 吸収液の探索

候補が多すぎる

カチオンとアニオンの組合せにより、イオン液体の候補数は急増します。

全候補を合成する前に、計算で優先順位を付けます。



出典 : Kuroki et al., J. Phys. Chem. B 2023, 127, 2022–2027, Fig. 1. CC BY-NC-ND 4.0

COSMO-RS：表面電荷分布から熱力学物性へ

1. 電子密度から COSMO 表面へ

量子化学計算で、分子の量子的な電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ を求めます。電子密度と原子核が作る電場に応答して、仮想的な完全導体との境界面に表面電荷密度 σ が誘起されます。

2. σ -profile

三次元の COSMO 表面を、各 σ 値をもつ表面積がどれだけ存在するかという一次元分布 $p_i(\sigma)$ に変換します。

計算の流れ

電子密度 $\rho(\mathbf{r}) \rightarrow$ 表面電荷密度 $\sigma \rightarrow \sigma$ -profile $p_i(\sigma) \rightarrow$ 化学ポテンシャル $\rightarrow$ 熱力学物性
 σ -profile は電子密度そのものではなく、電子状態を COSMO 表面の表面電荷として写像し、表面積について集計した分布です。

3. 表面間相互作用

静電的 misfit、水素結合、van der Waals 相互作用を統計熱力学で評価します。

4. 化学ポテンシャル

溶媒中と純物質中の化学ポテンシャル差から活量係数を求めます。

COSMO-RS：式の各項は何を表すか

分子表面を積分して化学ポテンシャルを得る

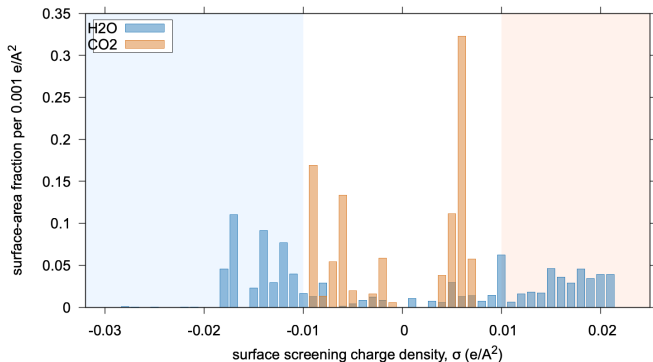
$$\mu_i^S = \mu_i^{C,S} + \int p_i(\sigma) \mu_S(\sigma) d\sigma \quad (6)$$

- ▶ i ：対象とする化学種（成分）
- ▶ S ：溶液または混合系
- ▶ μ_i^S ：系 S 中の成分 i の部分モル Gibbs エネルギーに対応する擬化学ポテンシャル
- ▶ $\mu_i^{C,S}$ ：系 S 中の成分 i の組合せ寄与（分子の大きさや形の補正）
- ▶ σ ：COSMO 表面の表面電荷密度
- ▶ $p_i(\sigma)$ ：成分 i の非規格化 σ -profile（極性 σ をもつ表面積の分布）
- ▶ $\mu_S(\sigma)$ ：系 S が極性 σ の表面を受け入れる親和性を表す σ -potential
- ▶ $d\sigma$ ：表面極性について積分する微小区間

純物質を基準として活量係数へ変換する

$$\gamma_i^S = \exp\left(\frac{\mu_i^S - \mu_i^i}{RT}\right) \quad (7)$$

σ 分布の実例：H₂O と CO₂



H₂O

$\sigma = -0.0284$ から 0.0211 まで広がります。負側は水素結合供与表面、正側は受容表面に対応します。

CO₂

$\sigma = -0.00949$ から 0.00662 に集中し、H₂O より狭い分布です。

分布の重なり方が、溶質と溶媒の親和性を左右します。

出典：BP-TZVP COSMO files supplied with COSMOtherm 2021. Surface-area-weighted segment histogram, bin width 0.001 $e/\text{\AA}^2$; a qualitative representation before COSMOtherm profile smoothing.

