

県政記者会各報道機関  
東北電力記者クラブ 御中

Laboratory of Combinatorial Computational Chemistry open  
コンビナトリアル計算化学寄附講座の開設について

平素は格別のご高配を賜り厚く御礼申し上げます。

東北大学において学術的な基礎研究が進められているコンビナトリアル計算化学は、先端的な材料開発の分野に大きなインパクトを与えており、すでに民間企業との共同研究が数十件以上進行中ではありますが、この度、更なる産学連携を推進し、実践的なソフトウェアを開発していくことを目的に寄付講座が開設されましたのでお知らせします。

同講座は菱化システム、ペガサスソフトからの寄附講座であり、開発ソフトは両社から販売される予定となっております。

コンビナトリアル計算化学を活用した製品開発は、高付加価値製品の開発、開発期間の短縮と開発コストの大幅な削減につながり、世界をリードする新しい市場・産業の創出と日本経済の持続的な発展に貢献するものと期待しております。

## 寄附講座の概要

### 1. 大学名（学部等名）

東北大学工学研究科

### 2. 寄附講座の名称

コンビナトリアル計算化学寄附講座

Laboratory of Combinatorial Computational Chemistry

### 3. 寄付者

株式会社菱化システム

ペガサスソフトウェア株式会社

### 4. 寄付者の概要

株式会社菱化システム

- (1) 設立年月日 1970年4月1日
- (2) 資本金 3億円
- (3) 売上高 188億円(2004年3月)
- (4) 従業員 592名(2004年6月)
- (5) 事業内容 科学技術計算(分子化学、画像処理等)パッケージソフトの  
販売・技術支援・システムインテグレーションサービス：  
コンサルティング・情報システム構築・運営・電子商取引  
システムの運営サービスおよびパッケージソフトの販売・  
導入サービス

ペガサスソフトウェア株式会社

- (1) 設立年月日 2002年5月20日
- (2) 資本金 1,000万円
- (3) 売上高 7,200万円
- (4) 従業員 6名
- (5) 事業内容 ソフトウェア開発、ソフトウェア販売、科学技術計算サービ  
ス

## 5. 寄附金額

総額 90,000,000 円

## 6. 寄附の時期および期間

時期 平成17年3月

期間 平成17年4月～平成20年3月まで(3年間)

## 7. 寄附講座の教育研究領域の概要

### (1) 設置の理由

近年の理論化学および計算機テクノロジーの急速な発展に呼応し、計算化学が触媒材料をはじめ半導体、エレクトロニクス、有機材料、セラミックス、機械材料、生体物質などさまざまな先端材料の研究開発に大きなインパクトを与えている。特に、計算化学を実用材料開発のための高速スクリーニング手法として活用するコンビナトリアル計算化学が注目されている。この観点から当該寄附講座では、コンビナトリアル計算化学による材料設計のためのソフトウェア開発を中心とした研究・教育を展開する。これまで工学研究科応用化学専攻原子・分子制御工学講座で行ってきた計算化学に関する基礎研究ならびに未来科学技術共同研究センター未来環境分野で行ってきた計算化学に基づく産学連携研究を基礎に、それらの成果を踏襲しながら化学バイオ工学分野における新しいコンピュータ化学ソフトウェアを開発・発展させることを目的として設置するものである。名称は、計算化学における材料開発のための高速スクリーニング手法として活用する実践的なソフトウェアを開発することを目的としていることにより、「コンビナトリアル計算化学寄附講座」とし、設置趣旨に基づいた研究・教育を行う場とする。

### (2) 教育研究の内容

原子、分子、ナノレベルでのコンピュータシミュレーション技術は、未来型材料設計支援の分野で近年急速に進歩している研究領域である。化学工業の分野以外にも半導体、エレクトロニクス、機械材料、製薬など材料設計、機能物質設計には計り知れない社会的ニーズがある。これらのニーズに具体的に応えるには、理論化学の基礎に加えて、実用材料のコンピュータによる高速シミュレーションを可能とす

る実践的なソフトウェア群の開発が不可欠となる。当該寄附講座では、多彩なコンピュータ化学手法の基礎を教育するとともに、それらを実践的なソフトウェアに展開するために必要な教育研究を行う。

