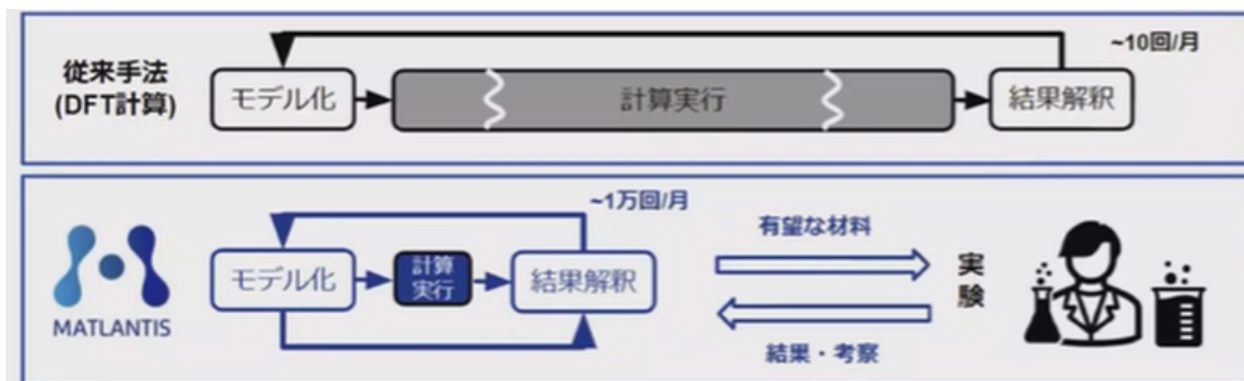


Preferred Networks と ENEOS が共同開発した Matlantis™ は、従来の第一原理計算の約 10 万倍のスピードで計算可能な汎用原子レベルシミュレータである。Matlantis の活用により、マテリアルズ・インフォマティクスの活用が普及することが期待される。

企業名	株式会社 Preferred Computational Chemistry (PFCC)		
研究分野	Preferred Networks の深層学習などの AI 技術と計算機インフラに、ENEOS の化学領域の知識やノウハウの粋を集めてサービスを開発する		
所在地	〒100-0004 東京都千代田区大手町1丁目6-1 大手町ビル		
TEL	—	URL	https://matlantis.com/ja/company
資本金	3.1 億円： (株)Preferred Networks 51%、 ENEOS(株) 49%	在籍者数	—

【本技術の概要】

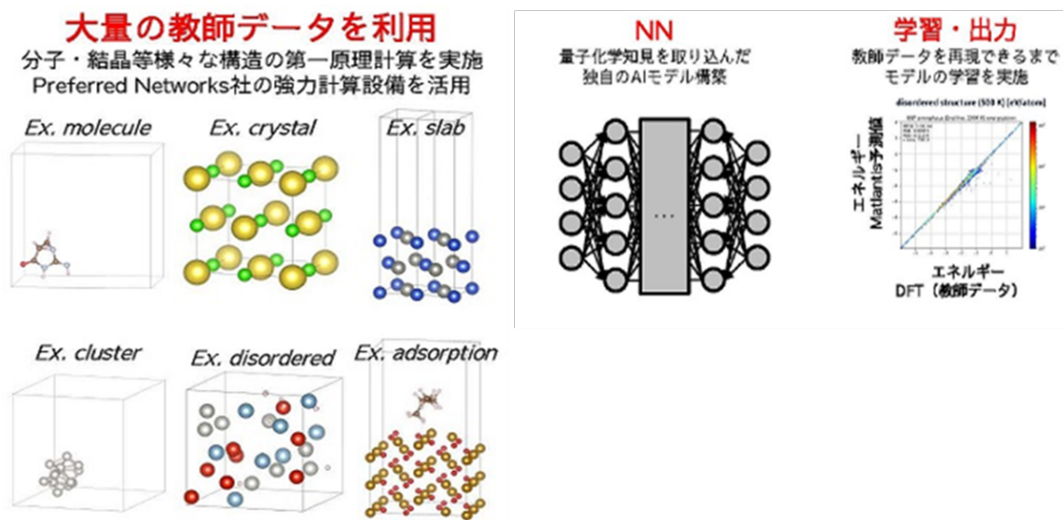
(株)Preferred Networks (プリファードネットワークス：PFN、代表取締役最高経営責任者：西川徹) と ENEOS(株) (エネオス、代表取締役社長：齊藤猛) は、高精度に多様な化学反応や原子構造を再現できる原子レベルシミュレータ Matlantis™ (マトランティス) を共同開発した。Matlantis は、原子スケールで材料の挙動を再現して大規模な材料探索を行うことができる汎用原子レベルシミュレータで、従来の物理シミュレータに深層学習モデルを組み込むことで、計算スピードを従来の数万倍に高速化するとともに、領域を限定しない様々な物質への適用を可能にした。地球上にある物質の 99.99% 以上に当たる 72 元素に対応し、特に、排ガス浄化触媒や水素吸蔵合金などに用いられるレアアース、次世代太陽電池での活用が期待されるハロゲン元素などにも対応可能となった。また、Matlantis は、材料開発に際し、これまでにない高速性、汎用性を兼ね備えたシミュレータをクラウドサービスとして提供する。



