

2025/3/18 デジタル人材育成講演会

計算科学を用いた新規材料開発支援 ～AIポテンシャルの活用～

Preferred Computational Chemistry

本日のアジェンダ

1. 自己紹介・会社紹介 (5分)
2. イントロダクション：AIが材料開発で活用される時代 (10分)
3. 汎用原子レベルシミュレーター：Matlantisとは (5分)
4. 化学シミュレーションの一例：原子の個性を目で見てみる (15分)
5. Matlantis活用事例のご紹介 (20分)
 - a. 電池材料
 - b. 触媒
 - c. 有機分子・高分子・超分子
 - d. 半導体
6. 質疑 (5-10分)

平井 貴裕 | Takahiro Hirai

学部

理論手法開発

修士

排ガス浄化触媒の計算

材料
メーカー

先端材料研究所
DX・MI推進(本社)
工場付き研究所 @ 愛媛
DX・MI推進(本社)

現職

計算化学の利用促進



今治市玉川町・鈍川にて

Preferred Computational Chemistry (PFCC) の概要

所在地：東京都千代田区大手町 1 丁目 6 - 1 大手町ビル

設立年月日：2021年6月1日

代表者：代表取締役社長 岡野原 大輔

Message

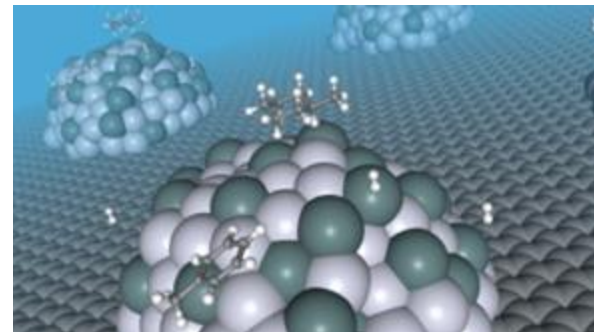
メッセージ

革新的なマテリアルの創出に貢献し、
持続可能な世界の実現を目指します



ENEOSとプリファード、AI活用で新会社
化学や医薬の材料探索

2021年4月28日 2:00 [有料会員限定]



出展：日本経済新聞

<https://www.nikkei.com/article/DGKKZO71433790X20C21A4TJ1000/>

業務内容：

汎用原子レベルシミュレーションクラウドサービスの販売、コンサルティング

AIが材料科学で活用される時代

水素製造触媒で最高効率、物材機構 AIで短期間に発見

科学&新技術 +フォローする

2023年12月14日 11:00

<https://www.nikkei.com/article/DGXZQOUC0196O0R01C23A2000000/>

Microsoft、全固体電池の新素材発見 AI使い2週間で

東洋経済 +フォローする

2024年1月22日 2:00 [技術解説記事]

保存

共有

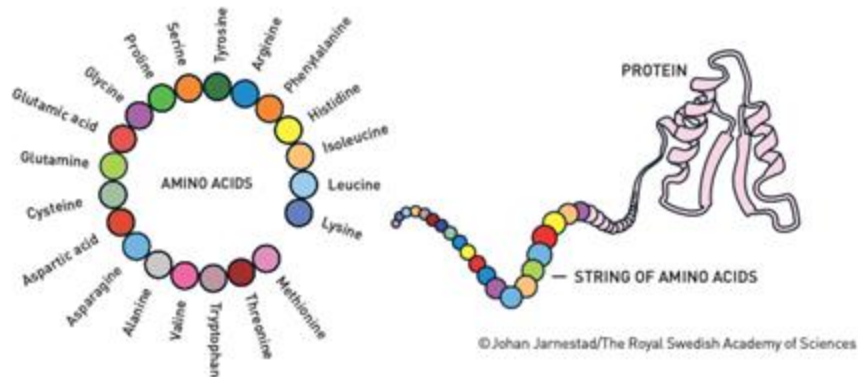


<https://www.nikkei.com/article/DGXZQOUC0196O0R01C23A2000000/>

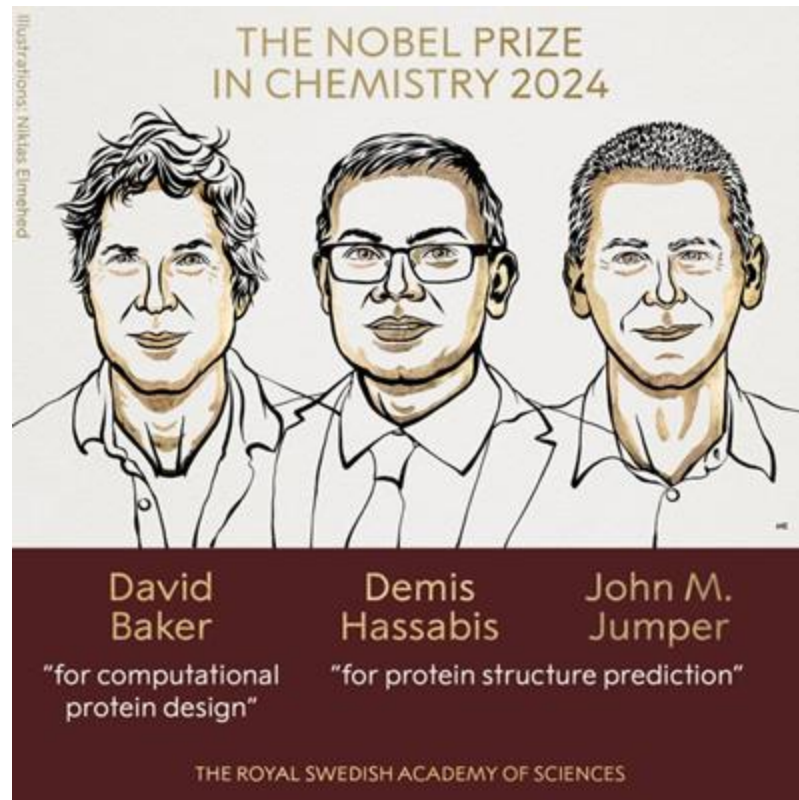
AIを使って3年分の研究を2週間で達成した>>マイクロソフト発表

ノーベル化学賞 2024 | Alpha Fold 2

- Alpha Fold 2
- AI技術を用いてアミノ酸配列からタンパク質の折りたたみ構造を予測
- AIがマテリアルの分野に強い影響力を持ち始めている



<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/press-release/>

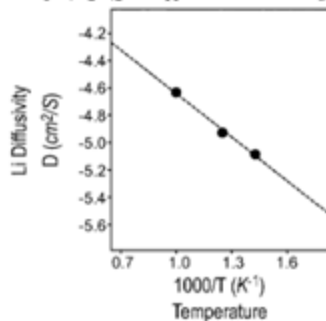


<https://x.com/NobelPrize/status/1843951197960777760>

全固体電池 特許 | 原子レベルシミュレーション

- Samsung Electronics and Univ. Californiaから固体電解質材料に関する出願
- 様々な元素を添加して原子レベルシミュレーションでLiの拡散係数を計算
- 有望な候補材料については合成してX線回折法で構造確認

FIG. 4 $\text{Li}_3\text{Al}_4\text{Si}_2\text{O}_{12}\text{Br}$: $\sigma_{\text{RT}} = 7.116 \text{ mS/cm}$, $E_g = 0.211 \text{ eV}$



What is claimed is: 1. A solid-state ion conductor comprising a compound of Formula (I):

$\text{Li}_4+(b-a)y+c\delta+(a-y)x\text{M}1_3+x+y\text{M}2_3-y\text{M}^n \times \text{O}_{12}\text{X}_1 \times \text{X}_2 \times 1-c$ Formula (I)

wherein, in Formula (I),

M1 is a cationic element having an oxidation state of a, wherein a is +2 or +3;

M2 is a cationic element having an oxidation state of b, wherein b is +4 or +5;

provided that when M1 is a cationic element having an oxidation state a of +2, M2 is a cationic element having an oxidation state of +5, and when M1 is a cationic element having an oxidation state a of +3, M2 is a cationic element having an oxidation state of +4;

