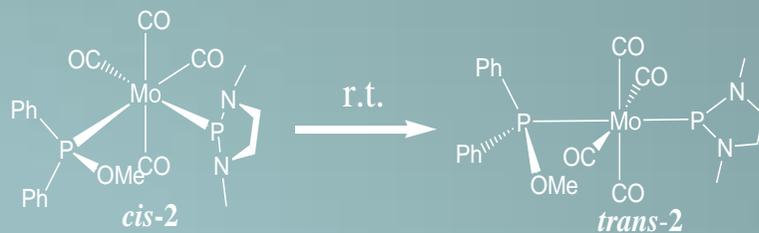
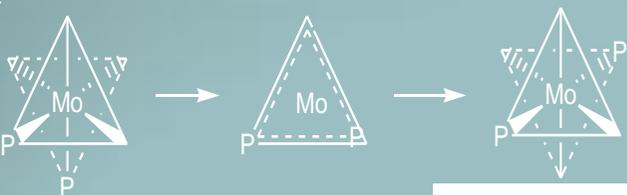


# 新規化合物の合成

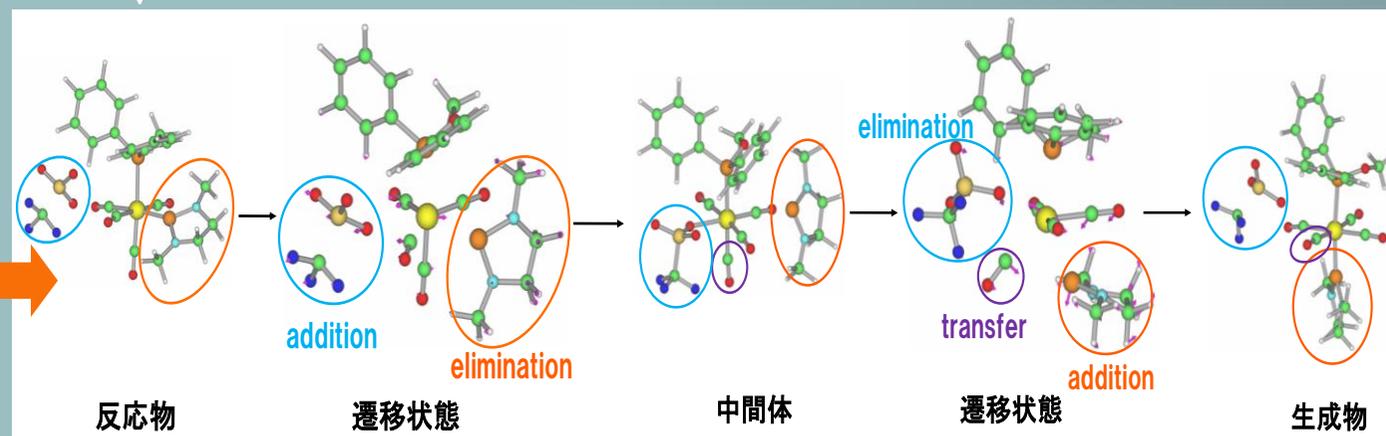
これまでの予測反応経路



目的に合った試薬の厳選

**コスト削減**  
**環境配慮**

**本研究の目的**  
量子化学計算で  
**反応経路を**  
**解明**



高レベル計算の  
適応範囲拡大  
**反応予測精**  
**度の向上**

# 新規合成経路の発見

遷移状態探索: 平均320CPU時間

**高精度MP2計算: 適応不可**

(メモリ: 最低で(2 x O x V x N) words 必要、  
O: 占有軌道の数, V: 非占有軌道の数, N: 基底関数の数)

**ハイパフォーマンス**  
**マシンの導入**