

事業目的

これまでの材料開発では、多くの候補材料について実験または計算機シミュレーションによるスクリーニング(第一のアプローチ)を行ったり、大量のデータを用いたマテリアルズインフォマティクス(MI)を活用して候補材料を見出したり(第二のアプローチ)ということが行われてきたが、これら2つのアプローチでは、多くの費用・人員などの開発資源が必要で、開発に要する時間がかかるという問題があった。
これまでにない第三のアプローチとして当社の基盤技術を用いて従来の新規機能性材料開発の問題点を解決し、理論に立脚した材料開発を可能とし、社会変革を実現する。

事業内容

当社の基盤技術には量子論に基づく新概念である振電相互作用密度を用いた分子設計・反応設計があり、本研究開発では、これらの機能を統合・搭載した分子設計支援ソフトの開発を行う。
これによって材料開発における課題解決を図る。

事業成果

社内用途のプロトタイプ版を参考に、利便性・汎用性を向上させ、ライセンス秘匿化機能を搭載することで、クライアントに提供できるソフトウェアを作成した。動作検証も順調に進んでおり、ソフトウェアの入出力、また解析ツールの動作を確認した。それとともに、その機能が分子設計コンサルティング業務において、実際に大手企業メーカーより提示された現象の原因究明に大きく貢献したことで、有用性も併せて実証することができた。市場調査として企業や大学研究室からのヒアリングを行い、当社ソフトウェアに対する期待と需要を再確認できるフィードバックが得られた。

事業者情報

株式会社MOLFEX
(京都大学発スタートアップ)

所在地：京都府京都市

設立年：2008年

HP：<https://molfex.com/>



概要図等

本事業に係る分子設計支援ソフトのイメージ図

