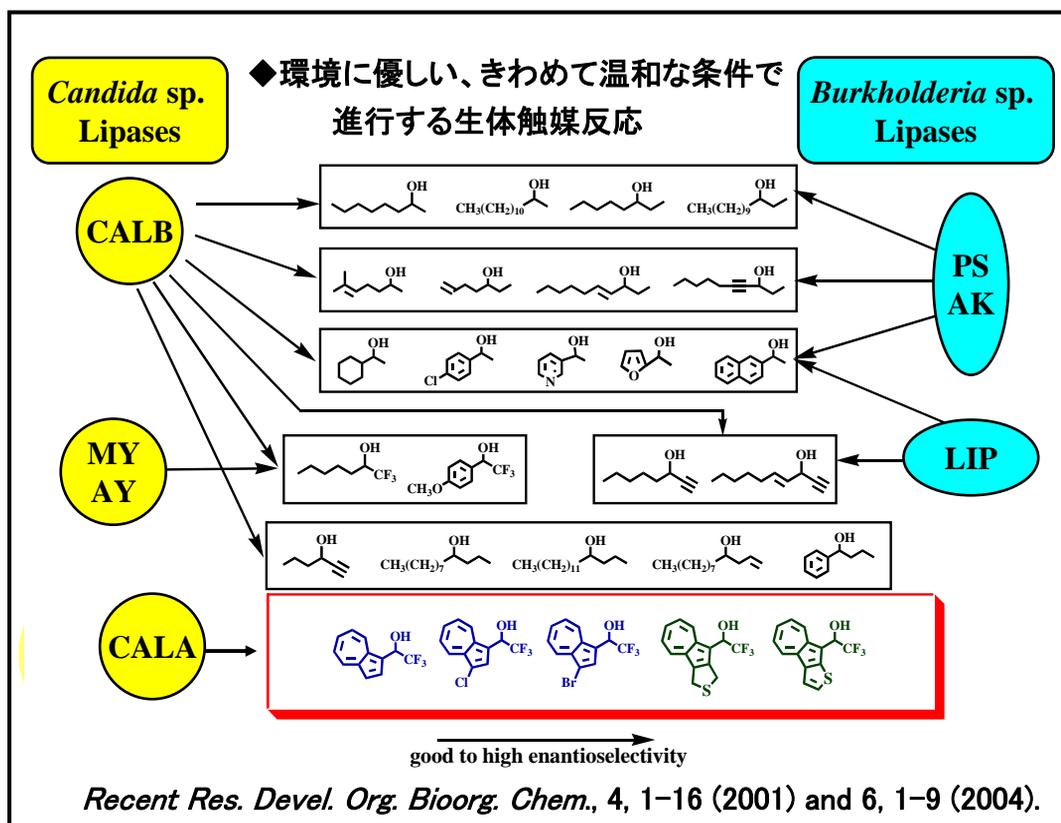


岡山理科大学直島好伸研究室・甲南化工株式会社

先端的シミュレーションと未来環境型エコリアクションの融合による物質生産の実現に向けて

Keywords : 機能物質・生体触媒・有機合成・量子化学計算・環境・温暖化

- ◆リパーゼという環境にやさしい生体分子を利用して、私たち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
- ◆量子化学計算を用いる分子シミュレーション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



《生体触媒・水溶媒での反応》

《コンピュータシミュレーション》

◆革新的分子計算シミュレーション手法の活用
フラグメント分子軌道法による全電子量子化学計算
有機合成における化学触媒反応や生体触媒反応の解析と予測