【基本原理】

【有望技術紹介 No.93】

物理に基づく従来の汎用的な原子シミュレーションでは、シュレーディンガー方程式などの量子力学に基づく「第一原理計算」を用いて、結晶など様々な構造における原子の周りを飛び交う各電子の状態からポテンシャルエネルギーを求め、計算対象の電子状態を解く必要がある。そのため、計算に多大な時間がかかっていた。Matlantisでは、独自に開発したNeural Network Potential (NNP) という深層学習技術を使って原子の挙動を再現するために必要なエネルギーや力を直接学習するので、電子状態の計算をする必要がない。その結果、大幅に計算時間を短縮できる。NNPでは、材料を構成する原子の位置情報(x、y、z座標)とポテンシャルエネルギーの関係を、 10^7 という膨大な数の組み合わせで学習したニューラル・ネットワークで解析モデルを構築し、任意に作った原子配置のポテンシャルエネルギーが瞬時に求まる。ポテンシャルエネルギーがわかれば分子の運動や材料の物性まで予測できる。これによって汎用性を維持したまま計算コストを大幅に削減し、従来手法よりも現実に近い複雑な系を大量かつ高速に計算することができた。



【特徴】

Matlantisは、原子スケールで材料の挙動を再現して大規模な材料探索を高速で行うことのできる汎用原子レベルシミュレータとして威力を発揮する。従来の物理シミュレータに深層学習モデルを組み込むことで、計算スピードを従来の数万倍に高速化するとともに、領域を限定しない様々な物質への適用を可能にした。その特徴は、見出された実験結果を計算化学による解釈に加え、有望な材料探索や反応経路探索に応用でき、しかも計算するための環境構築の手間が不要で、容易にブラウザ上で使えることから、計算化学の専門家だけではなく、将来、実験化学者なども使えることが期待できる。

<マトランティス (Matlantis) の特徴>

- ① 72 元素と、幅広い元素・構造に対応する
- ② 従来手法に比べ数時間～数カ月かかったシミュレーションの計算時間を数秒で完了できる
- ③ ブラウザを立ち上げれば、シミュレーションを開始できるので使い易い



地球の地殻および海に含まれる元素の質量比で 99.9969%以上。また、未知の材料を含む、分子や結晶などの任意の原子の組み合わせにおいてシミュレーションが可能である。今後さらにサポートする元素の拡大を目指す

引用：<https://www.preferred.jp/ja/>

図1. 72 元素・構造に対応（2023 年 3 月時点）

<従来手法の 10,000 倍以上高速化>

DFT（Density Functional Theory：密度汎関数法）では、高性能なコンピュータを用いて数時間～数ヶ月かかった原子レベルの物理シミュレーションを、数秒単位で行うことができる。（図2）

<使いやすさ>

学習済み深層学習モデル・物性計算ライブラリ・高性能な計算環境をパッケージにすることで、ハードウェアの準備や環境構築をする必要なく、ブラウザを立ち上げればすぐにシミュレーションを開始して材料探索が可能。また、従来の機械学習ポテンシャルとは異なり、ユーザーによるデータ収集や学習は不要となる。（図3）