具体的には、工学研究科応用化学専攻の原子・分子制御工学講座におけるコンピュータ化学に関する基礎的な教育研究、未来科学技術共同研究センターの未来環境創製分野における産学連携による教育研究と補完しあいながら、コンビナトリアル計算化学のための様々な新しいソフトウェアを開発するための教育研究を、学部レベル、大学院レベルの両方について行う。新しく開発されたソフトウェアは、株式会社菱化システム、ペガサスソフトウェア株式会社を通して、国内外の企業、大学等に販売、供給され、モノ造りの現場において、また先端的な学術の場において活用される。

### (3) 期待される成果

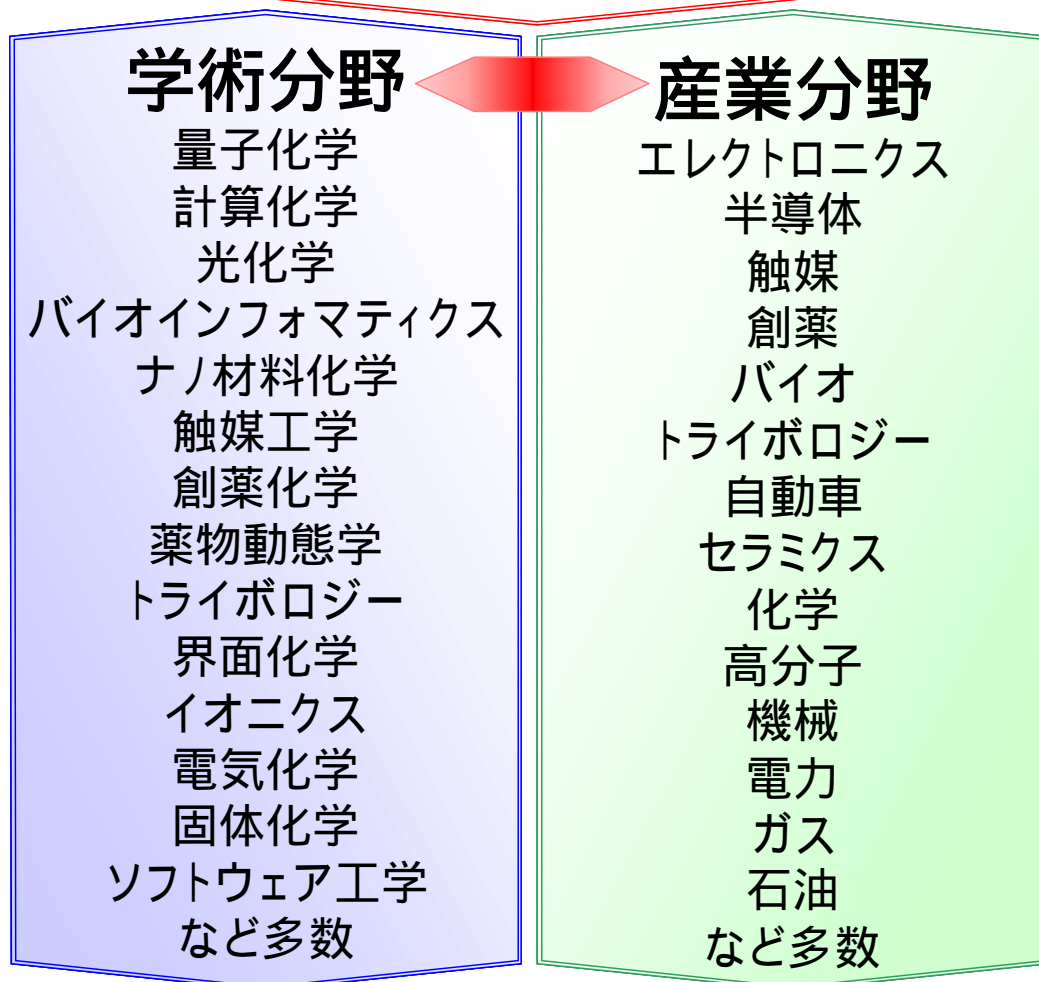
グローバル化が急速に進む中で、現在、企業にとって最も重要なのは、オリジナルな製品をいち早く開発することであり、他社に先駆けて競争力のある商品を製品化することである。「コンビナトリアル計算化学」を活用した製品開発は、独自の高付加価値製品の開発を可能にするばかりでなく、製品開発期間の大幅な短縮、さらには開発コストの削減にもつながる画期的な方法論である。本手法を多くの研究者が会得することにより「コンビナトリアル計算化学」が世界をリードする全く新しい市場・産業の創出、さらには日本経済の持続的な発展に貢献するものと期待できる。教育上の効果として、産業界と大学の接点になること、異分野研究者との交流、学生が真の意味で計算化学を志向するきっかけとなること、共同研究課題を探索し整理する場となることなど、学生にとって有益な研究環境が作られることは疑いない。産業界に対しても大学の最新の現状と将来動向を各分野の業界へ伝えることができる等を期待することができる。社会への貢献と学術的研究教育の場における素材産業とのかかわりの接点としての貢献、大学と産業界等との技術交流を活性化することへの貢献、シンポジウムや研究会の開催による学会活動の貢献、公開講演会や公開討論会の開催による社会への貢献等も期待することができる。

