

## 名大と菱化システムとの連携で、日本発のX線構造解析手法の製品化を目指す！

国立大学法人名古屋大学（以下「名大」という。）は、名大で開発されたX線構造解析手法に関わるプログラム著作物及び特許権（W0 2007/066787）を株式会社菱化システム（以下「菱化システム」という。）に実施許諾することとなりました。

有機導電体などの機能性材料や医薬品は、分子構造のみならず、結晶構造がその物性、薬効に大きな影響を及ぼします。近年、新素材の分子設計が高度化するに従い、通常のX線構造解析の手法が適用できるような十分に大きな単結晶を得ることが困難な場合が多くなっており、粉末X線回折データを用いて構造を決定する手法への期待が高まってきました。更に、目的の試料がそもそも粉末やタブレットなどの多結晶状態であることも少なくないため、粉末による解析が必要な場合もあります。

今回製品化を目指すプログラムは、ここ数年間にわたって工学研究科応用物理 構造物性工学研究グループが開発してきました。このプログラムは、粉末X線回折データを用いて、従来市販されているソフトウェアでは困難であった原子数が100を超える自由度の高い有機化合物や共結晶の構造をも決定することができます。この構造決定法では、多くのパラメータを遺伝子のように扱う遺伝的アルゴリズムに加えて独自のアルゴリズムを組み込むことにより、従来の手法に比べてはるかに効率的に座標空間を探索するため、分子構造が複雑な物質でも短時間で結晶構造を決定できることが実証されています。既に、名大内外の研究機関との共同研究で、多数の新機能物質の未知構造決定に成功し、論文発表や特許申請など実績が上がってきています。特に、大型放射光施設 SPring-8 を用いた回折データによる医薬品の解析の成功例は海外からも注目を集めています。

名大が開発したプログラムは、従来の市販ソフトウェアでは解析できない複雑な物質の構造同定が可能とはいえ、解析手法を深く理解した上で、測定データと多くのパラメータを適切に入力して解析を進める必要があり、企業などの開発現場での利用はある程度困難を伴います。つまり、医薬品または光電機能材料、燃料電池などの開発現場で新規化学物質合成や機能評価を行う研究者・開発者に、この解析手法を使いこなすための多くの専門知識を要求することは難しく、従来から、このような問題が大学で開発されたソフトウェアを一般に普及させる上での課題となっていました。

菱化システムは、三菱ケミカルホールディングスグループに属するユーザー系IT企業であり、同社事業の柱の1つである研究支援システム事業においては、主に海外で開発された優れた計算機化学ソフトウェアの導入支援と技術サポートを提供するとともに、複数

のソフトウェアを連携して活用するためのインターフェース開発や同社独自技術によるアプリケーション開発にも多くの実績を有しています。今回、名大から菱化システムへの実施許諾により、同社の研究支援システムのツールの1つとして、このX線構造解析手法の製品化を目指します。

これまで、国内の研究現場で利用されている化学計算等のプログラムは、そのほとんどが欧米発のソフトウェアであり、構造解析ソフトウェアについても同様です。今回、これまで困難を極めていた粉末未知構造解析を可能とするプログラムが、名大の開発による最先端のアルゴリズムと、研究支援システム事業で長年の経験をもつ菱化システムの技術力との融合により、日本発のパッケージソフトウェア化を目指します。