



## 材料が光らない…そんなあなたの課題を狙い撃ち！ ～ 分子構造と機能との関係性を明らかに ～ "ピンポイント分子設計支援ソフト"

(株)MOLFEX

### 概要・成果

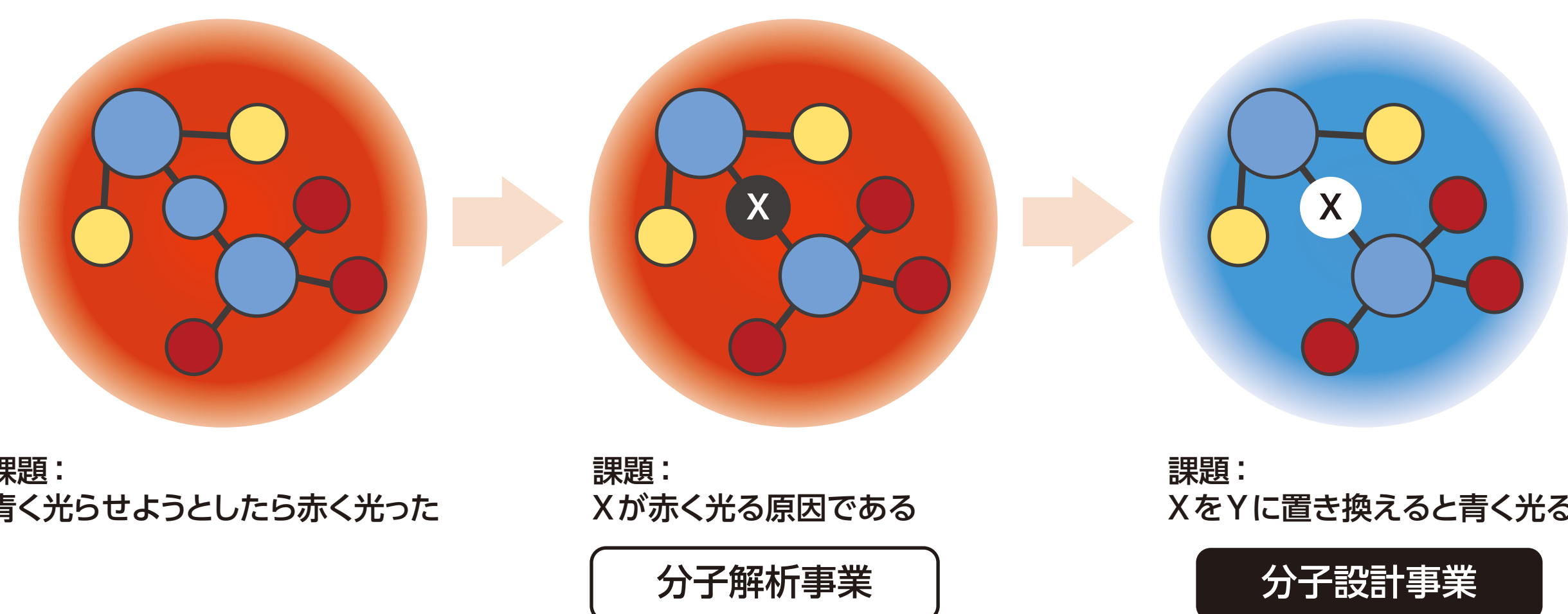
当社の技術は、**振電相互作用密度 (VCD) 理論**を用い、**分子の振舞いを支配する量子論的自然法則**から、これまで**自明ではなかった分子構造と機能との関係性を導き、材料開発手法に演繹すること**にあります。  
この技術をソフトウェア化し利便性を高め、機能性分子の阻害要因解析やピンポイント設計等、より**効率的な材料開発に貢献**できるものとなりました。

### 製品・サービス紹介

#### 分子解析・設計コンサルティングサービス

クライアント先で開発中の分子に対し、VCDを用いた解析を実施し、機能の阻害要因の特定及び阻害要因克服のための新規提案を行っています。

MOLFEXの独自技術：振電相互作用 (VCD) 理論による**ピンポイント**設計



#### 分子設計支援ソフトの販売

当社内で分子解析・設計コンサルティングサービスで使用していたプログラムに改良を加え、販売を行います。これによりクライアント側で開発分子の阻害要因の特定などが可能となります。

| 計算方法     | 機能                                          | 拡張機能・適用範囲など                                                                 |
|----------|---------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|
| VC       | 振電相互作用定数 (VCC) の計算                          | 原子振電相互作用定数 (AVCC)<br>適用範囲: HF, KS, CIS, TD-HF, TD-KS                        |
| SOC      | スピン軌道相互作用定数 (SOCC) の計算                      | Wigner-Eckartの定理による換算                                                       |
| CUBE     | 空間分布関数のcubeファイルによる出力                        | ・振電相互作用密度 (VCD)<br>・遷移双極子モーメント密度 (TDMD)<br>・分子軌道 (MO)<br>・差電子密度、重なり密度 (RHO) |
| RATE     | 輻射速度定数 (蛍光・リン光)<br>無輻射速度定数 (内部転換・系間交差)      | 促進モード・受容モード解析<br>Franck-Condon包絡線解析                                         |
| SPECTRUM | 蛍光スペクトル<br>リン光スペクトル                         | 線スペクトルとその帰属<br>色度座標表示                                                       |
| CONFORM  | 異なる二つの分子構造においてEckart条件を満足するように回転            |                                                                             |
| OVERLAP  | 異なる分子構造間での波動関数の重なりを計算。<br>断熱接続や構造最適化などで適用可能 | 適用範囲: HF, KS, CIS, TD-HF, TD-KS, CASCI, CASSCE, FCI                         |

