

直島好伸、守屋陽輔（岡山理科大学）、甲南化工株式会社

環境にやさしいものづくりの最前線： 酵素の右手型分子と左手型分子に対する鏡像体選択性を コンピュータで解析し、予測する

Keywords : シミュレーション・生体分子・機能物質・生体触媒・有機合成

次世代ものづくり・新機能物質の創成

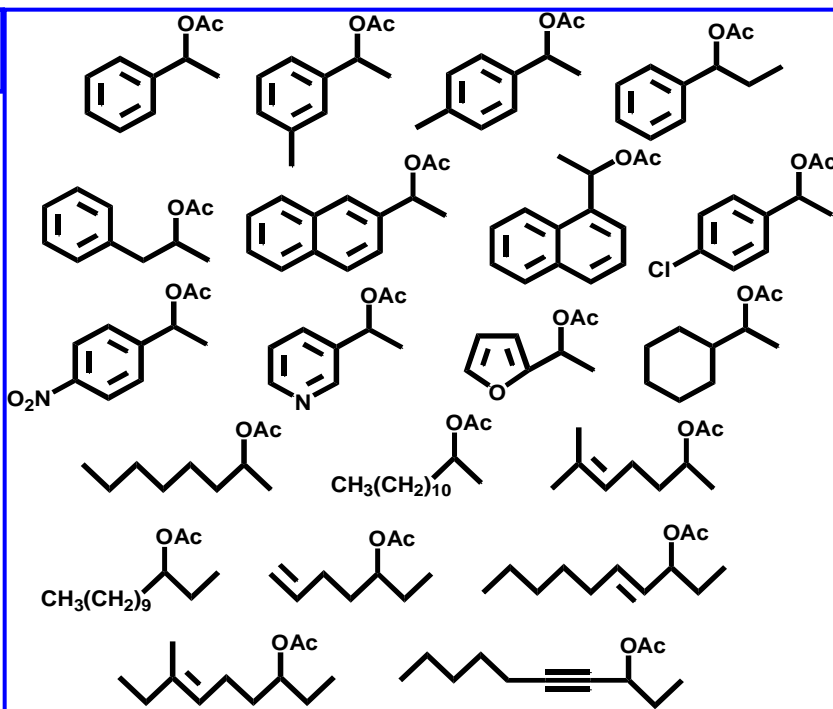
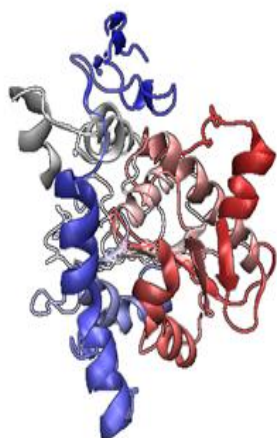
有機合成化学と次世代コンピューティング技術の融合
～医薬、農薬、液晶、食品、香料などの有機化合物をつくる～

有機合成、生体触媒
実験と経験

コンピュータシミュレーション
解析と予測

有機化合物

酵素リパーゼ



・コンピュータシミュレーションでものづくりのプロセスを革新 一次世代スパコン「京」の活用

1. 次世代量子化学計算で上記化合物に対する酵素の鏡像体選択性を予測
2. コンピューターで有機合成経路や有機化合物の機能を探索
3. 予測したターゲットを有機反応や生体触媒(酵素リパーゼ)を使ってつくる
～ものづくりの抜本的な加速、効率化、高機能物質の創成～

連絡先 直島好伸研究室 TEL 086-256-9639 E-mail naoshima@sp.ous.ac.jp
甲南化工(株) TEL 072-674-0612 E-mail konan_ch@tcn.zaq.ne.jp

http://www.konankako.co.jp 担当 木村崇知・亀澤 誠