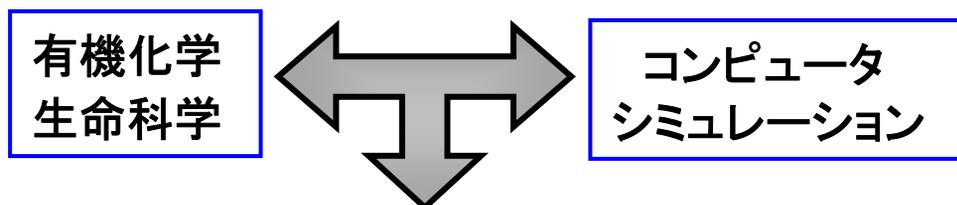


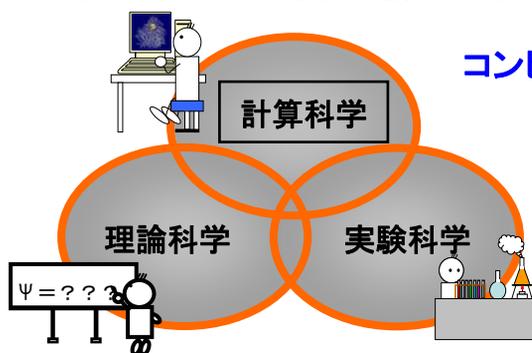
岡山理科大学 直島好伸 研究室

# 生命科学や有機化学における 革新的シミュレーション

**Keywords** : 生命科学・有機化学・生命分子計算・量子化学計算・機能物質



◆有機化学や生命科学の理論、実験手法に加え、科学技術の第3の方法論としての地位を築いているコンピュータ シミュレーションの最先端の手法を取り入れた研究を進めている—例えば、「生体触媒を利用する有機合成研究」の結果を基にして“酵素リパーゼの鏡像体選択性に関する生命分子計算研究”を行っている。



## コンピュータ シミュレーション(計算科学)

- ・実験が困難なモデルを構築
- ・現象の本質を解明、理解
- ・定量的予測研究
- ・ものづくりの高度化

～研究成果を社会に発信・還元する～

## ◆革新的 シミュレーションソフトウェア

**BioStation** タンパク質—化学物質相互作用解析 量子化学計算

**AMBER 9** 生体分子 分子力学および分子動力学計算

**Gaussian 03** 有機化合物 量子化学計算

## ◆次世代 コンピュータマシン

**Xeon** および **Itanium 2** 64 bit クラスタ型計算機システム

## ◆共同研究の事例◆

### ものづくりの高度化へ向けたコンピュータ シミュレーション

- 化学的、生物学的および計算化学的手法による新規アズレン化合物の開発
- コンピュータ シミュレーションによるオリゴ糖の特性評価に関する研究
- タンパク質と化学物質の相互作用に関するコンピュータ シミュレーション