

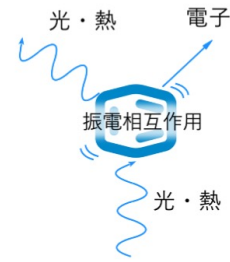
## 経営理念

基礎化学の社会実装を目指して

京都大学で研究されてきた振電相互作用密度理論という基礎化学の研究成果を用いて、望ましい機能を持った材料を分子レベルで設計できるようになりました。

このことは基礎化学の研究成果が実用レベルになったということの意味しています。

この分子設計技術を広く社会実装するため、材料開発に応用することを目的として（株）MOLFEXを設立しました。



# MOLFEX

MOLFEX, Inc.

株式会社MOLFEX

<http://molfex.com>

Manufacturing | Manufacture of chemical and allied products

製造業 | 化学工業

Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Takano-Nishibiraki-cho 34-4, Sakyou-ward, Kyoto 606-8103, Japan

〒6068351

京都府 京都市左京区 高野西開町34-4 京都大学福井謙一記念研究センター 内

¥2,600,000 (capital 資本金) 1-50 (employees 従業員数)

## Area of Interest

North America, Europe, Southeast Asia, China, East Asia (excluding China), Oceania

北米, 欧州, 東南アジア, 中国, 東アジア (中国以外), オセアニア

## PR

MOLFEX provides contract-based molecular design services and analysis software for functional materials using a new method.

In conventional material development, the relationship between desired function and molecular structure was not evident, making trial and error through experimentation necessary. Materials informatics, which is based on vast amounts of experimental data, has become popular in recent years. On the other hand, the Vibronic Coupling Density (VCD) theory developed at Kyoto University, which involves electron and molecular vibrations,

clarifies the relationship between structure and function involving light and electrons without requiring large amounts of data, explains why certain structures are superior, and allows for the precise design of materials with desirable functionality.

This molecular design method is now applicable to real-world materials, which is why this Kyoto University start-up was founded.

MOLFEX will contribute to material development by implementing our material design technology throughout society via our services.

MOLFEXは新手法による機能性材料の受託分子設計サービスと解析ソフトウェアを提供します。従来の材料開発では、求める機能と分子構造との関係が自明ではなく、実験による試行錯誤が必要でした。近年では膨大な実験データによるMaterials informaticsが盛んに行われています。一方で、京都大学で開発された電子と分子振動を取扱うVibronic coupling density(VCD)理論は、大量のデータを必要とせず光や電子の関わる機能と構造の関係を明らかにするもので、なぜその構造が優れているかという説明を与え、さらに望ましい機能を持った材料をピンポイントで設計できます。

この分子設計手法が実用材料に適用可能な水準にまで到達したため京都大学発スタートアップとして起業しました。

MOLFEXはサービスを通じてマテリアル設計技術を社会実装し、マテリアル開発に貢献していきます。

## Product technology

MOLFEX has focused on the Vibronic Coupling Density theory as a technology for designing functional molecules and has also developed proprietary software based on this theory. We design molecules using theory, software, and expertise. Vibronic coupling is the interaction between molecular vibrations and electrons—an interaction that exists in all molecules.

While vibronic coupling has not been considered very important in the past, it is essential for precise molecular design. We carefully analyze each molecule and design molecules based on the findings. MOLFEX' s molecular design technology can provide a “why” that cannot be provided by Material Informatics (MI), which is based on large amounts of experimental data, and can also complement MI.

MOLFEXでは、機能性分子を設計するための技術として振電相互作用密度理論に着目し、それに基づく独自ソフトウェアをも開発しました。理論・ソフトウェア・知識を活用して分子設計を行います。振電相互作用は分子振動と電子の間の相互作用であり全ての分子に存在する相互作用です。従来では振電相互作用はさほど重要視されていませんでしたが、精密に分子設計するためには必須です。一つ一つの分子を丁寧に解析し、そこから得た知見を基にして分子設計を行います。MOLFEXの分子設計技術は大量の実験データによるMaterials Informatics(MI)では与えられないwhyを提供でき、MIの補完にもなります。



Kyoto Online Tech Pavillion  
<https://kyoto-tech-companies.com/>