

研究開発をサービスとして支える、RaaS基盤。

Amaterus AIは、化学AIを統合し、研究開発と意思決定を支えるRaaS（Research as a Service）基盤です。知識化・データベース化から合成ルート探索、反応予測・検証、プロセス概念設計までをつなぎ、「どうするか」を導きます。

Research as a Service

研究に必要な知識・AI・計算をサービスとして利用できるようにし、知識化・探索・検証・概念設計をひとつの基盤でつなぎます。得られた知見を次の実験や候補の選定に活かし、研究開発と意思決定を支えます。

開発期間を短縮する

知識の整理からルート探索、反応検証、プロセス概念設計までをつなぎ、研究開発を進めます。

研究開発コストを抑える

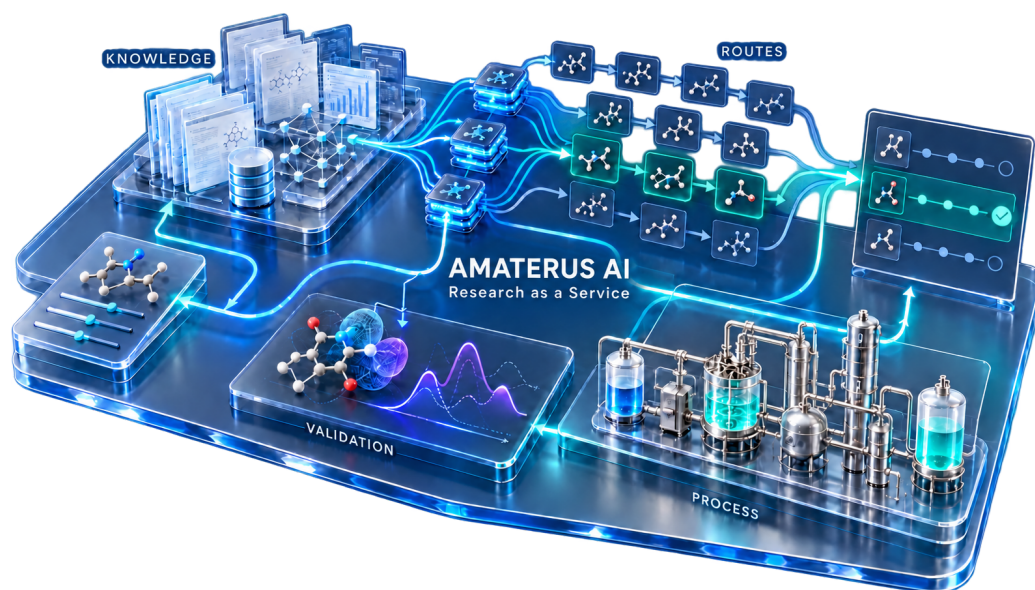
蓄積した知識と事前検証を活用し、実験や検討の重複を減らします。

意思決定の質を高める

多彩な候補をデータと計算に基づいて検討し、根拠のある判断につなげます。

有望候補へ研究資源を集中

有望な合成ルートを選定し、実験・人員・計算資源を重点的に配分します。



研究開発の流れをつなぐ、化学AI。

社内実験データ・論文・特許を活用可能な知識へ。多彩な合成ルートから有望な候補を選び、反応の実現可能性を確かめ、工程や反応条件の概念設計につなげます。

知識化・データベース化AI

社内実験データ・論文・特許などを知識化して整理し、活用可能にします。

合成ルート探索AI

複数の経路探索AIが多彩な候補を創出し、コンセンサスAIが有望な合成ルートを選定します。

反応予測・検証AI

反応の実現可能性を、データと量子化学計算で事前に確認します。

プロセス概念設計AI

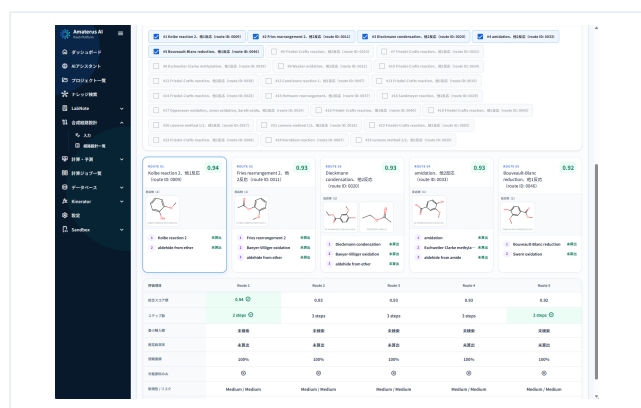
合成ルートをもとに、工程や反応条件などのプロセスを概念設計します。

研究開発を支える画面例

候補の比較、根拠の確認、知識の活用、分子構造の検討をひとつの環境で。

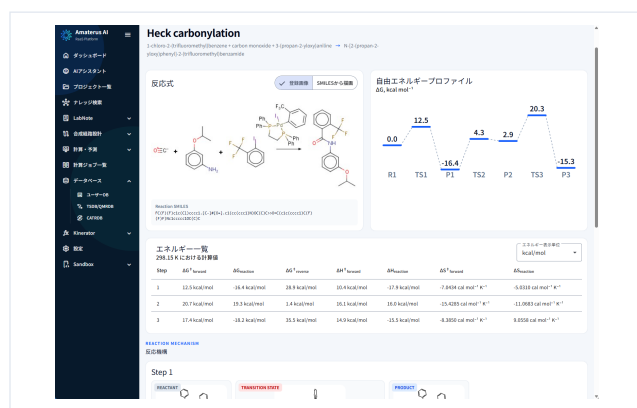
01