イオン液体を二つのイオンとして扱う

実験での見方

[P66614][PFOS] を一つのイオン液体成分として扱います。

COSMOtherm での見方

カチオンとアニオンを独立した成分からなる電氣的に中性な混合物として扱います。

1:1 イオン液体の組成

$$x_{\text{cation}} = x_{\text{anion}} = 0.5$$

PFOS 系：P66614 = 0.5、PFOS = 0.5

TFSA 系：P66614 = 0.5、TFSA = 0.5

実験値と比較するための換算

イオンを別成分とする組成定義は実験の一成分 IL という定義と異なります。
IL_SCREENING は laboratory-binary 定義へ換算した無限希釈容量を出力します。

COSMOthermX : GUI で物性計算を組み立てる

The screenshot shows the COSMOthermX GUI with the 'Properties' tab selected. The 'New Property' button is active, and the 'Mixture' dropdown is open. The 'Temperature' section shows '25.0' °C and '10.0' °C for '2nd Temp'. The 'Liquid phase composition' section has 'Mole fraction' selected. Below it, a table lists components: '1. h2o' and '2. 1-butanol', each with a checkbox, a value of '0.0', and a slider. At the bottom, there are buttons for 'Load List', 'Modify', 'Add', 'Delete Selected', 'Clear All', 'Save As', 'Run Job (local)', and 'Run Job (network)'.

上側

温度、組成、物性ごとの条件を入力します。

Add

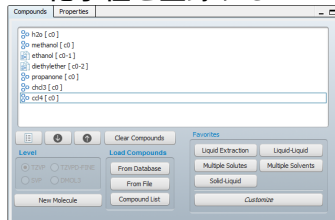
設定した計算を下側のジョブ一覧へ追加します。

Run Job

内容を確認して計算を実行します。終了後、出力と結果表が開きます。

COSMOthermX：化学種の登録から結果表まで

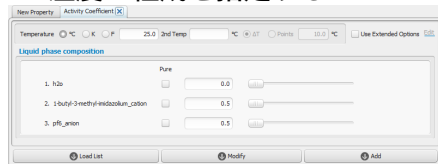
1. 化学種を登録する



データベース

または.cosmo ファイルから、溶質と溶媒成分を選びます。

2. 温度と組成を指定する



3. 結果表を読む

(1) IL_gamma.tab		
Nr	Compound	ln(gamma)
1	h2o	2.39760443
2	1-butyl-3-methyl-imidazolium_cation	0.000000E00
3	pf6_anion	0.000000E00

演習 1 で体験する範囲

準備済みの CO₂、P66614、PFOS、TFSA の .cosmo ファイルを登録し、温度とイオン組成を指定して、二つの候補を同じ条件で比較します。

COSMOtherm で計算できる熱力学物性

溶液中の親和性

活量係数、化学ポテンシャル、ヘンリー定数、気体溶解度、固体・液体の溶解度、分配係数 ($\log P / \log D$)

相平衡

気液平衡 (VLE)、液液平衡 (LLE)、固液平衡 (SLE)、混和性、液液抽出

純物質・混合物の物性

蒸気圧、沸点、密度、粘度、界面張力

その他の応用

溶媒スクリーニング、反応平衡、 pK_a 、イオン液体・ポリマー・膜系の物性評価

この講習会で扱う一例

JPCB 論文では、これらのうち CO_2 のヘンリー定数 H_{CO_2} を候補比較の目的物性として用いました。演習 1 では、同じ溶けやすさを別の見方で表す相対容量も確認します。計算できる項目と精度は、使用する parameterization、入力データ、対象系に依存します。

演習 1：二つのイオン液体を比較する

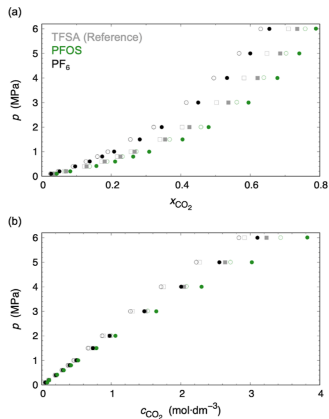
1. CO₂、P66614、PFOS、TFSA の .cosmo ファイルを登録する
2. 温度を 25 °C、溶質を CO₂ に設定する
3. IL_SCREENING で [P66614][PFOS] と [P66614][TFSA] を計算する
4. 結果表の Capacity_rel を記録し、順位を答える

