

課題名(タイトル):生物活性分子のコンホメーション解析

利用者氏名:○平井 剛

理研における所属研究室名:袖岡有機合成化学研究室

---

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々は、天然有機化合物を基にして、新しい生物活性分子を創製することに取り組んでいる。本課題では、柔軟な構造を持つ有機化合物の構造（コンホメーション）と、そのエネルギー状態を計算化学的手法によって見積もることを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

今年度の成果はない。

3. 結果

今年度の成果はない。

4. まとめ

今年度の成果はない。

5. 今後の計画・展望

今年度で計算機の利用を一旦中断する。

6. 利用がなかった場合の理由

本年度は、特に理研との共同研究課題での計算機の必要性がなく、計算を実施しなかった。