



# M-EVO<sup>®</sup>

## MI・高機能材料開発支援ソフトウェア

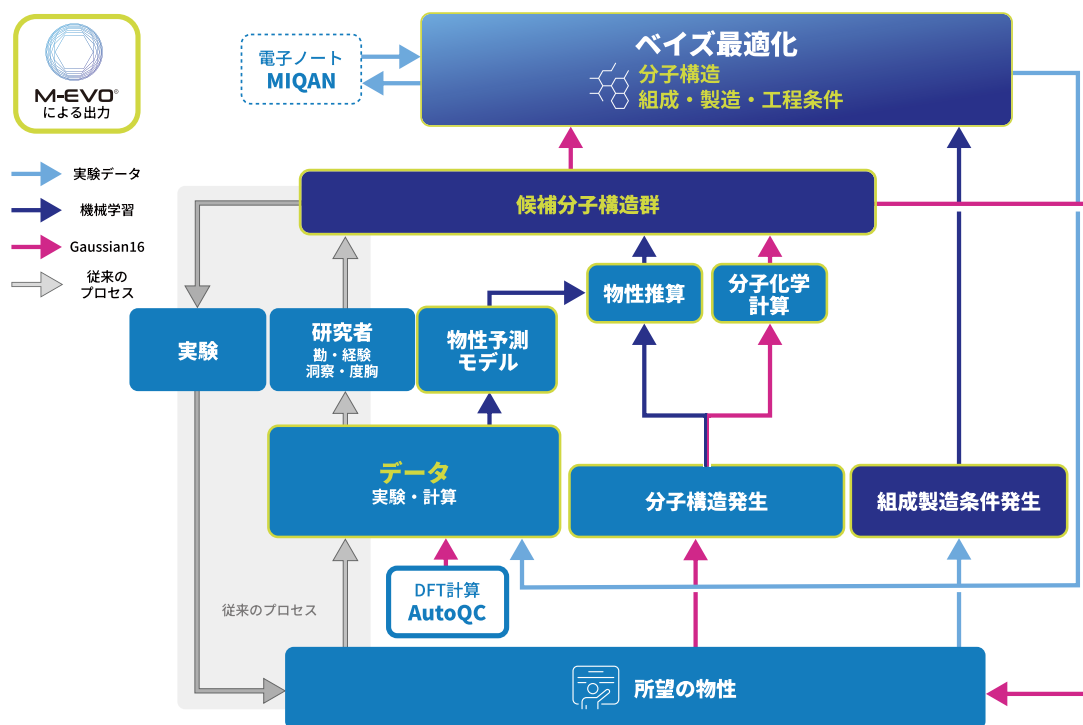


これまでの素材開発は、研究者が経験を基に所望の物性を持つと期待される分子構造を考え、実際に合成、物性測定を繰り返すことで行われてきました。近年は、これに計算による機能発現のメカニズムの解明とスクリーニングを行うことで研究開発の加速が図られるようになってきました。

これからの素材開発は、所望の物性を入力するとコンピュータがその物性を有する分子構造を探索するマテリアルズインフォマティクス(MI)を活用して、より高機能・高性能な素材をより短期間で開発することを目指します。

当社が開発したMIソフトは、データベースが無い場合でも、当社オリジナルのアルゴリズムにより所望の物性を有する多様な分子構造を探索し提案します。複数の目的物性を考慮することができ、合成の可能性や溶剤溶解性等の指標をも含めたスコアを算出することができるため、実用的な分子構造の探索ができます。

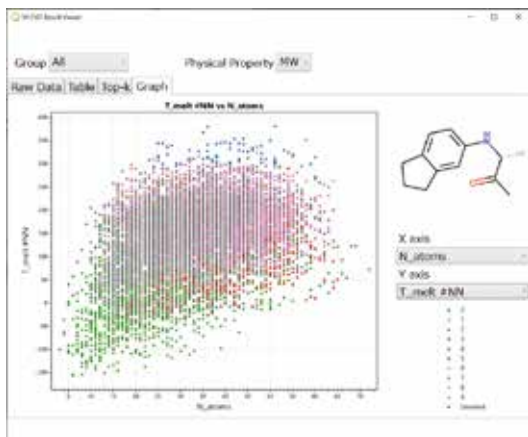
データベースがある場合は、機械学習により高速な分子構造の探索ができます。さらにベイズ最適化技術により探索された分子構造群を効率的に実験する実験計画や、組成および製造条件・工程の最適化まで行うことをサポートします。