Mⁿ is a cationic element having an oxidation state of y, wherein y is less than b;

X1 is a cluster anion having an oxidation state of (-1-δ), wherein δ is 0 or 1;

X2 is a halogen;

0<cs1;

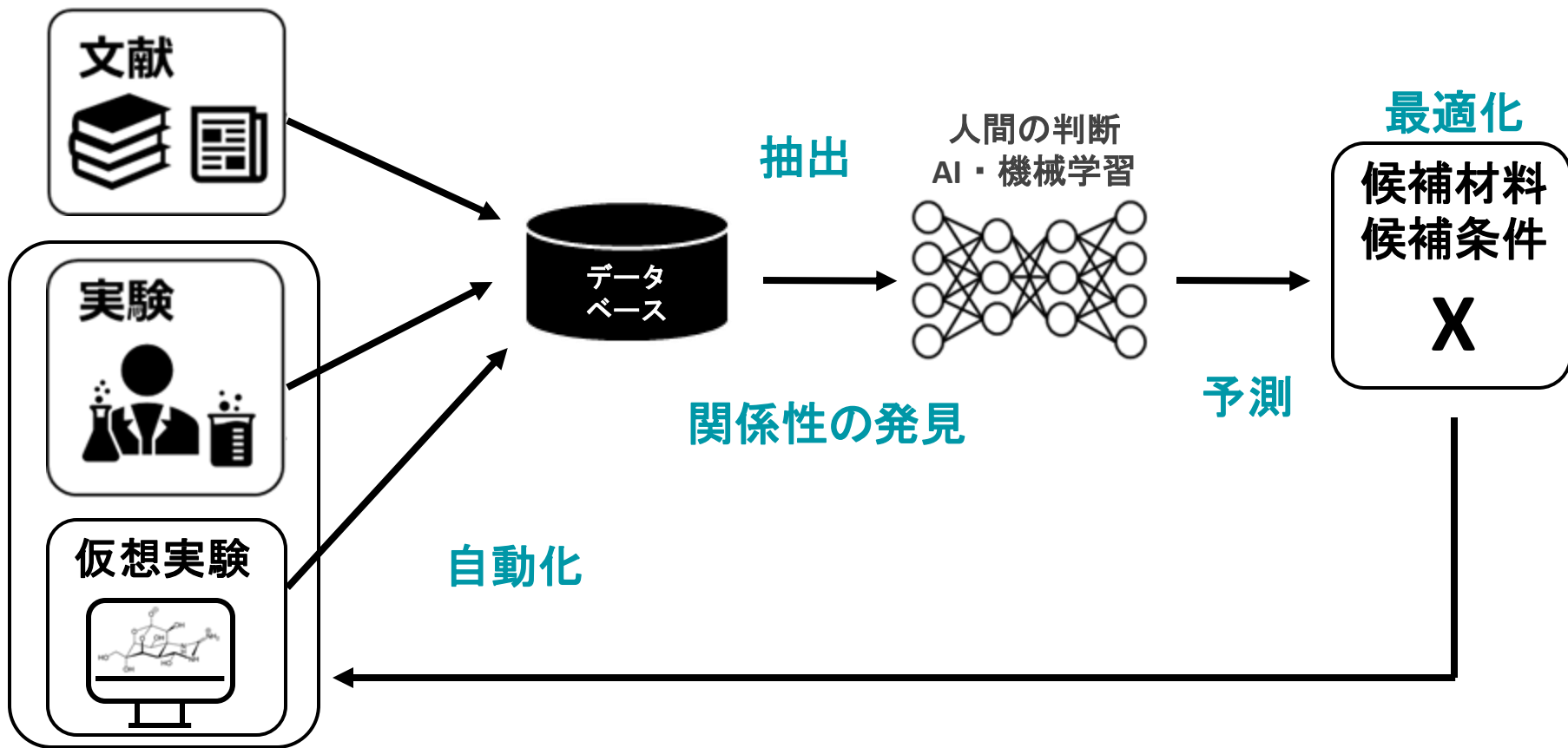
0<cs1; and

0<sys2, provided that when M1 is a cationic element having an oxidation state a of +2 and M2 is a cationic element having an oxidation state of +5, 0<sys1.

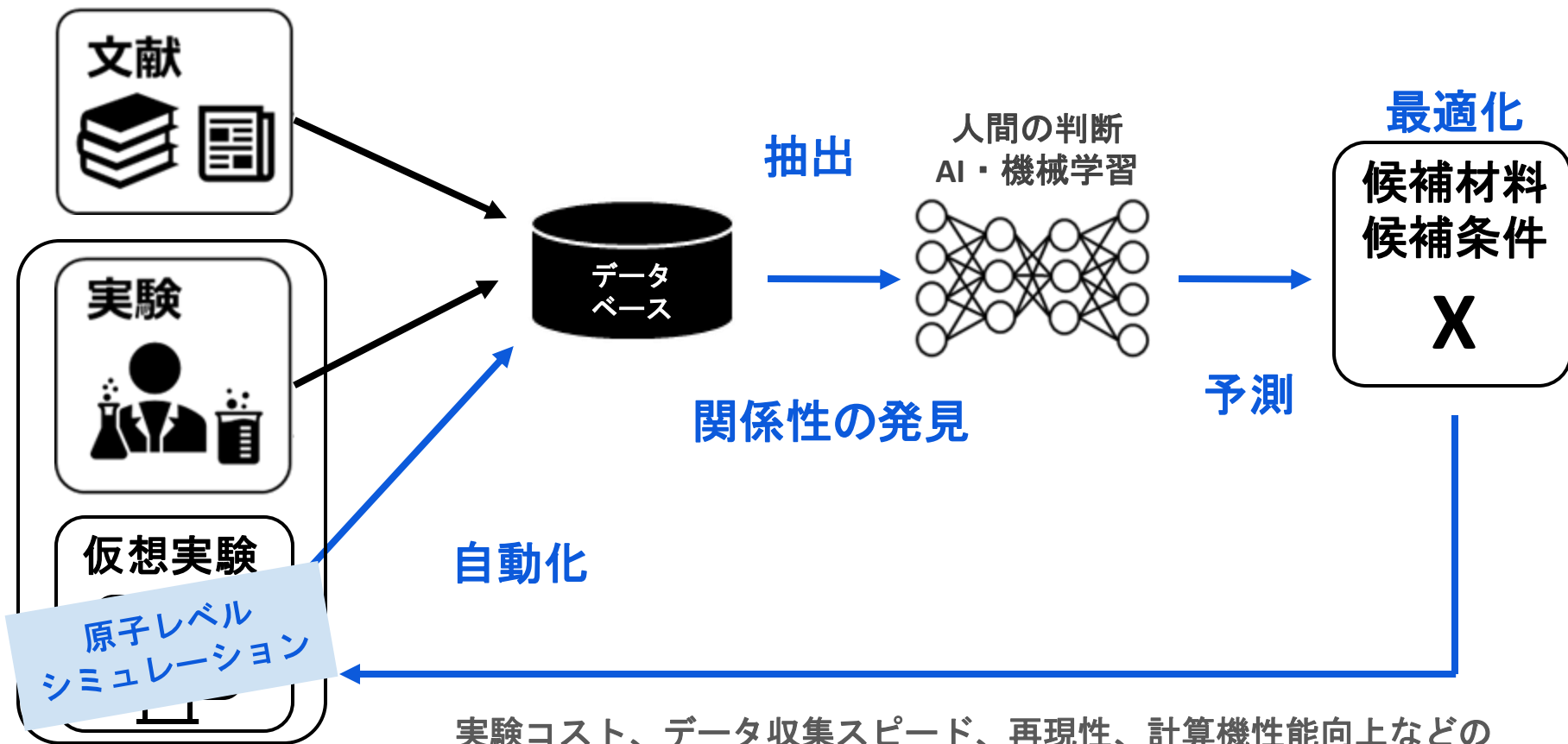
US2022263061A1

<https://worldwide.espacenet.com/patent/search/family/080775236/publication/US2022263061A1?q=US2022263061A1>