実行前の予想

PFOS 系と TFSA 系のどちらが CO₂ を吸収しやすいでしょうか。

使用条件：BP-TZVP-COSMO parameterization、c0 配座のみ、298.15 K

選んだ候補の物性を実験で検証した例



計算による順位を測定で確認

機械学習で選んだ PFOS 系、PF₆ 系と参照物質 TFSA 系について、CO₂ 溶解度を測定しました。

Fig. 3 では、圧力に対するモル分率およびモル濃度を比較しています。

出典：Kuroki et al., J. Phys. Chem. B 2023, 127, 2022–2027, Fig. 3. CC BY-NC-ND 4.0

演習 1：結果の読み方と限界

[P66614][PFOS]

Capacity_rel = 6.5285

論文の予測 H_{CO_2} : 2.78 MPa

[P66614][TFSA]

Capacity_rel = 6.0114

論文の予測 H_{CO_2} : 3.06 MPa

演習値と論文値は役割が異なる

Capacity_rel は無限希釈活量係数の逆数 $1/\gamma^\infty$ 。大きい方が高容量です。ヘンリー定数は別の物性で、小さい方が溶けやすいことを示します。

演習では GUI 操作と順位の読み方を体験するために Capacity_rel を使います。論文の目的物性は H_{CO_2} です。二種類の数値を直接比較しません。

σ -moment : 表面電荷分布を数値に要約する

COSMOtherm Reference Manual の定義

$$M_k^X = \int p_X(\sigma) f_k(\sigma) d\sigma, \quad f_k(\sigma) = \sigma^k$$

式の意味

化学種 X の σ -profile $p_X(\sigma)$ に σ^k を掛けて積分します。高次の moment ほど、表面電荷密度の大きな領域を強く反映します。

M_0 : 分子表面積 M_1 : 全電荷の負値

電子状態を表す記述子

M_2 : 表面電荷の大きさに関係

M_3 : σ -profile の非対称性に関係

M_4 以降 : 分布の裾にある強い極性領域をより強調

水素結合供与部位と受容部位には、別に HB-moment を定義します。

演習ファイルでの確認場所

COSMOtherm 出力の Sigma moments (1--6) 欄に M_1 から M_6 が表示されます。

JPCB 論文の実例： σ -moment から H_{CO_2} を予測する

目的変数（教師値）

H_{CO_2} は CO_2 のヘンリー定数です。10,000 組のイオン液体について、COSMOtherm で H_{CO_2} を計算しました。これは COSMOtherm が扱う多様な熱力学物性の一例です。

入力記述子

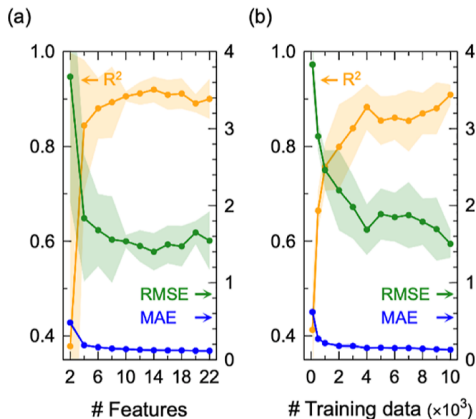
カチオンとアニオンの体積 V 、表面積 A 、分子量 MW 、 σ -moment など、量子化学計算から得た特徴量を使います。

$$\{V, A, MW, M_k, \dots\} \mapsto H_{\text{CO}_2}$$

論文で得られた関係

wrapper 法では V と第 2 σ -moment M_2 が最も重要な二つの特徴量でした。学習した GPR モデルで全 402,114 候補の H_{CO_2} を予測しました。