候補経路を横並びで比較



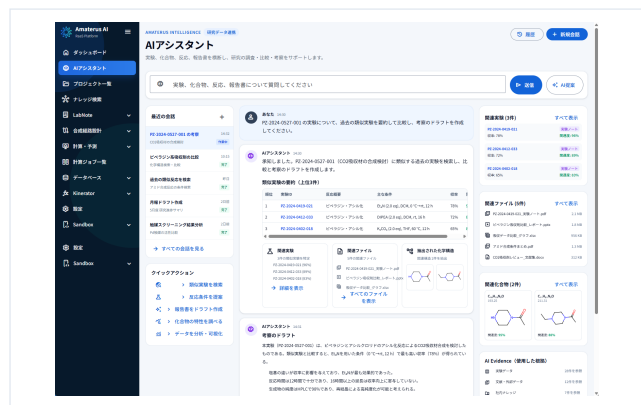
02

反応評価DB：反応と計算結果の参照



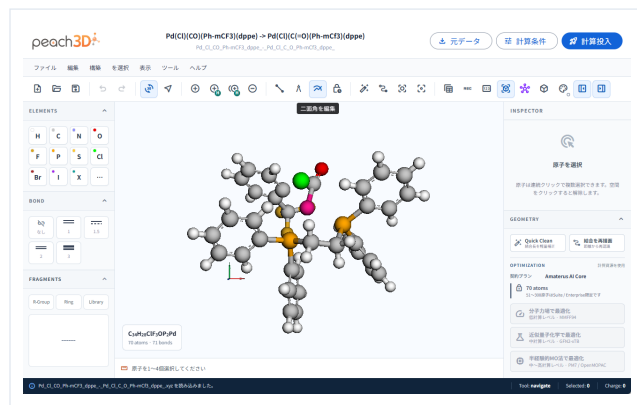
03

AIアシスタント：実験・文書を横断した情報の確認



04

peach3D：構造を確認し、必要な計算へ



画面は操作例です。表示されたスコアは実験の成功確率や収率を保証するものではありません。

製品画面をWebサイトで見ると

研究開発を進める人と、支える人のために。

合成・プロセス研究者

既存経路の代替案や原料からの到達経路を比較。候補を絞り込む際に、反応の根拠と追加検証が必要な工程を同時に確認します。

研究マネージャー

候補の採否と理由、未解決の課題、次に必要な実験・計算を確認。進捗報告のために背景を集め直す手間を減らします。

R&D DX・情報部門

文書や実験情報を、構造・反応・条件に関連付けて再利用。情報の出典を確認できる形に整え、研究テーマをまたぐ知識の活用を支えます。

IT・セキュリティ・ガバナンス

保存場所、アクセス権、認証、ログ、保持・削除と社内連携を整理。研究業務に必要な使いやすさと、組織の情報管理要件を併せて検討します。

知識から、次の研究開発へ。

社内実験データ・論文・特許を活用可能な知識へ。多彩な合成ルートから有望な候補を選び、反応の実現可能性を確かめ、工程や反応条件の概念設計につなげます。

知識を活かし、「どう作るか」を具体化する。

知識化・データベース化AI → 合成ルート探索AI → 反応予測・検証AI → プロセス概念設計AI

1. 知識化・データベース化AI

社内実験データ・論文・特許などを知識化して整理し、活用可能にします。

2. 合成ルート探索AI

複数の経路探索AIが多彩な候補を創出し、コンセンサスAIが有望な合成ルートを選定します。

3. 反応予測・検証AI

反応の実現可能性を、データと量子化学計算で事前に確認します。

4. プロセス概念設計AI

合成ルートをもとに、工程や反応条件などのプロセスを概念設計します。

次の研究開発へつなげる