研究開発プロセスへのAI・機械学習利用イメージ

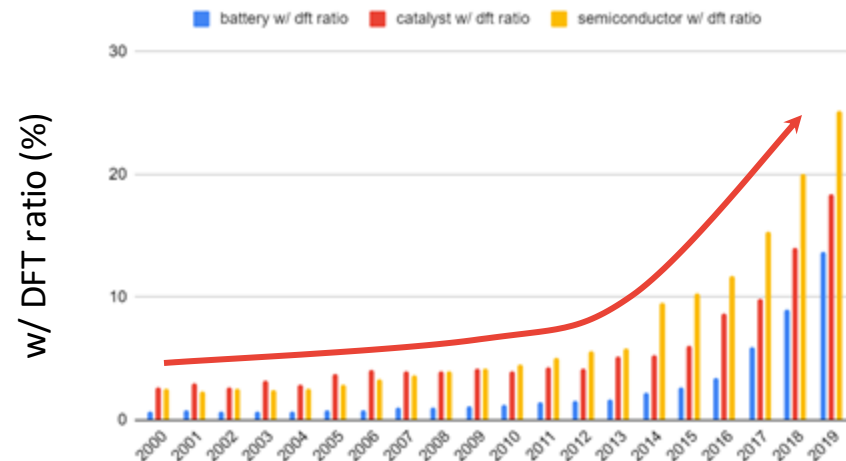
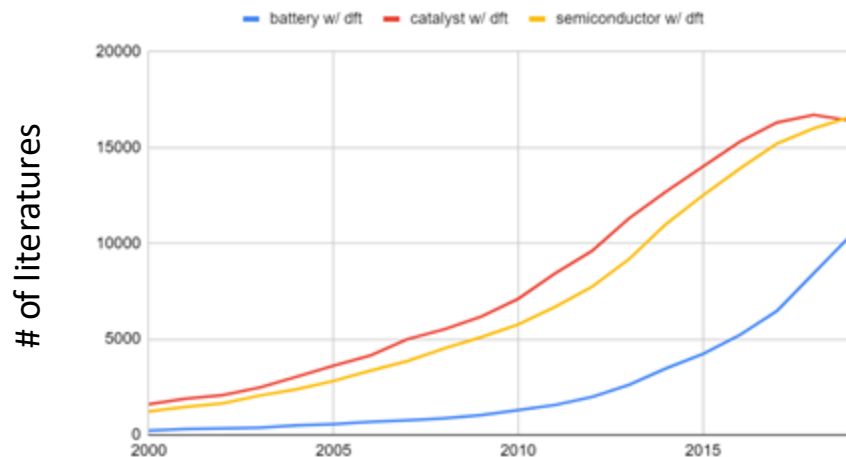


原子レベルシミュレーション x 機械学習ワークフロー



実験コスト、データ収集スピード、再現性、計算機性能向上などの観点から、材料探索において仮想実験の利用が拡大している

原子レベルシミュレーションのうち、DFTシミュレーションの活用状況を調査



- DFTシミュレーションが活用されている文献数は増加傾向
- 公開論文でDFTシミュレーションが活用されている割合は近年顕著に増加
- 計算機の性能向上、新たな計算手法の登場などが普及に影響したと考察

DFT (Density Functional Theory)の課題

DFT: 比較的精度良く実験値を再現できる手法で広く利用されている

DFTの課題

- <100原子程度の構造でも数日～数ヶ月
- 系のサイズに応じて $O(N^3)$ で計算コストが増大
(サイズを10倍にすると、計算コストが10倍ではなく1000倍になるということ)

ex. 一般的な計算機を使った場合

- Liイオンの拡散計算：約1カ月
- 固体触媒上での活性化エネルギー計算：約2週間

→ “最新のAI技術”を使って

高速化、大規模化しよう

計算方法の種類(汎函数)も多数存在

Table 1: Overview of selected popular XC functionals. X is the exchange functional, C the correlation functional.

Functional	Authors	Ref.
Local Density Approximation (LDA) (I)		
SVWN ¹	X: Slater	23
	C: Vosko, Wilk, Nusair	24
PW ¹	Perdew, Wang	25
Generalized Gradient Approximation (GGA) (II)		
BP86	X: Becke	13
	C: Perdew	26
BLYP	X: Becke	13
	C: Lee, Yang, Parr	16
PW91	Perdew, Wang	27, 28
PBE	Perdew, Burke, Ernzerhof	14
PBEsol	Perdew, Ruzsinszky <i>et al.</i>	22
RPBE	Hammer, Hansen, Nørskov	29
SOGGA	Zhao, Truhlar	30
Meta-Generalized Gradient Approximation (meta-GGA) (III)		
TPSS	Tao, Perdew, Staroverov, Scuseria	17
Hybrid Functionals (IV)		
B3LYP	Becke	18, 19
PBEO	Perdew, Ernzerhof, Burke	31
HSE	Heyd, Scuseria, Ernzerhof	32
B97	Becke	33
TPSSH	Staroverov, Scuseria, Tao, Perdew	34, 35
Fully nonlocal functionals (V)		
RPA	Bohm, Pines	36
B2PLYP	Grimme	37

出展：Which functional should I choose?

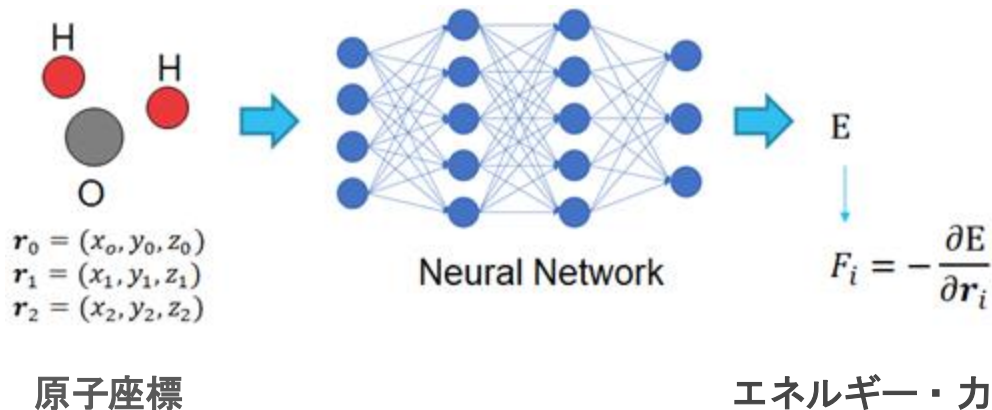
<https://dft.uci.edu/pubs/RCFB08.pdf>

機械学習原子間ポテンシャル (Machine Learning Interatomic Potential; MLIP)

- ❖ DFTに近い精度で原子間の相互作用を描画
- ❖ 圧倒的に高速・大規模計算が可能 (DFT対比)

多様な方式のMLIPが
近年、様々提案されている

- 高次元ニューラルネットワークポテンシャル (HDNNP)
- ガウス近似ポテンシャル (GAP)
- スペクトル近傍解析ポテンシャル (SNAP)
- 原子クラスター展開 (ACE)
- モーメントテンソルポテンシャル (MTP)
- メッセージ・パッシング・ニューラル・ネットワーク (MPNN)
- などなど・・・



Machine Learning Interatomic Potentialの利用

MLIPの基本概念は2007年に誕生¹⁾。それ以来、より信頼性の高い分子動力学計算を実行するために、経験的な原子間ポテンシャルからの移行が進んでいる。現時点でもその機能拡張の研究が進んでいる。

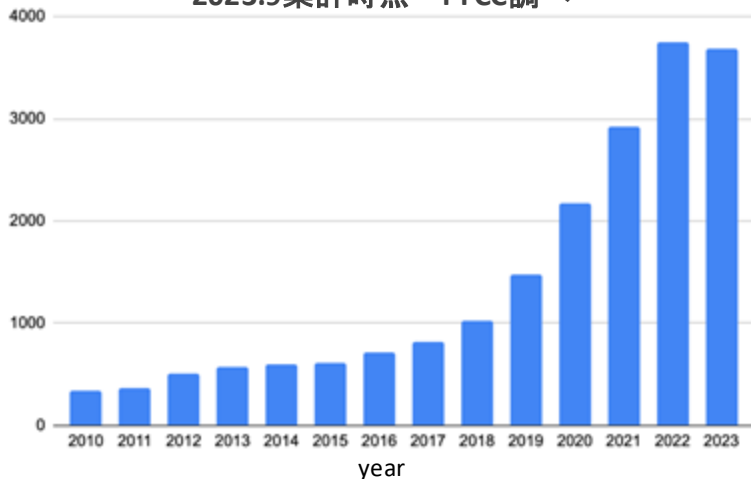
1): Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces

Jörg Behler and Michele Parrinello

Phys. Rev. Lett. 98, 146401 – Published 2 April 2007

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.98.146401>

MLIPに関する文献数トレンド
2023.9集計時点 PFCC調べ



Accelerating crystal structure prediction by machine-learning interatomic potentials

with active learning

Phys. Rev. B 99, 064114 – Published 27 February 2019

Crystal structure prediction using neural network potential and age-fitness Pareto genetic algorithm

arXiv:2309.06710

Role of hydrogen-doping for compensating oxygen-defect in non-stoichiometric **amorphous** $\text{In}_2\text{O}_3\text{-x}$: Modeling with a **machine-learning potential**

J. Appl. Phys. 134, 115105 (2023)

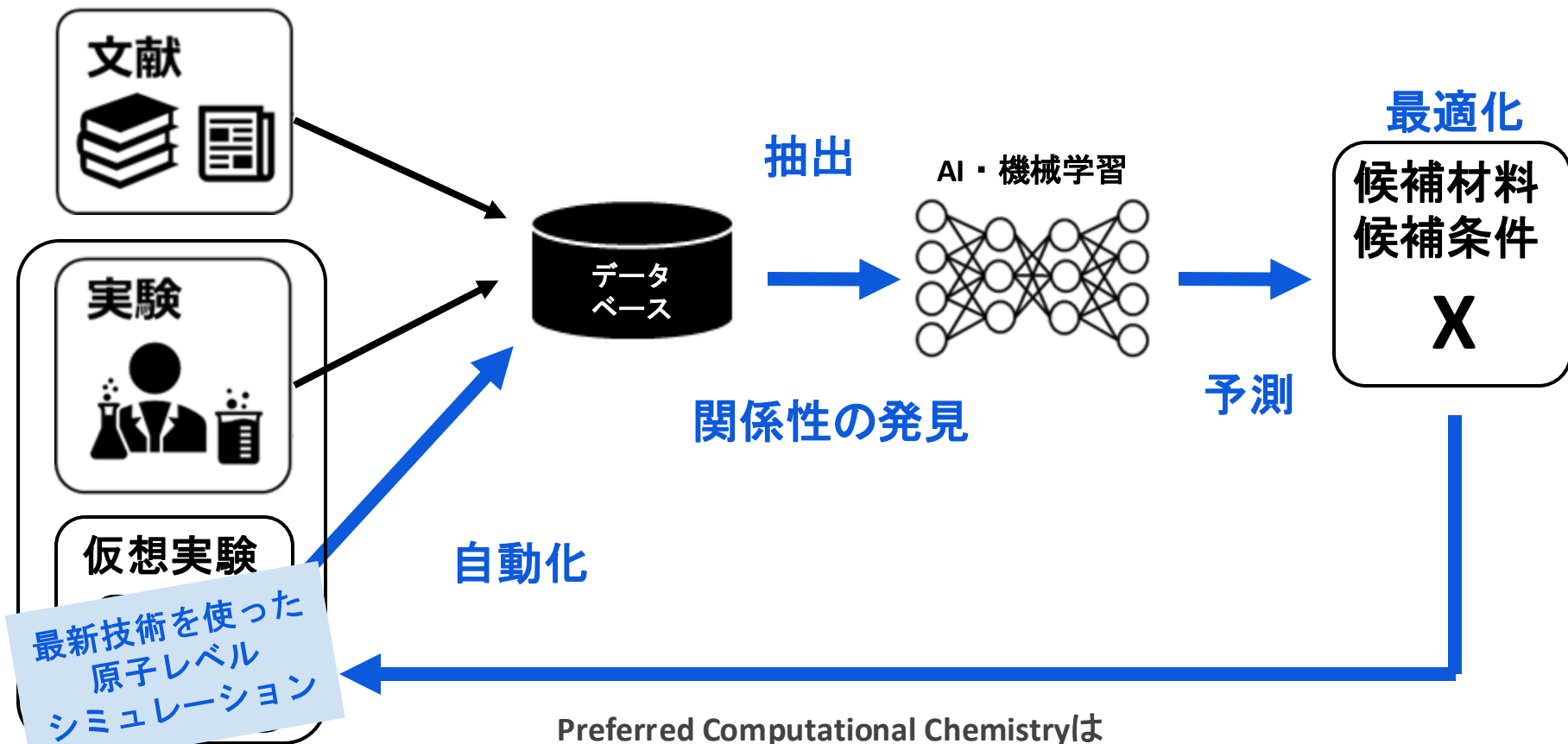
Accelerating first-principles estimation of **thermal conductivity** by machine-learning interatomic potentials: A MTP/ShengBTE solution

Computer Physics Communications Volume 258, January 2021, 107583

Atomic cluster expansion force field based **thermal property material design** with **density functional theory level accuracy** in non-equilibrium molecular dynamics calculations **over sub-million atoms**

arXiv:2309.11026

原子レベルシミュレーション x 機械学習ワークフロー



Preferred Computational Chemistryは

Matlantisというクラウドサービスを展開しています

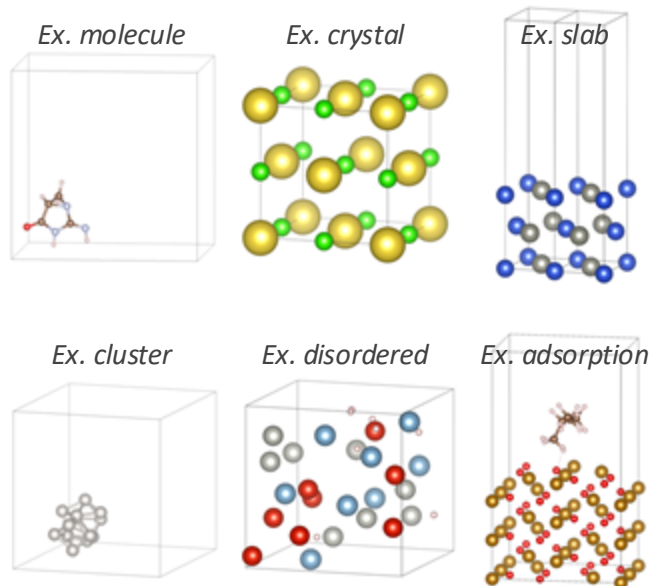
汎用原子レベルシミュレーター: Matlantis

汎用原子レベルシミュレーターの概要

DFT計算結果 5,900万を教師データとし、
それを独自に設計したGraph Neural Networkで学習モデルを構築

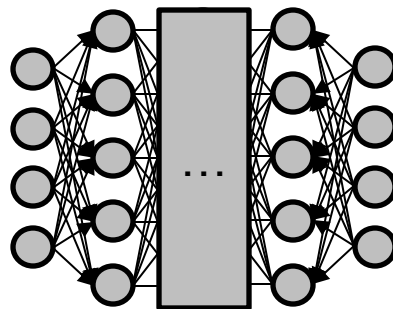
教師データ (5,900万)

分子・結晶等様々な構造の第一原理計算を実施
Preferred Networksの強力計算設備などを活用



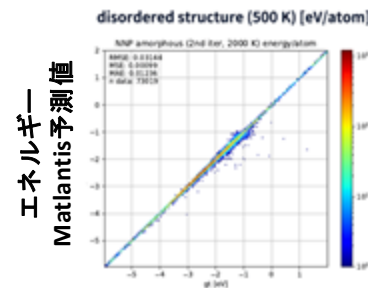
GNN

量子化学知見を取り込んだ
独自アーキテクチャのNNモデル構築



学習・出力

教師データを再現できるまで
モデルの学習を実施



エネルギー
DFT (教師データ)