出典：Kuroki et al., J. Phys. Chem. B 2023, 127, 2022–2027, Fig. 2. CC BY-NC-ND 4.0



化学構造式だけでは表しにくい情報を特徴量にする

化学構造に基づく記述子

RDKitなどで生成する Morgan fingerprint は、原子の結合関係と局所的な部分構造をビット列として表します。

大量の分子を高速に扱えますが、電子がどこまで非局在化しているか、軌道や電子密度がどう分布するかは直接計算しません。

量子化学計算に基づく記述子

分子体積、電荷分布、双極子モーメント、軌道エネルギー、 σ -profile や σ -moment など を数値化できます。

酸化状態、置換基、立体構造による電子状態の違いを、機械学習へ渡す特徴量として表現できます。

量子化学計算を使う意味

構造式の部分構造だけでは区別しにくい電子状態の違いを特徴量に加え、物性との関係を機械学習できます。

事例 1 の要点

実測との傾向が合致する計算レベルを選べば、量子化学計算は、**多数候補を比較できるデータ集合**を作ることができます。

役割分担

TURBOMOLE：分子の電子状態と COSMO 表面を計算

COSMOtherm：COSMO 表面情報から溶液物性を計算

機械学習： V や σ -moment から未計算候補の H_{CO_2} を予測

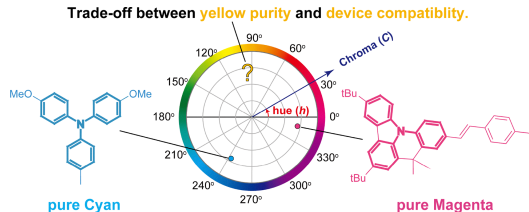
論文：TURBOMOLE 7.0、BP/TZVP-D3、COSMOtherm C30_1705。演習：COSMOtherm 2021、BP-TZVP-COSMO、c0 配座のみ。

事例2：TPA 骨格とエレクトロクロミズム

酸化により色が変わる

Triphenylamine (TPA) は、酸化還元に応答する有機エレクトロクロミック材料の基本骨格です。

置換基と架橋様式により、酸化電位とラジカルカチオンの吸収を調整できます。



出典：Goto and Mori, Chem. Commun. 2025, 61, 16010. CC BY-NC 3.0

材料設計の課題：黄色純度と酸化電位

光学的な要求

酸化体の吸収スペクトルを制御し、透過光として純度の高い黄色を得る。

色相角 h を黄色領域へ近づける。

電気化学的な要求

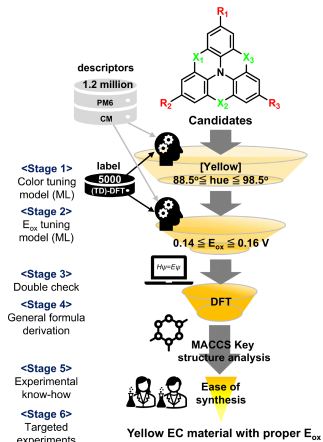
低い酸化電位により、低電圧で安定に駆動する。

光学特性との電子的なトレードオフを解く必要がある。

論文で得られた Y1

純黄色 $h = 93.6^\circ$ 、酸化電位 $E_{\text{ox}} = 0.12 \text{ V}$ (vs. Fc/Fc^+)

