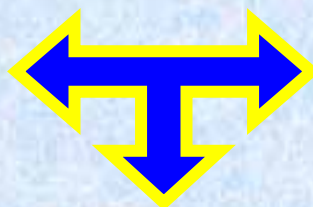


岡山理科大学 直島好伸 研究室

## 有機化学とコンピュータ化学の 双方の知識と技術を併せ持つ

Keywords : 生命科学・計算化学・分子設計・有機合成・医薬・食品・色素

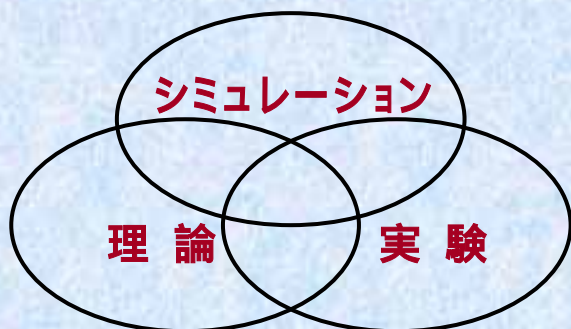
有機化学  
生命科学



コンピュータ化学  
シミュレーション

生体触媒や有機合成の理論、実験手法に加え、現代の科学技術の第3の方法論としての地位を築きつつある  
コンピュータシミュレーションの最先端の手法を取り入れる

- ・実験が困難な現象の解明
  - ・次世代機能物質(製品)の開発
  - ・定量的予測研究
- 可視化してわかりやすく説明



科学技術の3つの方法

環境調和型の有機合成システムを開発して右手型と左手型のキラル分子を作り分ける

有機物質の新機能や酵素タンパクによる有機分子の認識機構を解明し、テーラーメイド型の医薬品や色素、食品を合成、生産する

### 現在行っているシミュレーションの事例

- ・タンパク質全体を視野に入れた生命現象シミュレーション
- ・新機能物質や医薬品開発における高精度化学物質シミュレーション
- ・有機合成における人名反応シミュレーション