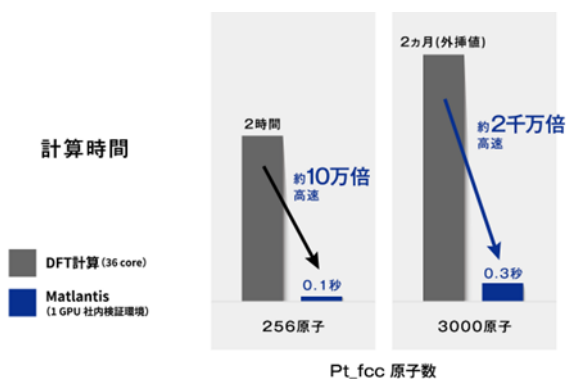


図2. 高速計算が可能

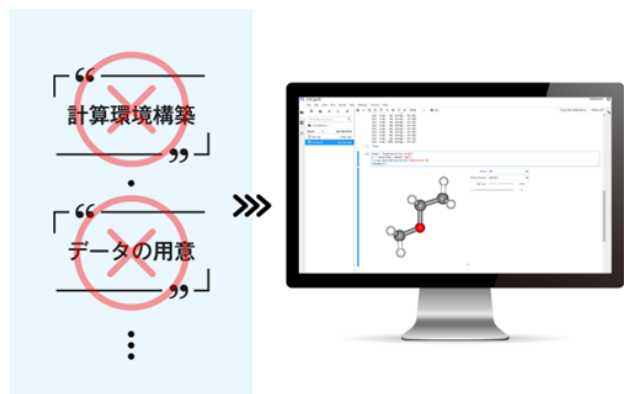


図3. 使いやすさ

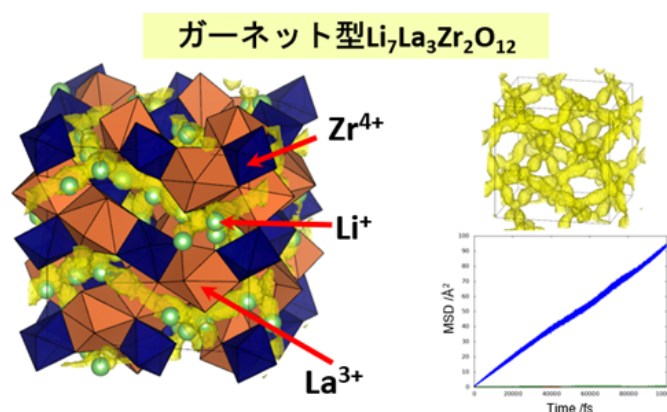
引用：<https://matlantis.com/ja/>

【市場展開例】

Matlantis の販売を行う PFCC が、2021 年 7 月にクラウドサービスとして提供を開始してから、2022 年 12 月時点で、45 の企業・研究団体に導入され、触媒、電池材料、半導体、合金、潤滑油、セラミック材料、化学材料など、幅広い開発に用いられている。マテリアルズ・インフォマティクスのコアツールとなる Matlantis は、様々な材料開発分野において革新的な素材の開発を加速させ、イノベーション創出・実現に貢献して行く。材料探索のためのユニバーサルな Neural Network Potential の具体例を紹介する。

＜ガーネット型酸化物材料のリチウムイオン導電性評価＞

不燃性の Li イオン導電性酸化物を固体電解質として用いれば安全な電池を作成できるが、Li 伝導性の評価が欠かせない。酸化物固体電解質材料であるガーネット型 $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ 材料に対して高速かつ高精度な Matlantis を使い分子動力学法(MD)を実行し、Li イオン導電性を評価した。あわせて同一条件で行い、第一原理分子動力学法 (FPMD) の計算結果と比較評価した。

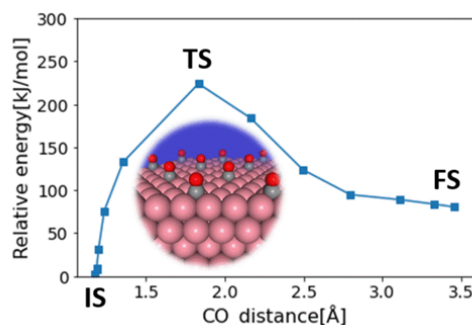


引用：<https://matlantis.com/ja/calculation/evaluation-of-lithium-ion-conductivity-of-garnet-type-oxide-materials>

図4. ガーネット型酸化物材料のリチウムイオン導電性評価

＜コバルト触媒における CO 解離反応の活性化エネルギー計算＞

合成燃料である炭化水素を作る Fischer-Tropsch (FT) 反応は、非常に多くの素反応からなる。その中でも CO 解離反応は律速となる反応のひとつと考えられている。今回コバルト触媒における CO 解離活性化エネルギーを、Matlantis を用いて計算した。同時に、先行文献による遷移経路に沿ったエネルギー曲線から反応の活性化エネルギーを求める NEB (Nudged Elastic Band) 計算で得られたと同等な精度で CO 解離活性化エネルギーを計算することができた。

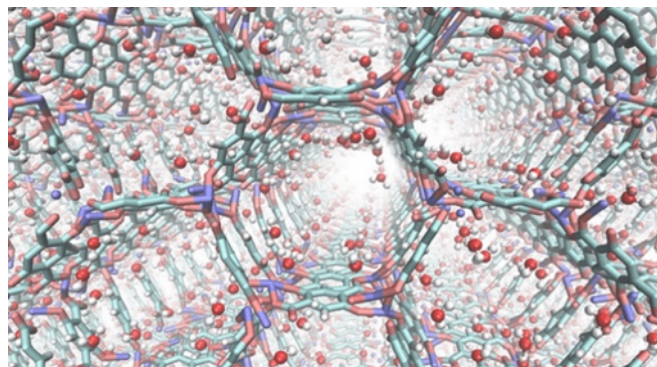


引用：<https://matlantis.com/ja/calculation/calculation-of-the-activation-barrier-for-co-dissociation-on-cobalt-fischer-tropsch-catalysts>