探索・検証・概念設計の結果を研究チームで確認し、次の実験や検討へつなげます。得られた実験データを再び知識として整理し、その後の研究開発に活用します。

導入評価の進め方

対象業務を選び、現在の業務を比較の基準にします。必要な機能とデータの保存先をデモで確認し、評価・導入の範囲と結果の確認方法を整理します。

プランと価格

合成経路の設計・選定にはCore。自社の知識活用や反応評価、プロセス設計まで広げるならSuite。専用環境や高度な社内連携が必要な場合は、CoreまたはSuiteを基礎にEnterpriseで導入・運用を設計します。

Amaterus Core ・ 500万円～ / 年

標準5名程度・追加可。標準サポート・利用開始時の支援。組織単位の年間契約。合成経路を生成・比較し、選定の根拠や判断を記録。実験ノート、ユーザDB（5件まで）、ナレッジ検索、基本量子化学計算、プロジェクト・ジョブ管理を利用できます。

Amaterus Suite ・ 2,000万円～ / 年

標準20名程度・追加可。優先サポート・導入支援。標準価格・ご利用条件に応じて個別見積。高度な経路設計、知識化、量子化学による反応評価、プロセス設計をひとつの環境で利用。基本API・SSO連携を含みます。現在、提供企業を限定しています。

Amaterus Enterprise ・ 個別見積

人数・部門・拠点に合わせて個別設計。個別SLA・専任支援・運用設計。必要な機能・構成を伺ってお見積もり。CoreまたはSuiteを基礎に、企業内反応DBとの連携、社内の知識収集・活用、専用環境を組み合わせます。社内システムとの統合から、サービス水準（SLA）や運用体制まで個別に設計します。

Suiteのご利用について

Suiteは現在、提供企業を限定しています。ご検討の研究テーマや利用人数をお聞かせください。必要なデータ量、計算資源、外部連携、導入範囲を確認し、ご利用条件と価格を個別にご案内します。

Enterpriseの導入について

Enterpriseでは、CoreまたはSuiteを基礎に、必要な機能・専用環境・社内連携を組み合わせます。ご希望の構成と運用体制を伺い、提供範囲と費用をお見積もりします。