関連論文URL : <https://www.nature.com/articles/s41467-022-30687-9>

Matlantisの特長

2,900 years



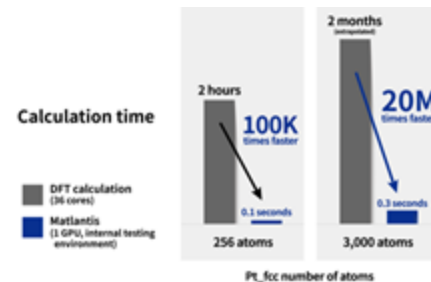
1台のGPUで2,900 年分のデータを学習
(5900万個のシミュレーションデータ)

96 elements



96元素 (全ての非人工元素+ α) に対応

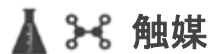
20M times



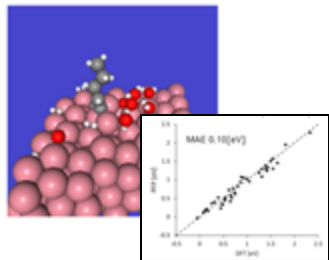
従来手法よりも2000万倍の高速性



学習済みモデルを提供：学習データの準備やAIの知識は不要
メンテナンスフリー：システム/ハードの専門家は不要



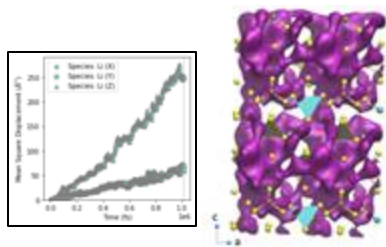
触媒



触媒組成の
大規模スクリーニング



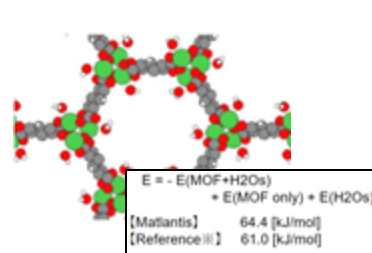
電池



固体電解質中のLi拡散



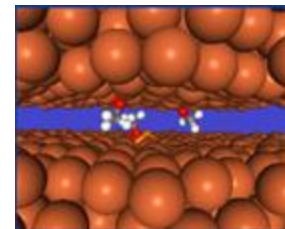
吸着剤



MOF中の分子吸着



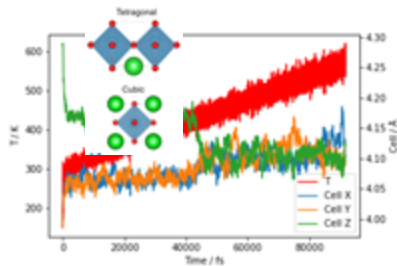
潤滑剤



摩擦における化学反応



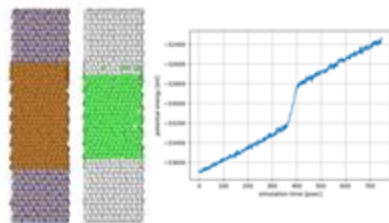
セラミックス



BaTiO₃の相変態



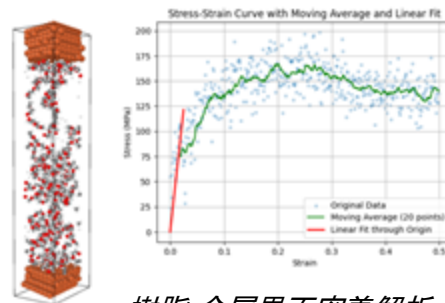
半導体



AlN/Cu接合面結晶構造解析



接着



樹脂-金属界面密着解析



磁性材料



分離膜



金属・合金

⋮

化学シミュレーションの一例： 原子の個性を目で見てみる

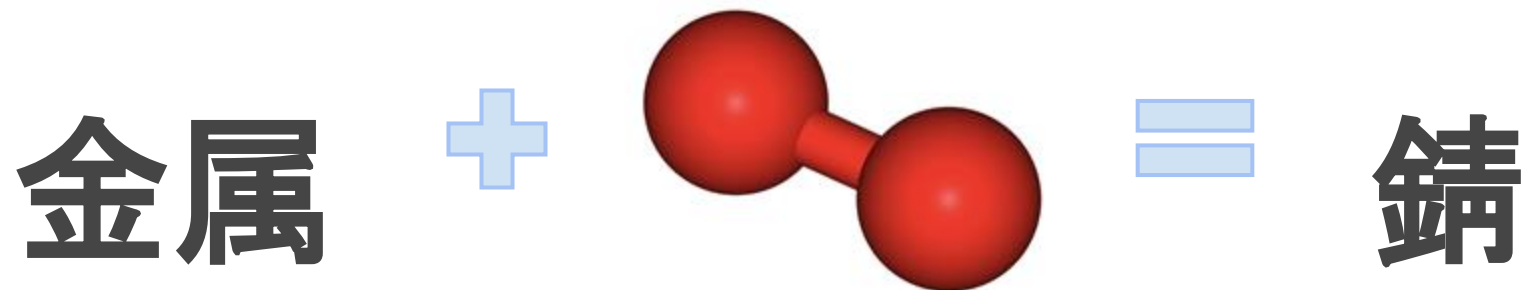
周期表

1 H Hydrogen 1.008																	2 He Helium 4.0026													
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.0122															5 B Boron 10.81	6 C Carbon 12.01	7 N Nitrogen 14.01	8 O Oxygen 15.99	9 F Fluorine 18.9984	10 Ne Neon 20.1797									
11 Na Sodium 22.989769	12 Mg Magnesium 24.304															13 Al Aluminum 26.981538	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948									
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.95591	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938045	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933195	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.63	33 As Arsenic 74.9216	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798													
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90584	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 101.07	46 Pd Palladium 106.36	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.757	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.905	54 Xe Xenon 131.29													
55 Cs Cesium 132.90545	56 Ba Barium 137.327															57 Hf Hafnium 178.49	58 Ta Tantalum 180.94788	59 W Tungsten 183.84	60 Re Rhenium 186.207	61 Os Osmium 190.23	62 Ir Iridium 192.222	63 Pt Platinum 195.084	64 Au Gold 196.96657	65 Hg Mercury 200.59	66 Tl Thallium 204.3833	67 Pb Lead 207.2	68 Bi Bismuth 208.9804	69 Po Polonium 209	70 At Astatine 210	71 Rn Radon 222
87 Fr Francium 223	88 Ra Radium 226															104 Rf Rutherfordium 261	105 Db Dubnium 262	106 Sg Seaborgium 266	107 Bh Bohrium 264	108 Hs Hassium 277	109 Mt Meitnerium 268	110 Ds Darmstadtium 271	111 Rg Roentgenium 272	112 Cn Copernicium 285	113 Nh Nihonium 286	114 Fl Flerovium 289	115 Mc Moscovium 288	116 Lv Livermorium 293	117 Ts Tennessine 294	118 Og Oganesson 294
57 La Lanthanum 138.90547	58 Ce Cerium 140.12	59 Pr Praseodymium 140.90766	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium 144.9127	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92535	66 Dy Dysprosium 162.50014	67 Ho Holmium 164.93033	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93032	70 Yb Ytterbium 173.05468	71 Lu Lutetium 174.967																
89 Ac Actinium 227	90 Th Thorium 232.0377	91 Pa Protactinium 231.03689	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium 237	94 Pu Plutonium 244	95 Am Americium 243	96 Cm Curium 247	97 Bk Berkelium 247	98 Cf Californium 251	99 Es Einsteinium 252	100 Fm Fermium 257	101 Md Mendelevium 258	102 No Nobelium 259	103 Lr Lawrencium 260																

