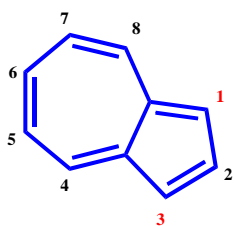


岡山理科大学直島好伸研究室・甲南化工株式会社

分子計算化学を基盤とする新規アズレン化合物の創製

Keywords : 医薬・香料・機能物質・生体触媒・有機合成・量子化学計算



アズレン

- ◆リパーゼという環境にやさしい生体分子を利用して、私達の日常生活に馴染みの深い、医薬、香料、食品、殺虫剤などの化学物質をつくっています
- ◆アズレンという化合物は永年にわたって研究している商品で、自信を持ってお勧めできる機能性物質です
- ◆キラルな化合物を含む多種多様な有機化合物を合成、製造しています
- ◆コンピュータシミュレーションによる立体配座探索計算や量子化学計算によって製品や合成技術の高度化を図っています
- ◆ニーズの多様化や産業のグローバル化に対応するため、シミュレーション技術を活用しています

《アズレンチオフェンを骨格とする新規アズレン化合物の分子計算の手順》

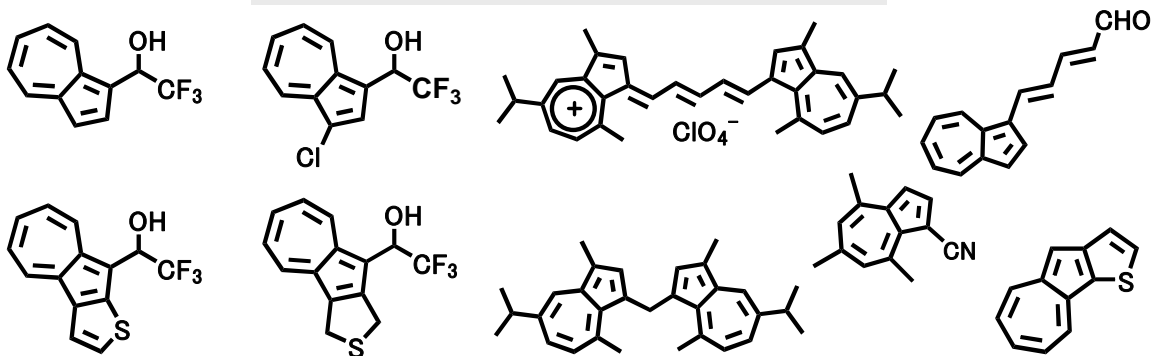
1. エネルギー極小化計算

2. 立体配座探索計算

3. 構造最適化計算(Gaussian03)
・HF / 6-31G* およびB3LYP / 6-31G*

4. 励起状態計算 ZINDO-CI

開発、合成したアズレン製品の一部



@アズレン誘導体を含む各種有機化合物の受託合成のご相談に応じます@