120 万候補から実験対象を選ぶ



11 種の架橋基と 53 種の π 置換基から、120 万を超える TPA 誘導体を生成。

PM6 由来の電子状態記述子と機械学習で候補を絞り、TD-DFT と合成容易性を確認して実験へ進みました。

演習 2 への導入：TmoleX と COSMOthermX

分子構造 → TmoleX / TURBOMOLE → .cosmo →
COSMOthermX

TmoleX：量子化学計算

構造と計算条件を GUI で設定して
TURBOMOLE を実行し、電子状態や表面電荷密度を含む COSMO ファイルを作ります。

COSMOthermX：熱力学計算

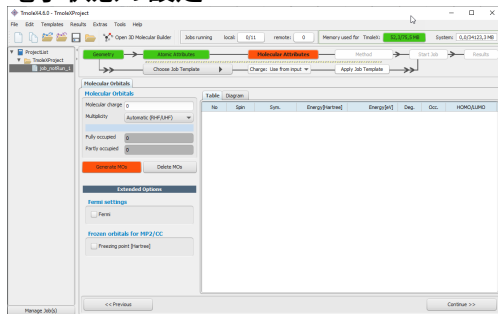
複数成分と温度を指定し、活量係数、ヘンリー定数、溶解度などを求めます。

二つの演習の違い

演習 1 は準備済み .cosmo を使います。演習 2 では、その前段にあたる TmoleX での量子化学計算と結果解析を体験します。

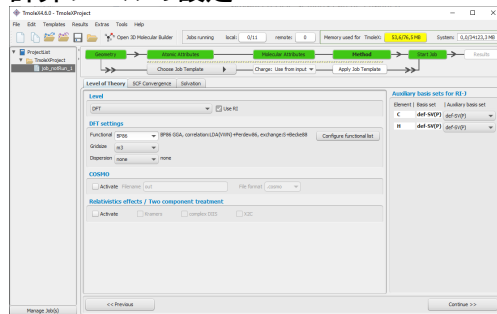
TmoleX : TURBOMOLE を GUI から使う

電子状態の設定



電荷、多重度を指定し、SCF 計算に用いる分子軌道の初期値を生成します。

計算レベルの設定

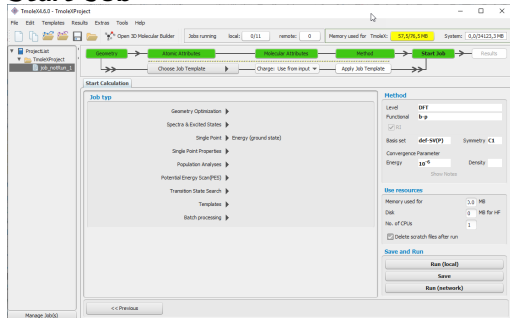


DFT 汎関数、基底関数、RI、COSMO などを選択します。

出典 : TURBOMOLE GmbH, TmoleX Tutorial 4.6, pp. 19, 21

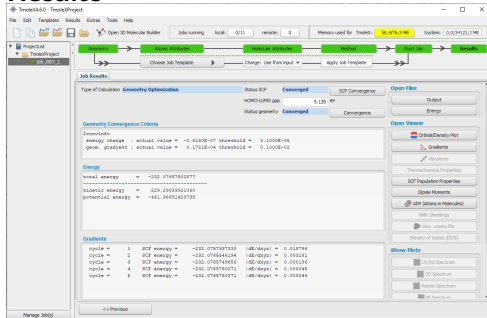
TmoleX : ジョブの実行と結果の確認

Start Job



Single Point、構造最適化、励起状態などの計算を選び、ローカルまたはリモート環境で実行します。

Results



SCF の収束、全エネルギー、HOMO-LUMO gap を確認し、軌道や電子密度の表示へ進みます。

出典 : TURBOMOLE GmbH, TmoleX Tutorial 4.6, pp. 23, 25

演習で現れる専門用語の扱い

RI-J

電子間反発の Coulomb 項を効率よく計算する近似です。今回の演習では有効にします。

grid m3

DFT の数値積分に使う格子の設定です。今回は講習用の既定値として扱います。

RPA / TDA

TDDFT で励起状態を求める二つの設定です。今回の計算では RPA を使います。

IRREP

分子の対称性に基づく励起状態の分類です。 C_1 対称では A のみなので、今回は自動設定で構いません。

今日の割り切り

各手法の導出は扱いません。設定が計算のどこに関係するかを知り、研究で使う際には目的に応じて精度を検証します。

演習 2 の基礎：方法論と基底関数の組合せ

方法論

電子の運動と電子間相互作用をどの近似で扱うかを決めます。DFT では BP86 や B3LYP などの交換相関汎関数を選びます。

方法論により、エネルギー、構造、軌道エネルギーなどの傾向が変わります。

基底関数

分子軌道の空間的な形を表すための関数の組です。def-SV(P)、def2-TZVP などがあり、大きくすると表現力と計算時間が増します。

計算レベルは組合せで決まる

方法論（例：DFT/BP86） × 基底関数（例：def-SV(P)）

候補比較での使い方

方法論と基底関数を一組として実測との傾向を検証し、採用後はすべての候補を同じ計算レベルで計算します。大きな基底関数を使うだけで、方法論の近似が改善するわけではありません。