化学をやっているとよく見ます

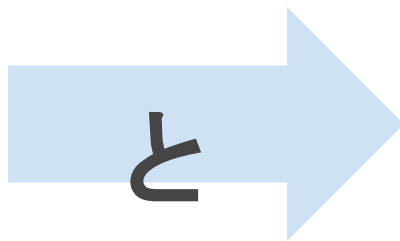


化学じゃなくてもよく見ます



酸化のことですね

錆びる
前



錆びた
後

は知ってますが

錆びている途中は
考えたことなかったです

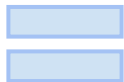


高校化学で、表面だけ酸化し
不動態になると習いました。

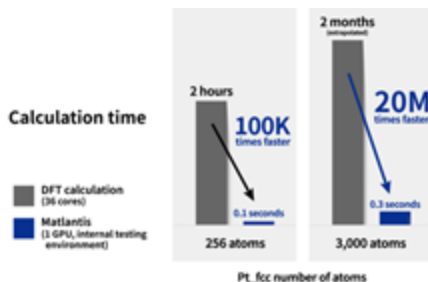


ほんとですかね？

気になったならやってみましょう



20M times



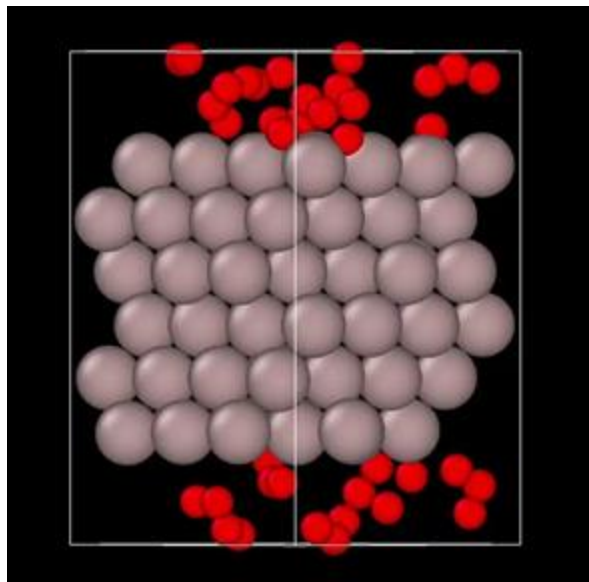
96 elements



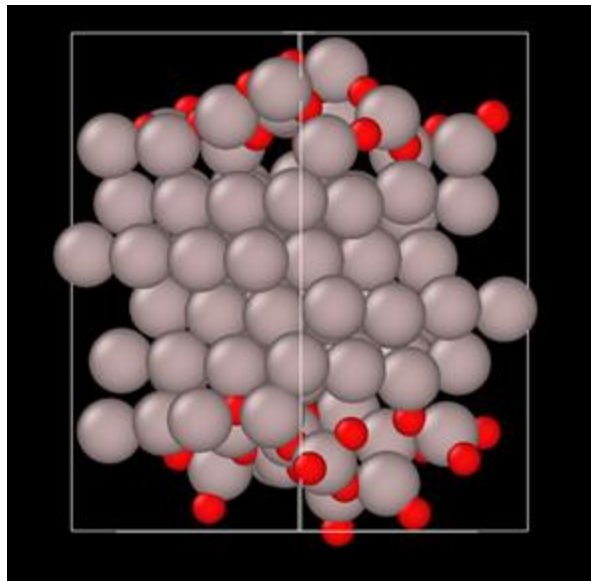
速さ

普遍性

「思い立ったら即実験」



AI表面に酸化アルミの四面体が形成
内部には酸素が浸透しない様子



他の元素ならどうなのでしょう？

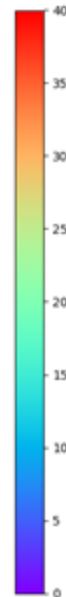
金属元素全部計算してみました

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

*Mnは単位胞が複雑で除外

*Gaは安定相が複数あり除外

*Mnは単位胞が複雑で除外
*Gaは安定相が複数あり除外



計算条件

nVTアンサンブル

熱浴: Nose-Hoover

温度: 300 K

timestep: 1 fs

sim. time: 100 ps

(100,000 steps)

結晶構造:

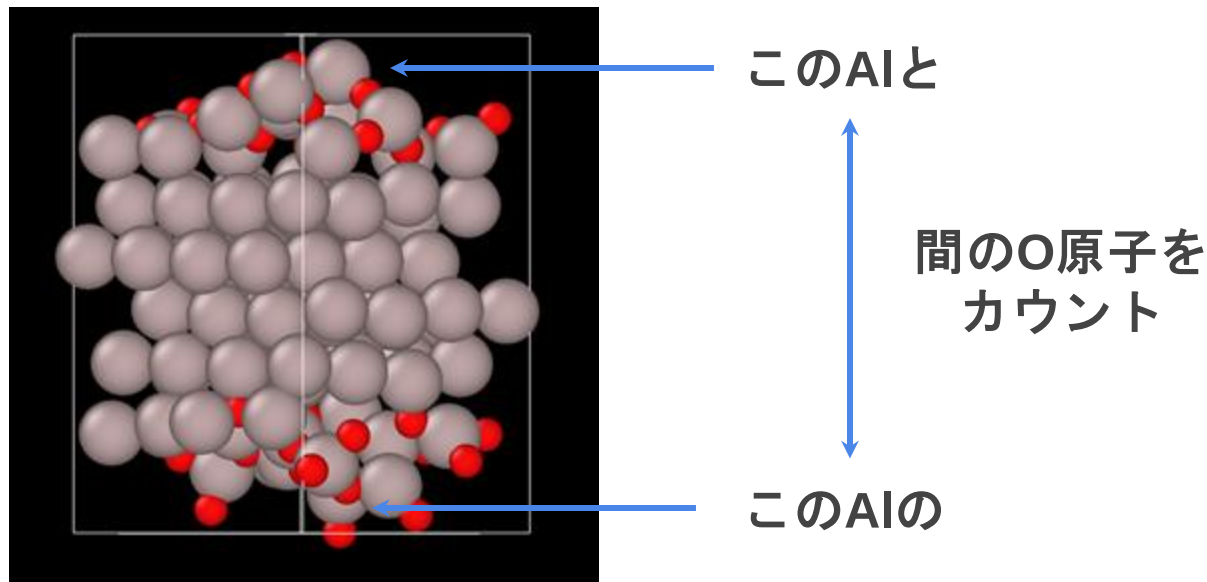
各金属の安定相

表面構造:

