

理論化学とコンピュータシミュレーションによる化学探求

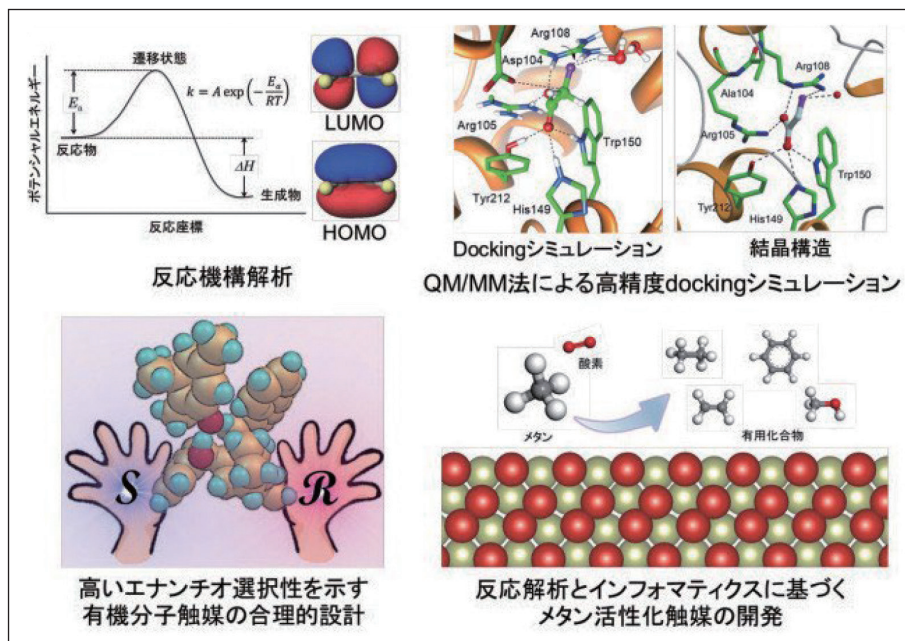
■ 工学部 生命環境化学科 教授 蒲池 高志

- 研究分野：計算化学、触媒化学、酵素化学
- キーワード：量子化学、触媒、生体反応、データサイエンス

I 研究概要

計算化学の手法を使えば、分子の構造や反応に伴うエネルギー変化といった実験的手法では到底知り得ない情報を比較的容易に得ることができる。このため、計算化学と実験化学の連携の重要性は今日広く認識されている。コンピュータの飛躍的な性能向上により、この傾向は化学が関連するあらゆる分野で加速している。

本研究室では、量子化学計算による反応機構解析の技術を基盤とした理論研究を展開している。プラントの設計にも重要な反応熱や活性化エネルギーなどの熱力学的データを高精度に評価可能であり、これにより反応機構が明らかとなる。反応速度論や分子軌道解析により、反応の選択性について予測することも可能である。近年ではQM/MM法により、1万原子を超えるような巨大系にも計算化学の手法が適用でき、高精度なdockingシミュレーションを実現した。これは、創薬での応用が期待される。現在は、高いエナンチオ選択性を示す有機分子触媒の合理的設計を目指したソフトウェア開発や、現在注目を集めている機械学習等のインフォマティクスに基づいた触媒開発など挑戦的な課題に取り組んでいる。



II 利点特徴

実験だけではわからない問題について解答を与える。

III 応用分野

材料や触媒などの物質化学、酵素や創薬などの生命化学を含む広い分野



SUSTAINABLE
DEVELOPMENT
GOALS