START 大学・エコシステム推進型 大学推進型

（2024年4月時点）

採択年度：2023年度

研究代表者：早稲田大学データ科学センター　准教授（任期付）　谷口 卓也

課題名

有機固体MIのWebプラットフォーム開発

プロジェクトの概要

マテリアルズインフォマティクス(MI)により、有機固体開発の効率化、製薬の安定性予測、および機械学習の信頼性を向上させるためのWebプラットフォームを開発する。研究代表者はこれまで有機固体材料の物性予測を行う機械学習モデルを構築しており、ブラウザ上でユーザーが新規化合物情報を入力すると学習済みモデルに基づき物性予測値を出力するプラットフォームを開発し、材料・薬剤開発を効率化することを目指す。ユーザーとしては、材料素材メーカーおよび製薬企業の研究部門やアカデミアの研究者を想定している。

ビジネスモデル（終了時）

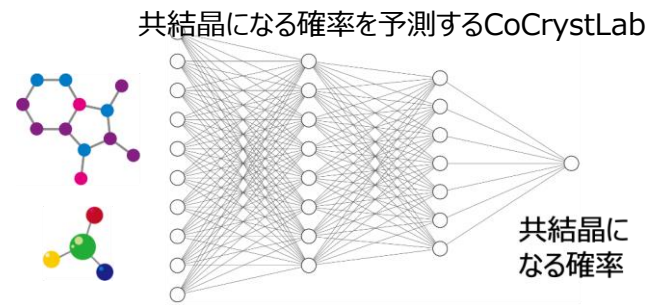
- 第一段階目は国内大手製薬企業の結晶化部門を顧客に、CoCrystLabサービスを月額50万円で提供する。
- 次いで、海外の製薬企業への展開し、将来的には材料メーカーにも提供する。

活動計画（申請時）

- Webプラットフォームの試作版開発
- 新規物性に対応した機械学習モデルの構築
- 市場調査

活動結果と成果（終了後）

- 市場調査の結果、現状は材料メーカーにニーズはなく、製薬企業の共結晶作製にニーズがあることが分かった。
- 構造相転移の機械学習モデルの有効性を検証し、他の物性（バンドギャップ、エネルギー変換効率）の予測モデルも構築した。

今後の事業化に向けた活動予定

- セキュアなWebプラットフォーム構築、連合学習の実装
- 顧客ニーズのさらなる具体化（特に、利用金額や提供方法）
- 事業化に向けたチーム体制構築