機能・サービス	Core	Suite	Enterprise
A. 合成経路設計			
コンセンサスAIによる逆合成経路設計	✓	✓	✓
複数の合成経路エンジンの使用・プリセット知識ベースの利用	✓	✓	✓
経路ツリー表示・ランキング・スコア比較	✓	✓	✓
反応条件予測・市販性・概算価格表示	✓ 基本	✓	✓
経路スコアの内訳表示	✓ 基本	✓	✓
反応評価連携（量子化学計算連携機能）	✓ 一部	✓	✓
順合成経路・順逆ハイブリッド経路設計	-	✓	✓
合成経路エンジンへの詳細条件設定（Advanced Mode）	-	✓	✓
自前反応DB等を用いたエンジン用知識ベースの構築	-	✓	✓
企業内反応DBとの連携・関連情報表示	-	-	✓
Edge Knowledge / Crawler（社内化学情報資産の自動知識化・DB化）	-	-	✓
B. 知識化・化学情報資産			
実験ノート利用	✓	✓	✓
ユーザデータベースの構築・インポート	✓ 5件まで	✓	✓
ナレッジ検索	✓	✓	✓
AIアシスタントの利用	✓ 機能制限あり	✓ 固定使用量＋従量	✓ 個別設定
Hybrid Knowledge Edge（社内化学情報資産の活用）	-	-	✓
C. 反応評価（量子化学計算）			
量子化学計算・反応解析	✓ 基本	✓	✓
計算機リソース	✓ 共有	✓ 専有	✓ 個別設計
高精度な量子化学計算の実施	-	✓	✓
量子化学反応DB（TSDB/QMRDB）の利用	-	✓ 基本	✓
ユーザ計算結果のインポート	-	✓	✓
触媒反応DB（CATRDB）の利用	-	-	✓

機能・サービス	Core	Suite	Enterprise
D. プロセスの概念設計			
反応速度論シミュレータ（Kinerator）	-	✓	✓
プロセス最適化の実施	-	✓	✓
プロセスシミュレータの利用	-	✓ 基本	✓
E. 組織・連携・運用			
ユーザーシート数	5 / 追加可	20 / 追加可	個別設計
プロジェクト管理	✓	✓	✓
組織内でのデータ共有	✓	✓	✓
受託研究・共同研究連携	✓	✓	✓
API / 外部システム連携	オプション	✓ 基本	✓
SSO / ID管理 / 監査	-	✓ 基本	✓
専用DB・専用テナント・専用計算環境	-	オプション	✓
ELN / LIMS / 社内DB / HPC 統合	-	オプション	✓
個別SLA・段階検収・運用設計	-	-	✓

✓：標準機能 基本／一部：基本機能または一部の機能を含む オプション：追加契約 —：標準には含まれない Enterpriseの機能は、ご要望に応じて構成します。実際の提供範囲は、選択するCore／Suiteの機能と個別契約によって異なります。価格は税抜です。組織単位での契約を基本とし、標準ユーザー数を超える利用、計算資源、ストレージ、データ量、外部連携、専用環境、SLA等により費用が変動します。

研究データと導入環境

お客様の明示的な許可なく、研究データをモデル学習に利用しません。利用目的、保存先、保持期間、削除、データ出力、秘密保持の条件を契約で定めます。

標準クラウド (Core / Suite)

TSテクノロジーが管理する共通クラウドを、Webブラウザから利用。Core・Suiteの標準的な導入環境。

専用クラウド／顧客VPC (Enterprise)

専用テナントやお客様のクラウド環境へアプリケーション・DBを配置。データ分離や個別のサービス水準（SLA）に対応。

Hybrid Knowledge Edge (Enterprise)

原文書・原データを社内に保持し、承認済みの知識データ・検索インデックス・メタデータのみをクラウドと連携。

社内窓口＋クラウド処理 (Enterprise)

社内URLやゲートウェイから、承認したクラウドサービスへ接続。社内のアクセス窓口・認証を維持しながら利用。

オンプレミス／プライベートクラウド (Enterprise)

アプリケーション・DB・情報収集・計算処理をお客様の環境へ配置。閉域や完全な社内運用に対応。

評価する業務を明確に

開発期間、研究開発コスト、意思決定の質、有望候補への研究資源の集中という観点で、確かめたい点を決めます。現在の業務を比較の基準にします。

最初のご相談

最初のお問い合わせで、機密の化学構造や未公開データを送る必要はありません。まずは検討したい業務をお聞かせください。

製品情報を詳しく見る

機能概要、製品画面、活用の流れ、導入ガイド、セキュリティ、ライセンス・約款は、本サイトの各ページでご確認いただけます。

株式会社TSテクノロジー

製品デモ・導入に関するご相談は、お問合せページよりお寄せください。

<https://amaterus.ai/ja/contact/>