(100)面, 原子6層分

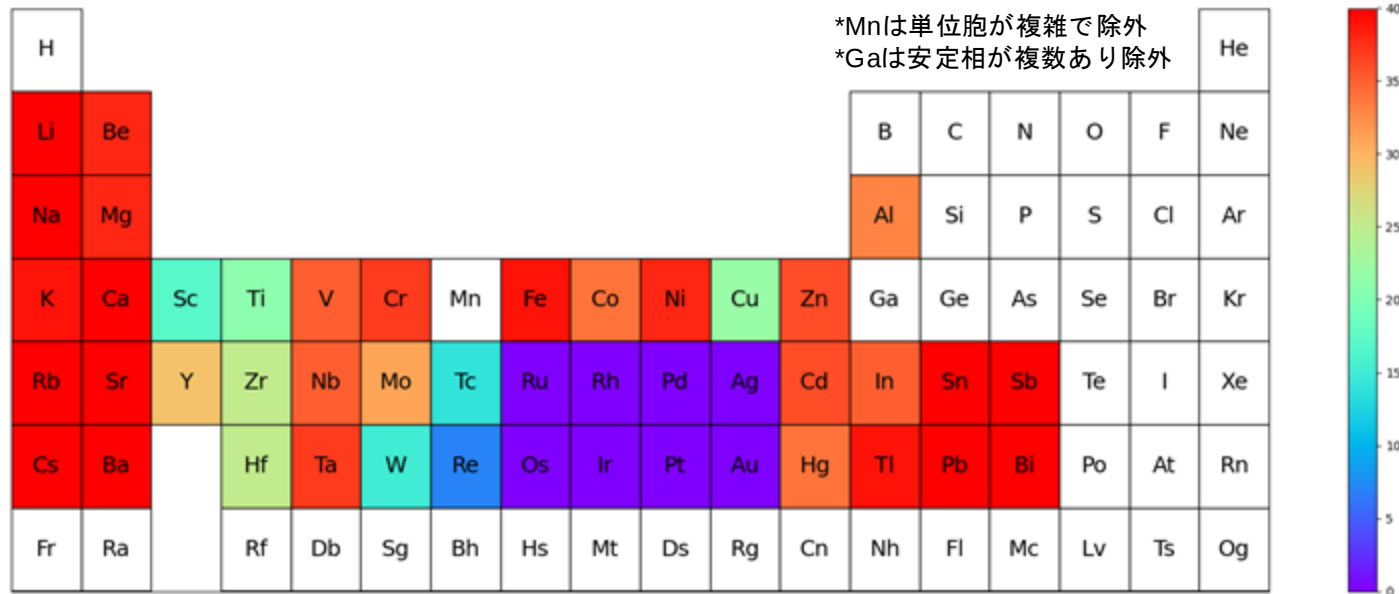
酸素20分子を暴露

金属箔の内側に入った酸素数をカウント
赤:40個(全 O_2 分子が内部に浸透)、紫:0個



表面で酸化が止まっても37個は
内部判定。完璧な指標ではない

改めてみると



計算条件

nVTアンサンブル

熱浴: Nose-Hoover

温度: 300 K

timestep: 1 fs

sim. time: 100 ps

(100,000 steps)

結晶構造:

各金属の安定相

表面構造:

(100)面, 原子6層分

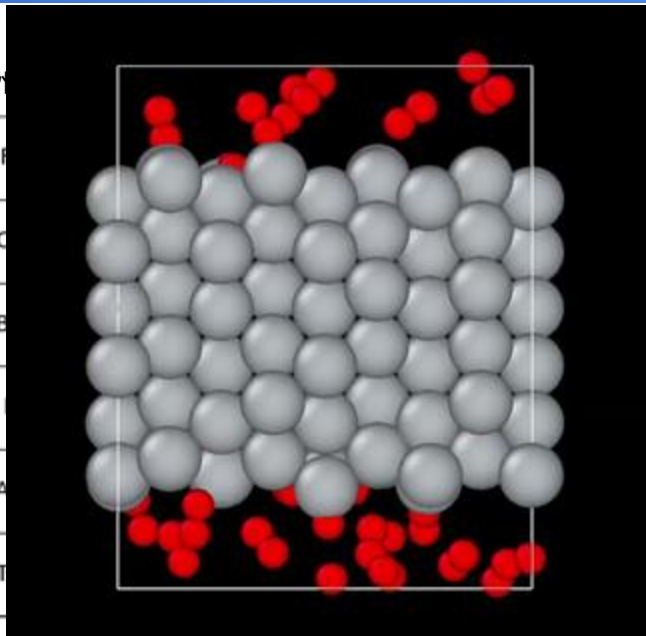
酸素20分子を暴露

白金族+Au, Agは無反応
アルカリ(土類)金属は完全に反応

Tiは20個の酸素が内部浸透？

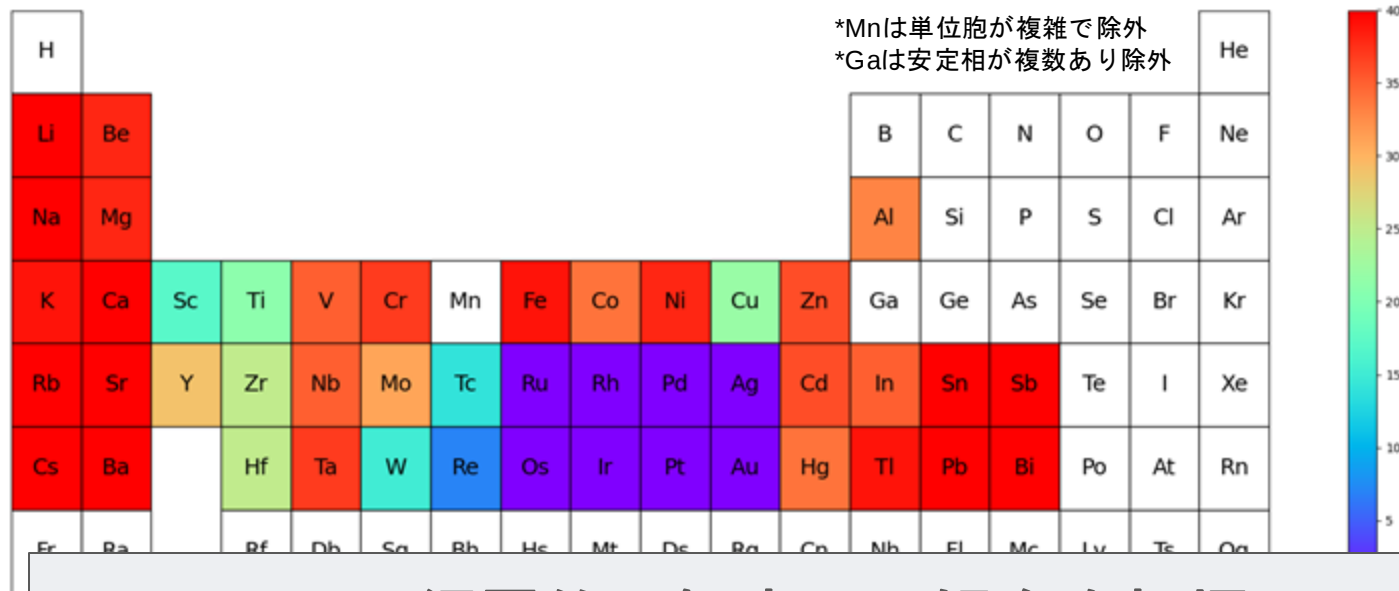
H																	B	C	N	O	F
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl					
Na	Mg																				
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br					
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I					
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At					
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Tl					

*Mnは単位胞が複雑で除外
*Gaは安定相が複数あり除外



Tiも酸化被膜を形成
非常に錆びにくい金属という知見とも一致

このように



計算条件

nVTアンサンブル

熱浴: Nose-Hoover

温度: 300 K

timestep: 1 fs

sim. time: 100 ps

(100,000 steps)

結晶構造:

各金属の安定相

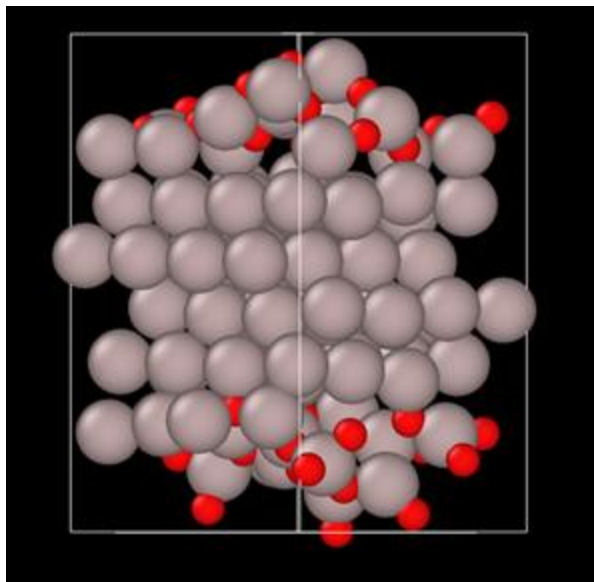
表面構造:

(100)面, 原子6層分

酸素20分子を暴露

網羅的に観察し、傾向を把握し、
メカニズムを把握できるのが
計算化学を用いた探索の強みの一つ

気になることまだまだあるでしょ



- 酸素足りてくない？
表面と反応して尽きてる。
- (100)面以外の面だとどうなの？
- 金属箔の厚みもっとあった方が。
- 酸素じゃなくて水素なら？

疑問が出ることがいいことだと思っています

計算だけで化学が完結するはずがない



- 金属によって参加され方が全然違うのか
- (111)面だとどうなる？
- 表面だけでなく内部まで酸素が分散するかみたいな。
- 実験と傾向一致してるか調べてみたいな