# M-EVO®は、プログラミング知識を必要としないMI・高機能材料開発支援ソフトウェアです。

## 実験データが無くても始められる 多様な分子構造探索 <逆問題>

実験データを用意することなく、量子化学シミュレーションにより多様な分子構造の探索ができます。屈折率や合成の可能性など複数の目的物性を考慮することができます。



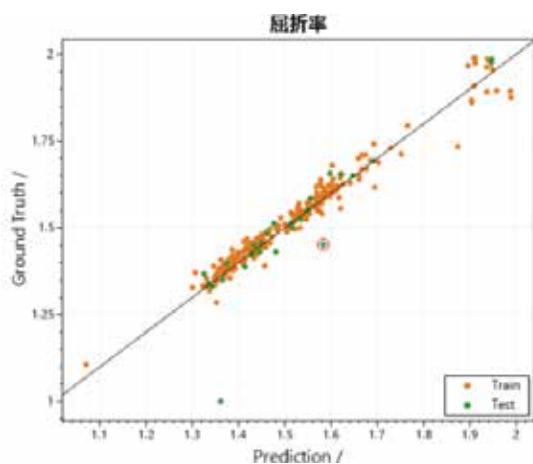
## 組成および製造条件・工程の最適化<ベイズ最適化>

材料の組成比や実験条件の最適化ができます。これまでの実験条件をもとに、ユーザーと対話しながら、現時点で考えられる最善の実験条件を提案することができます。

| # of Exp. | A      | B      | X  | 予測された X コント |
|-----------|--------|--------|----|-------------|
| 10        | 33.327 | 56.482 | 0  | -0 ± 20     |
| 11        | 7.366  | 35.311 | 0  | -0 ± 20     |
| 12        | 36.18  | 51.205 | 0  | +1 ± 20     |
| 13        | 80.13  | 50.737 | 30 | 30 ± 20     |
| 14        | 17.479 | 50.379 | 0  | 0 ± 20      |
| 15        | 12.008 | 7.537  | 4  | 4 ± 20      |
| 16        | 80.627 | 26.578 | 54 | 54 ± 20     |
| 17        | 40.751 | 88.129 | 0  | 0 ± 20      |
| 18        | 96.58  | 30.576 | 66 | 63 ± 20     |
| 19        | 99.733 | 30.359 | 69 | 64 ± 20     |
| 20        | 99.413 | 29.314 | 70 | 64 ± 20     |
| 21        | 94.618 | 24.667 | 70 | 63 ± 20     |
| 22        | 95.372 | 31.245 | 64 | 63 ± 20     |
| 23        | 99.76  | 25.549 | 75 | 74 ± 31     |

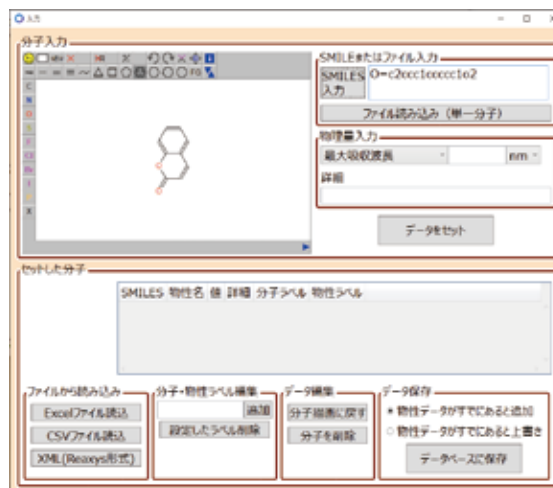
## 物性予測モデルの構築<機械学習>

実験データが十分にある場合、ユーザー自身で物性予測モデルを作ることができます。これを使って、所望の物性を満たす分子構造を高速に探索することができます。



## 分子物性データベース

機械学習や分子構造探索時の種分子用に、分子物性データベースを作成することができます。分子は2Dエディタから入力することができます。作成したデータをExcelで編集することもできます。



|             |   |
|-------------|---|
| 製品名         | M-EVO®  |
| 機能          | 分子探索、分子提案、組成提案、回帰モデル作成、分子データベース作成   |
| 扱うことのできる物性例 | <p>&lt;学習済み推論モデル&gt;<br/>HOMO-LUMO ギャップ、吸収波長、比熱、誘電率、屈折率、密度、沸点、融点、臨界点、引火点、熱伝導率、温度拡散率、表面張力、logP、溶解度パラメータ、ほか</p> <p>&lt;ユーザー作成の推論モデル&gt;<br/>手持ちの実験値や公開データから推論モデルを構築できます</p> <p>&lt;計算化学シミュレーション&gt;<br/>HOMO、LUMO、HOMO-LUMO ギャップ、双極子モーメント、分極率、密度、誘電率、屈折率、吸収波長、発光波長、ほか</p> <p>詳しくはお問い合わせください</p> |
| 動作環境        | クライアント PC : Windows 10、11<br>クラウド : Science Cloud   |
| 価格          | お問い合わせください  |