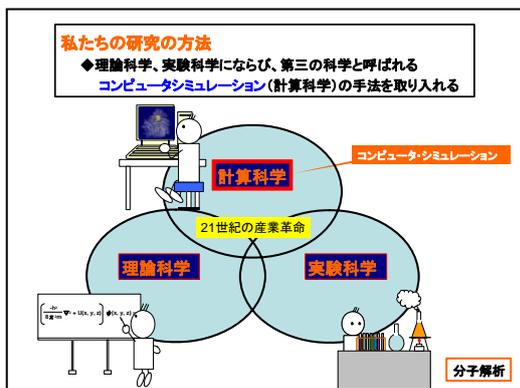


IV. 分子解析グループ

A) 平成 18 年度活動結果

平成 18 年 9 月 14 日に、“ユーザー会員との集いの会”を開催した。分子解析グループの概要説明、自己紹介などを行った後、会員それぞれの研究事例を予稿集やパワーポイントを用いて紹介した。また、ユーザー会員が現在抱えている問題点や解析支援ネット OKAYAMA に期待することなど、計算解析技術とものづくりの関係を含めて話し合った。



私たちが所有している 分子解析計算ソフトウェア

- 立体配座解析計算
- 分子動力学計算
- ナノ材料第一原理計算
- 量子化学計算(分子軌道計算)
- 生命分子計算

私たちの考え方と支援できること

- ◆ 基礎研究の充実を図る
 - ◆ 研究開発の期間を短縮、加速する
 - ◆ 環境、コスト、時間、精度、倫理などが困難なモデルをコンピュータ上でシミュレーションする
 - ◆ 単なる実験事実との比較、確認ではなく、新しいアイデアを得る
 - ◆ 可視化してわかりやすく説明する
 - ◆ わが国の伝統であるもの作り技術の発展を支援する
- ◎ 新機能材料探求、バイオ、新薬分子や色素、食品、香料、高機能材料の設計、創製

私たちの共同研究の事例

理論、実験、およびコンピュータシミュレーションの融合

- ◆ 非ベンゼン系芳香族化合物を骨格とする高機能性色素、新規有機EL材料、新薬の分子設計と合成
- ◆ アントシアニン系色素など天然色素の分子シミュレーションに基づく、新奇高機能性色素の開発
- ◆ 食品成分と生命分子の計算シミュレーションによる甘味や苦味の機構の解明
- ◆ タンパク質と有機分子の相互作用計算シミュレーションによる生命現象の理解と新機能物質、医薬品の開発
- 異種材料界面の密着性の計算予測技術開発
- 半導体 Si 結晶中の欠陥準位の制御

分子解析

B) 平成 19 年度活動計画

1. 平成 19 年 5 月後半あるいは 6 月前半に会員（末岡、直島、矢城、森、田村）が集まり、PR 冊子の内容やグループ活動について話し合う。
2. 平成 19 年 9 月から 12 月の間に、ユーザー会員との集いの会を 2 回から 3 回程度開催する。以下のような内容の会を予定している。
 - 1) 量子化学、分子軌道法の基礎的な勉強会や実際の計算ソフトの操作、体験
 - 2) 共同研究の事例紹介：ナノ・バイオ領域における量子化学計算
 - 3) ものづくりにおける計算解析技術の必要性と有用性
 - 4) 企業訪問（分子解析以外のグループにも参加を呼びかける）