SCF 計算：電子密度が変わらなくなるまで繰り返す

Self-Consistent Field（自己無撞着場）

電子は、原子核だけでなく他の電子が作る場の中を運動します。一方、その場を作る電子密度も、求めようとしている分子軌道から決まります。

初期分子軌道・初期電子密度 $\rho^{(0)}$ $\longrightarrow$ 有効な場を作る $\longrightarrow$ 分子軌道を解く
 $\longrightarrow$ 新しい電子密度 $\rho^{(1)}$

$\rho^{(0)}$ と $\rho^{(1)}$ が異なれば、新しい電子密度を使って同じ計算を繰り返します。

収束とは

反復前後の電子密度やエネルギーの変化が、設定した基準より小さくなった状態です。収束後の電子密度と分子軌道を使って、エネルギーや各種物性を評価します。

TmoleX で見る操作との対応

「分子軌道の初期値を生成する」は SCF の出発点を作る操作です。Single Point を実行すると TURBOMOLE が SCF 反復を行います。

演習 2 : TmoleX で中性 TPA を計算する

1. 新規プロジェクトで `TPA.xyz` を読み込む
2. 電荷 0、一重項を確認し、SCF 計算に用いる分子軌道の初期値を生成する
3. DFT/BP86、def-SV(P)、RI-J、grid m3 を設定する
4. 基底状態の Single Point ジョブをローカルで実行する
5. Results で正常終了、全エネルギー、HOMO-LUMO gap を確認する

所要時間の目安

実演機では約 6.5 秒。環境により所要時間は変わります。

演習 2 : HOMO と LUMO を読む

Results で確認

全エネルギー : $-749.161597 E_h$

HOMO : -4.620 eV

LUMO : -1.424 eV

gap : 3.196 eV

Orbital/Density Plot で確認

HOMO と LUMO の空間的な広がりを比べます。等値面の二色は軌道の位相であり、正負の電荷ではありません。

3D-Visualizer job_GEO_3

Choose Molecular Orbital(s)

Sel.	No	Spin	Sym.	Energy(Hartree)	Deg.	Occ.	HOMO/LUMO	quick	high-res
☐	26	ab	26a	0.0662	1	0	LUMO + 4		
☐	25	ab	25a	0.0661	1	0	LUMO + 3		
☐	24	ab	24a	0.0278	1	0	LUMO + 2		
☐	23	ab	23a	-0.0458	1	0	LUMO + 1		
☐	22	ab	22a	-0.0499	1	0	LUMO		
☐	21	ab	21a	-0.2343	1	2	HOMO		
☐	20	ab	20a	-0.2343	1	2	HOMO - 1		
☐	19	ab	19a	-0.3069	1	2	HOMO - 2		
☐	18	ab	18a	-0.3069	1	2	HOMO - 3		
☐	17	ab	17a	-0.3339	1	2	HOMO - 4		

Choose Density and Electrostatic Properties

Sel.	Plot-propertyname	Plot-filename	quick	high-res
☐	Ground state, total density	td		
☐	1st derivative of total density	t1		
☐	2nd derivative of total density	t2		
☐	Laplacian of total density	l		
☐	Kinetic energy density	tt		
☐	Electrostatic potential	tp		
☐	Electric field	tf		
☐	Gradient of electric field	tg		
☐	Electrostatic potential color-coded on density isosur...	tp_td		
☐	ELF (electron localization function)	te		

File format

☒ .ply/.plt

☐ .dbs

☐ View all in one

HOMO-LUMO gap $\neq$ 吸収エネルギー

軌道エネルギー差から吸収波長を直接決めません。吸収波長と色の議論には、電子励起を扱う TDDFT などの励起状態計算が必要です。

講習用計算 : TURBOMOLE 7.5、BP86/def-SV(P)、RI-J、grid m3

演習 2 (発展) : TPA ラジカルカチオンを計算する

酸化状態を設定する

中性 TPA の構造を複製し、電荷を +1、多重度を 2 (二重項) に変更します。分子軌道の初期値を作り直し、開殻 DFT 計算として設定されたことを確認します。

