

# シミュレーションによる新奇高機能物質の分子設計

総合情報学部 コンピュータシミュレーション学科  
直島好伸研究室・キヤノン(株)・甲南化工(株)

Key Words : コンピュータモデリング、分子計算、機能性物質、有機合成化学

我々は、生命科学と有機合成化学の研究分野に、高精度の量子化学計算や生命分子計算によるコンピュータシミュレーション実験を取り入れることによって、酵素の分子認識機構の解明や超選択的触媒反応の開発、並びに高い機能を備えた新奇物質の分子設計と合成に関する研究を行っています。

- 21世紀を担う次世代型研究を試行する -

化学・有機化学・有機合成

化学・生物・医学・数学

## コンピュータモデリング

量子化学計算

### 応用分野

医薬、農薬、フェロモン  
におい、味、色素などの機能性物質  
香料・食品  
食用色素・プリンターインク  
自動車用塗料

生命分子計算

### 応用分野

医薬品開発 - ドラッグデザイン  
新奇機能性物質の探索  
生体材料・ナノ物質  
タンパク質の構造解析、機能予測  
ゲノム創薬、遺伝子工学

連絡先: Tel 086-256-9639(直通) Fax 086-256-8006

E-mail [naoshima@sp.ous.ac.jp](mailto:naoshima@sp.ous.ac.jp)

Home Page <http://chemnaobic.sp.ous.ac.jp>