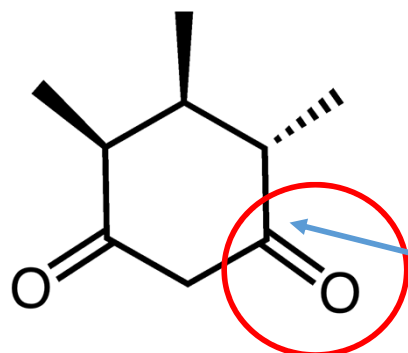


利用事例紹介 1

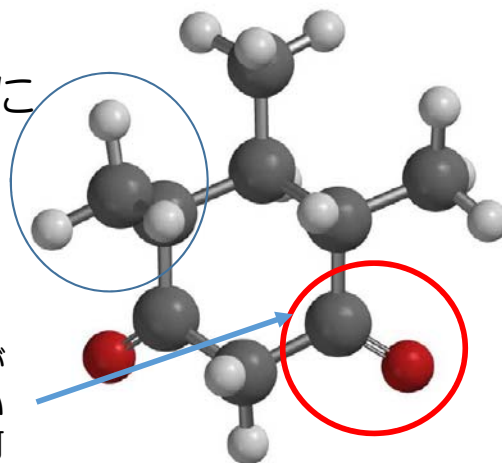
反応性の予測が可能

化成品を合成する際に、あらかじめ化学反応しやすい箇所を予測することができます。化成品の合成ルート的设计などに役立ちます。

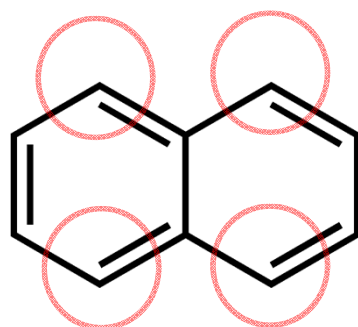


シクロヘキサン類

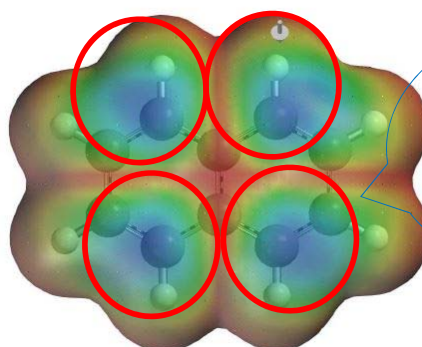
反応の際に
邪魔！



立体構造



ナフタレン

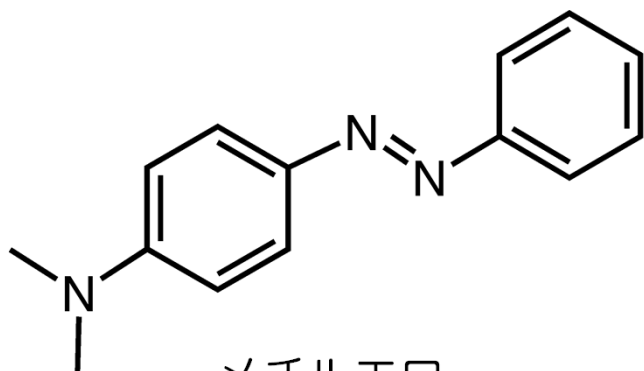


HOMOの軌道の様子

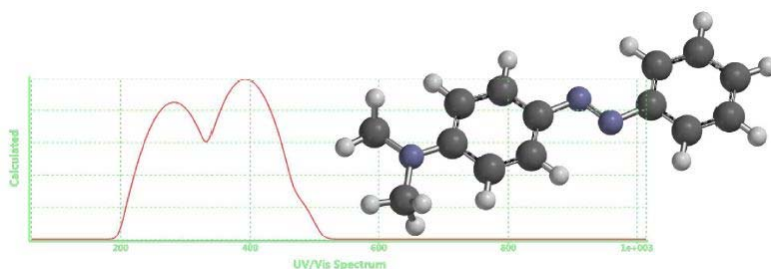
ここ（青色部分）で
反応が起こりやすい
ことを予測可

吸収スペクトルの予測が可能

色素開発は、合成、スペクトル測定を繰り返すため時間がかかりますが、計算化学を活用することで、吸収スペクトルを予測でき、開発を加速化できます。



メチルエロー
（黄色色素）



色素の紫外可視吸収スペクトル（計算）