中性 TPA と同じ BP86/def-SV(P)、RI-J、grid m3 で Single Point を実行します。

中性分子と比較する

SCF が収束したことを確認し、SOMO とスピン密度が分子のどこに広がるかを観察します。

同じ分子構造を使えば、酸化による電子状態の変化に焦点を当てられます。

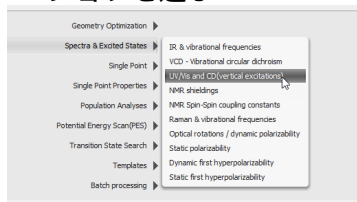
この計算から分かることと分からないこと

基底状態 DFT から、不対電子の分布は調べられます。ラジカルカチオンの吸収波長と色を求めるには、この開殻状態を基準とする励起状態計算が別に必要です。

電子数の異なる中性分子とカチオンの全エネルギーを、そのまま大小比較して安定性を判断しません。

演習 2 (発展) : TmoleX で TDDFT を設定する

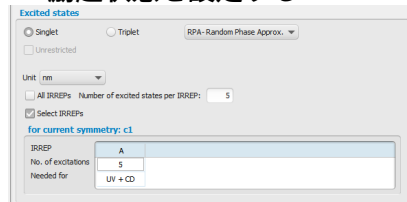
1. ジョブを選ぶ



Spectra &

Excited States から UV/Vis and CD (vertical excitations) を選びます。

2. 励起状態を設定する



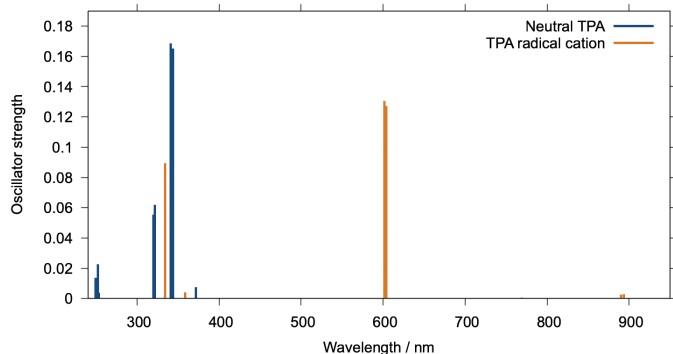
RPA ま

たは TDA、励起状態数、必要な対称性を指定します。ラジカルカチオンでは開殻計算であることも確認します。

TDDFT で計算するもの

SCF で得た基底状態を出発点として、光を吸収したときに到達する励起状態のエネルギーと遷移の強さを求めます。今回は中性 TPA と $\text{TPA}^{+\bullet}$ について各 10 状態を計算し、波長と振動子強度を比較します。

演習 2：酸化前後の吸収スペクトルを比較する



中性 TPA

強い遷移は約 341–344 nm で、主に紫外域にあります。

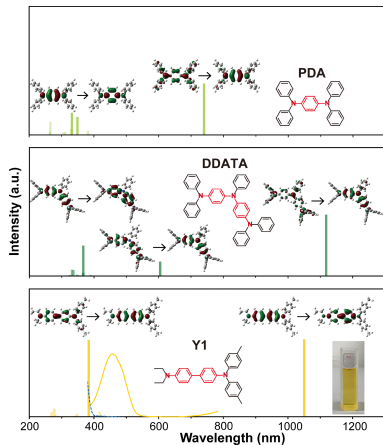
TPA⁺•

酸化後は約 601–604 nm に強い遷移が現れます。

酸化により可視光の吸収が変わるため、色が変化します。

同一の中性 TPA 構造を用いた講習用 Single Point 計算。BP86/def-SV(P)、RI-J、中性：一重項 RPA、カチオン：開殻 RPA、各 10 状態。棒の高さは振動子強度であり、実測スペクトルの線幅は再現していません。