(4) 寄附講座の対象とする学問分野の説明図

本寄附講座が対象とする学問分野の社会動向、技術動向全体での位置付けを下图に示す。

## コンビナトリアル計算化学 寄附講座

ナノ領域での  
オリジナルソフトウェアにより  
学術と産業を連係



#### (5) 講座の名称について

コンビナトリアルケミストリーは、1回の合成実験で化合物を1つ作る従来法に対し、試薬の組み合わせと反応場の制御により100～10000以上の化合物を系統的に合成し、目的とする化合物を高速かつ効率的に探索することを可能にした実験手法である。コンビナトリアル計算化学は、このようなコンビナトリアルケミストリー概念を計算化学に導入したものである。周期表のありとあらゆる元素の機能を計算化学により高速に予測することで、計算化学を材料開発のための高速スクリーニング手法として活用する新しい方法論である。工学研究科応用化学専攻の原子・分子制御工学講座と未来科学技術共同研究センターの未来環境創製分野では、それぞれコンビナトリアル計算化学の基礎研究と産学連携研究を進めている。その成果は、株式会社菱化システムとペガサスソフトウェア株式会社からコンビナトリアル計算化学ソフトウェアとして販売されている。本寄附講座は、コンビナトリアル計算化学のためのソフトウェア開発に関わる教育研究を行うことを目的としているので、講座名を「コンビナトリアル計算化学寄附講座」とした。

#### 8. 現有組織の構成状況及びそれらを照らした寄附受入れの必要性

コンビナトリアル計算化学に関しては、工学研究科応用化学専攻の原子・分子制御工学講座において、コンピュータ化学に関する基礎的な教育研究を行っている。また、未来科学技術共同研究センターの未来環境創製分野では、産学連携によるコンビナトリアル計算化学の教育研究を遂行している。近年、コンビナトリアル計算化学の産業応用が急速に進み、企業を中心に、原子・分子制御工学講座と未来環境創製分野で開発したコンビナトリアル計算化学ソフトウェアの利用が広がっている。そのため、コンビナトリアル計算化学のための様々な新しいソフトウェアを開発するための教育研究を、学部レベル、大学院レベルの両方について行う必要性が高まった。寄附講座の受入れにより、コンビナトリアル計算化学ソフトウェア開発体制が強化されれば、それらのソフトウェアは、株式会社菱化システム、ペガサスソフトウェア株式会社を通して、国内外の企業、大学等に販売、供給され、モノ造りの現場において、また先端的な学術の場において活用され、大きなインパクトを与えることが出来る。

(現有組織と本寄附講座の位置付けの模式図を次頁に示す。)

**現有組織と  
本寄附講座  
の位置付け**

**工学研究科**

**コンビナトリアル  
計算化学寄附講座**

- ・新規学術理論のソフトウェア化
- ・学術と産業の連係

**応用化学専攻  
原子・分子制御  
工学講座**

- ・新規計算理論及び原理の開発
- ・学術的基礎研究

↑ ↓  
化学バイオ系  
三専攻

**未来環境  
創製分野**

- ・開発ソフトウェアの産業応用
- ・実践的研究推進による産学の連携

未来科学技術  
共同研究センター  
(NICHe)

**学術成果のソフトウェア化により  
学術的シーズと産業界のニーズの連係を実現**

現有組織と本寄附講座の位置付け

この件に関するお問合せ先

東北大学 工学研究科	応用化学専攻	宮本	TEL 022-795-7233
	情報広報室	馬場	TEL 022-795-5898