図5. コバルト触媒における CO 解離反応の活性化エネルギー計算

<MOF-74Ni における H₂O 分子の吸着と拡散挙動>

Metal-organic frameworks (MOFs) はナノ細孔構造を持つ結晶材料で、金属サイトが細孔内方向にむき出し状態で吸着脱離等、化学反応の起点になる。その中でも H₂O の吸着エネルギーや高温状態での吸着分子の挙動を、Matlantis を用いて計算した。得られた吸着エネルギーは、先行文献と同等な精度で H₂O の吸着エネルギーを計算することができた。

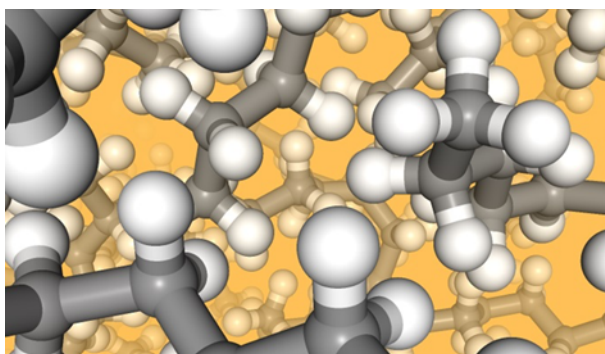


引用：<https://matlantis.com/ja/calculation/adsorption-and-dynamics-of-h2o-molecules-in-mof-74ni>

図6. MOF-74Ni における H₂O 分子の吸着と拡散挙動

<逆非平衡分子動力学シミュレーションによる液体粘度の予測>

摺動部の摩擦損失を低減することが有効であることから、潤滑油等の流体には低摩擦化、低粘度化が求められている。流体の設計にあたり、2 種以上の混合系や、新規な材料の粘度の予測にはシミュレーションが有効で、一般的な有機分子であるアルカンを対象に、Matlantis を用いて粘度を計算した。計 3 回の計算値共に、実験値から大きく外れることなく、実験値からのズレは最大でも 14%の精度で予測ができた。



引用：<https://matlantis.com/ja/calculation/prediction-of-fluid-viscosity-of-alkanes-by-reverse-non-equilibrium-molecular-dynamics-simulation>

図7. 逆非平衡分子動力学シミュレーションによる液体粘度の予測

参考：利用企業・団体（一部）

旭化成、北海道大学、JX、クラレ、花王、名古屋大学、NIMS、パナソニック、住友電工、東京工業大学、早稲田大学、エネオス

【今後の予定と課題】

今後、PFP (Preferred Potential) を活用した具体的な材料探索への取り組みに加え、NNP (Neural Network Potential) 以外での計算材料科学と深層学習の融合も研究対象とする。分子動力学よりもスケールの小さい側、大きい側のいずれにも工学的に重要な問題があることから、NNP とは別の、あるいは NNP と組み合わせた機械学習技術の適用について研究を進めて行く。このような活動内容に関連する分子動力学のスケールでの技術開発を進める予定である。

<PFCC 代表取締役社長 岡野原大輔 氏のメッセージ>

「これまで計算化学は大きな成果を上げてきたものの、計算時間がかかり、問題ごとに手法を特化し、高性能な計算環境を用意する必要がありました。PFCC がクラウドサービスとして提供する汎用原子レベルシミュレータ Matlantis は、高速かつ汎用的な計算エンジンと、環境構築の手間なくブラウザ上で使える利便性が特長です。Matlantis は、材料開発において実験結果を解明するだけでなく、新材料の発見や発明、未知の原理の解明にも役立てると考えています。私たちは、材料開発に携わる世界中の研究者が、世界の未来を良い方向に変えることのできる革新的な材料を発見できるよう、これまでにない強力なツールの提供を通して支援していきます。」

専門家による目利きコメント

汎用原子レベルのシミュレータ Matlantis は、計算のための環境構築の手間が不要で、ブラウザ上で手軽に活用でき、しかも計算速度も速い。研究開発の担当者が実験結果を解明するだけでなく、新材料の発見、発明、未知の原理の解明にも役立つ可能性を持っている。革新的なツールと思われる。

お問い合わせ

株式会社 Preferred Computational Chemistry (PFCC)
〒100-0004 東京都千代田区大手町1丁目6-1 大手町ビル
問合せ窓口： <https://matlantis.com/ja/contact>