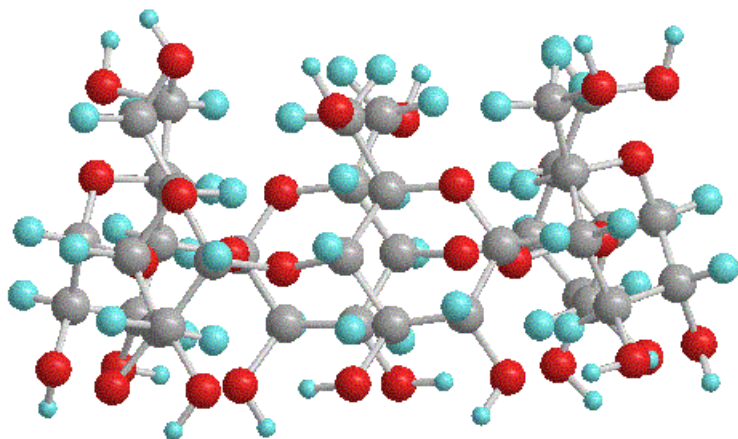


シクロデキストリン包接体のシミュレーション

シクロデキストリンは台形の筒状構造をしています。その筒の内側に別の分子（ゲスト）を取り込むこと（包接）ができます。この性質の利用して、医薬分野、食品分野などの広い分野に活用されています。水溶液中での構造や性質の解明のため、分子軌道法や動力学法を用いたシミュレーションに取り組んでいます。



キーワード シクロデキストリン、シミュレーション

分野 物理化学、計算化学