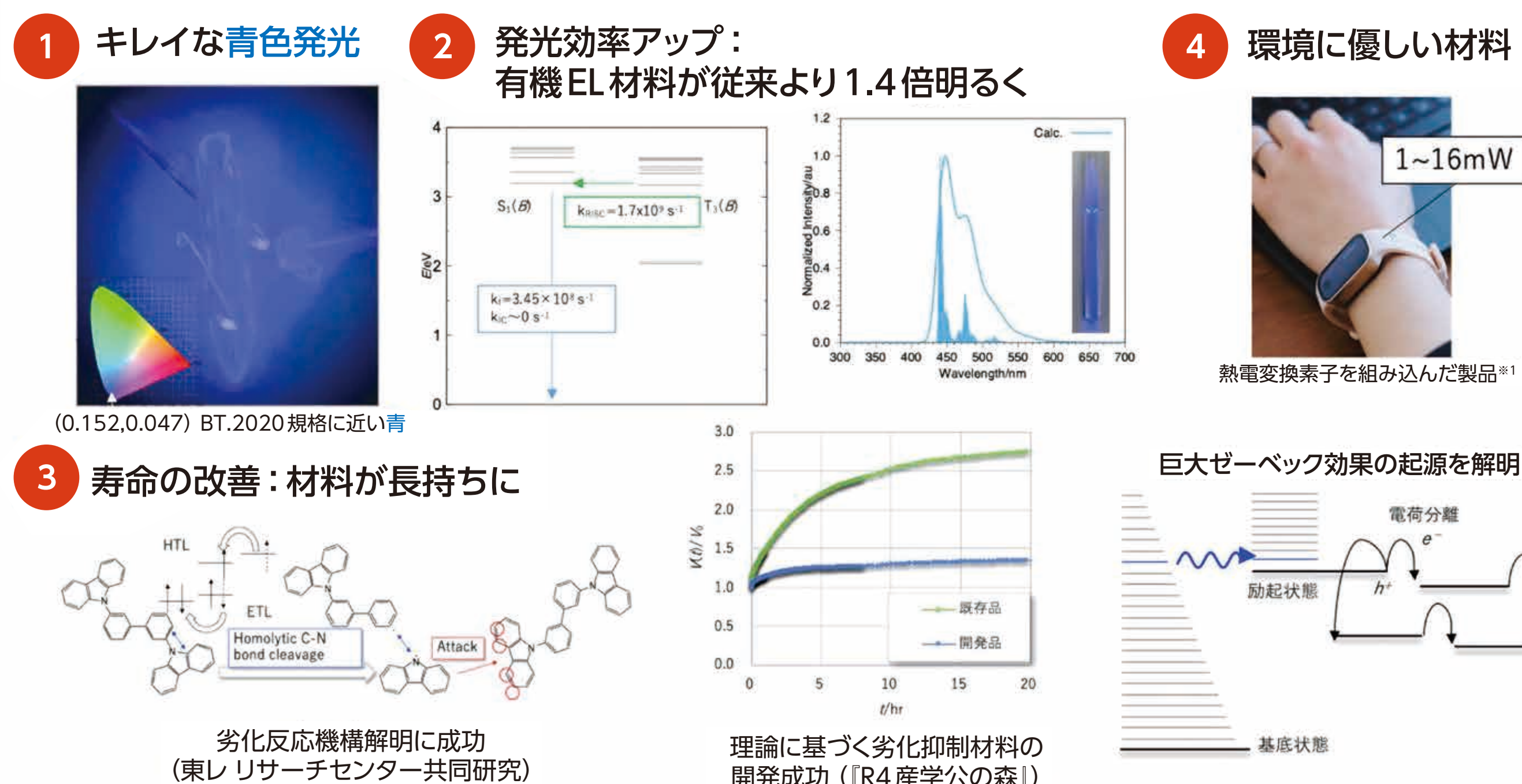
### 希望するマッチング先

#### 主に機能性樹脂開発を行う企業及び研究機関

材料開発の新しい視点として、当社の分子解析・設計コンサルティングサービスもしくはソフトウェアを導入していただきたいです。

#### 製薬関連の企業及び研究機関

本技術は、「薬理活性」の解析に応用が可能であると考えているため、薬理活性分野における共同研究及び本技術の実用化に向けた取り組みを実施したいです。



プロジェクト実施期間

2024年度～2025年度

NEDOプロジェクト名

「研究開発型スタートアップの起業・経営人材確保等支援事業／ディープテック分野での人材発掘・起業家育成事業 (NEP)／躍進コース／分子設計支援ソフト「molfex<sup>TM</sup>」の開発および販売」

お問い合わせ先

株式会社MOLFEX  
HP: <https://molfex.com/> Email: [uejimamotoyuki@molfex.com](mailto:uejimamotoyuki@molfex.com)