励起状態計算が黄色の起源を示す



Y1 では IVCT 帯を可視域の外へ移動

IVCT は、分子内の二つの酸化還元部位間で電荷が移動する励起です。PDA・DDATA の IVCT 帯は可視域へ裾を引きます。Y1 では IVCT 帯が計算 1050 nm、実験 1180 nm となり、可視域から外れました。

実測では Y1 の酸化体が純黄色を示しました。

実演計算と論文計算の役割

	実演	論文
対象	TPA / TPA ⁺ •	酸化体を含む TPA 誘導体
方法	BP86/def-SV(P)	PM6 (探索) / TD-CAM-B3LYP/6-31G(d) (再評価)
示す内容	SCF、軌道、TDDFT 吸収	励起状態、NTO、吸収
目的	操作と出力の読み方	黄色発色の設計と検証

実演値は論文結果の再現値ではありません。計算目的に応じて、対象と方法を選ぶ例として対比します。

当日配布する計算済みファイル

ファイル	初学者に見てほしい点
coord	原子種と三次元座標
control	計算条件
SCF 出力	収束と全エネルギー
TD-DFT 出力	励起エネルギーと振動子強度
軌道画像	電子が存在しやすい領域
スペクトル	計算結果と観測色の関係

配布物には、各ファイルの見方を 1 ページの README として添付します。

二つの事例に共通する考え方

CO₂ 吸収液

電子状態を熱力学物性へ変換し、多数候補を比較する。

機能性色素

電子状態と励起状態から、吸収波長と色を解釈する。

計算結果を、**材料選択に使える尺度**へ翻訳することが重要です。

受講後に計算環境を選ぶときの考え方

商用ソフトを使う場合

GUI、導入支援、問い合わせ窓口、検証済みのワークフローを利用しやすい点が利点です。

今回の TmoleX / TURBOMOLE と COSMOtherm は、この選択肢の例です。

無償利用可能・オープンソースの選択肢

ORCA、xTB、PySCF などにも目的に応じて利用できます。自動化や手法開発の自由度が高い一方、利用条件の確認、環境構築、計算条件の検証が必要です。

選択の基準

料金だけで決めず、対象物性、必要な精度、計算規模、社内の運用体制、サポートの必要性を踏まえて選びます。

ORCA はオープンソースではありません。利用できる範囲とライセンス条件を公式情報で確認してください。

まとめ

- ▶ 量子化学計算は実験前の候補選定に使える
- ▶ COSMO-RS は電子状態を溶液物性へつなぐ
- ▶ 励起状態計算は分子構造と色をつなぐ
- ▶ 小さい計算から始め、既知データで確かめる

まず一つの分子を計算し、出力を読んでみる

連絡先

森 寛敏

中央大学理工学術院 教授
基幹理工学部 応用化学科
理論化学研究室

〒 112-8551

東京都文京区春日 1-13-27

後楽園キャンパス 5 号館 5132 号室

Prof. Dr. Hirotohi Mori

Department of Applied Chemistry
Faculty of Science and Engineering
Chuo University
Theoretical Chemistry Laboratory

E-mail

qc-forest.19d@g.chuo-u.ac.jp

Web

[https://qc-forest19d.github.io/
theochem-lab-site/](https://qc-forest19d.github.io/theochem-lab-site/)

Tel 03-3817-1918

参考文献と使用資料

-  A. Klamt et al., “The COSMO and COSMO-RS solvation models,” *WIREs Comput. Mol. Sci.* (2018), doi:10.1002/wcms.1338.
-  D. Goto and H. Mori, “Reconciling color purity and redox potential in electrochromic materials via electronic-state-informed molecular design,” *Chem. Commun.* **61**, 16010–16013 (2025), doi:10.1039/D5CC04421A.
-  N. Kuroki et al., “Machine Learning-Boosted Design of Ionic Liquids for CO₂ Absorption and Experimental Verification,” *J. Phys. Chem. B* **127**, 2022–2027 (2023), doi:10.1021/acs.jpcb.2c07305.
-  TURBOMOLE GmbH, TURBOMOLE Documentation and TmoleX Tutorial 2026.
-  Dassault Systèmes BIOVIA, COSMOtherm product documentation.