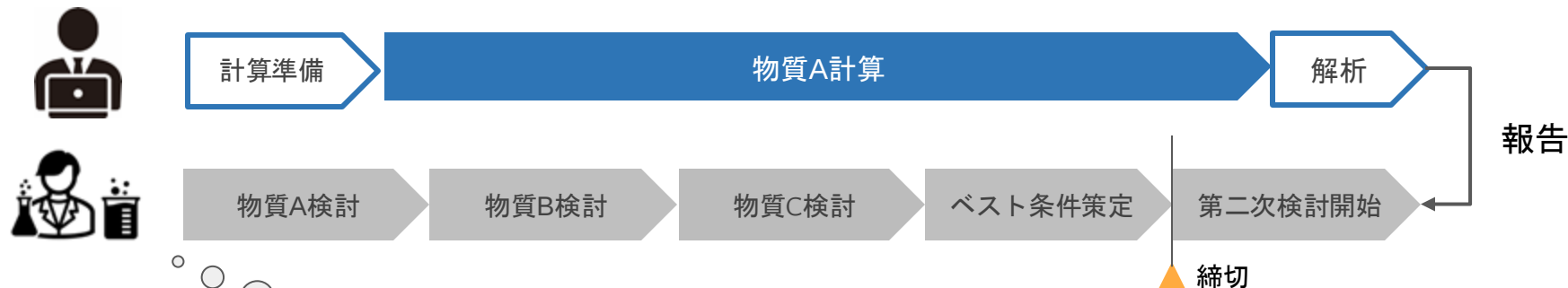
“原子を目で見る”ことで新たな着想や
次の実験・計算に繋がれば良い

実験のタイムスケールに追隨できる無二の計算環境

これらの計算は、昨日思いついて計算しました

計算の準備から結果を得るまで8時間くらいでした。

計算時間が長くなる場合



- 実は、もう解決しちゃったんだよな。。
- 計算結果気になるところあるけど、もう別の化合物扱ってる。
- 最近気になってる物質Cの計算の方が欲しいな。。

Matlantisの高速性・汎用性は
実験のタイムスケールに追隨し
様々な試行錯誤を可能に

“化学現象を目で見て試行錯誤”できる時代に

原子・現象を目で見て新たな気づきを得る。
その仮説をその場で試せるツール。



朝30分打ち合わせ

それを元に計算を流して
夕方には結果を元に議論

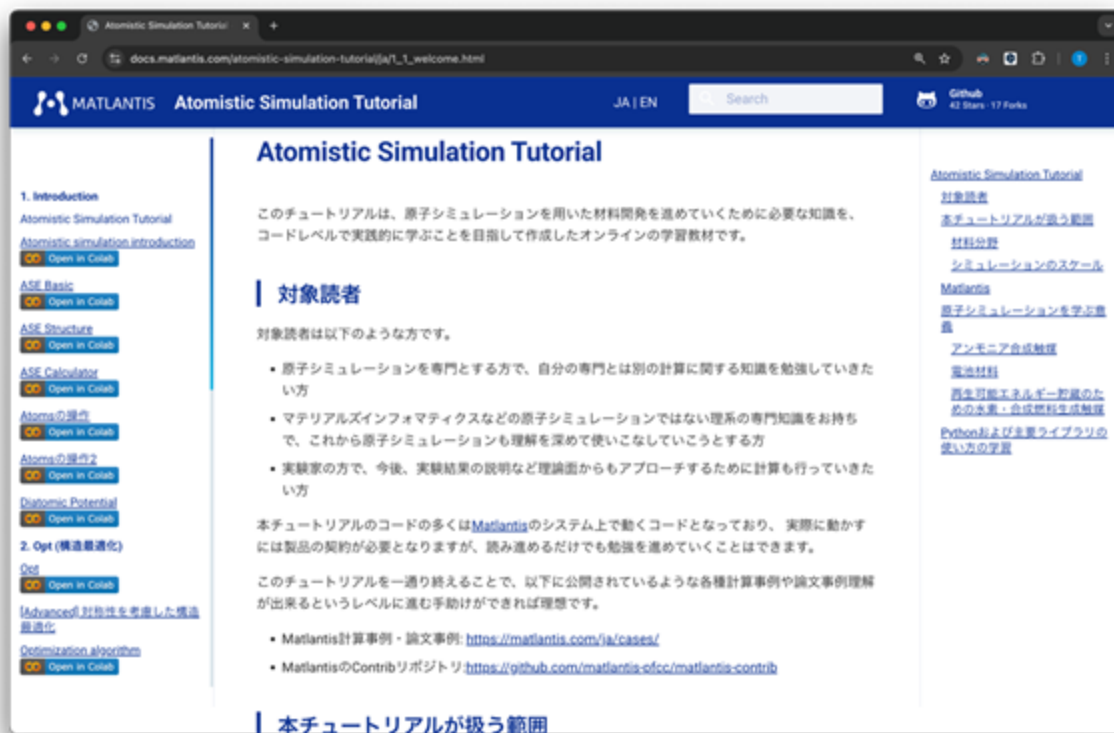


典型的な物性の
計算プログラムは
Matlantis上に配置

新しい材料を思いついたら
その場で定型として計算

“現象を目で見る”
“その場で考察する”
ためのサービス



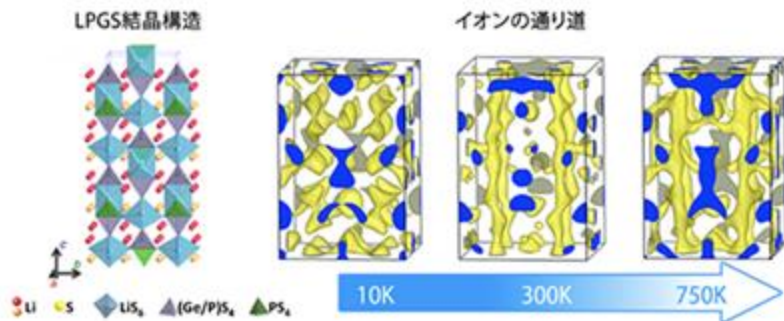


Atomistic Simulation Tutorialとして公開

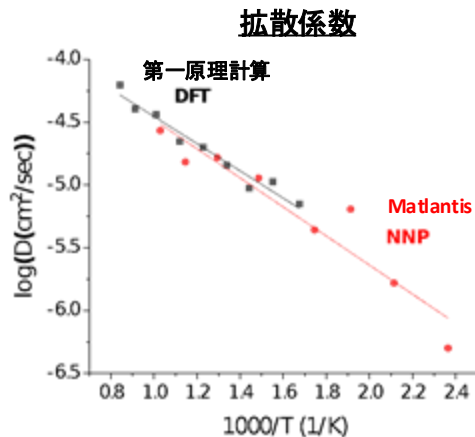
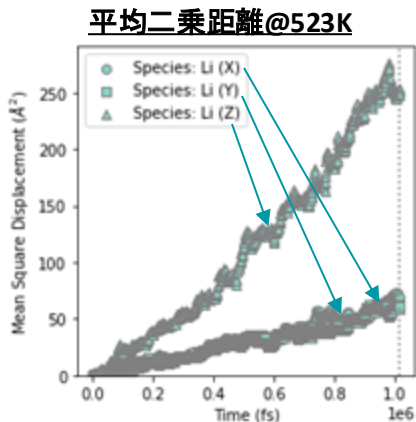
汎用原子レベルシミュレーター Matlantis 活用事例

電池材料

電池材料の事例 : LIB内イオン拡散の計算



東工大 菅野教授Gr <https://www.kek.jp/ja/newsroom/2016/06/22/1733/>



<https://matlantis.com/ja/cases/calculation004/>

$\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ 系固体電解質は高イオン伝導度を示す結晶構造としてよく知られており、次世代電池材料として注目を集める。

既報データも多く、Matlantisで再現検討を実施。

計算条件

原子数	50
MD	1 ns (2x10 ⁶ steps)
Ensemble	NVT (Langevin)
実行時間	46 h

活性化Energy (meV)

Matlantis	DFT[1]	Exp[2]
230	210	242

[1] Mo et al. Chem.Mater. (2012) 24, 15-17

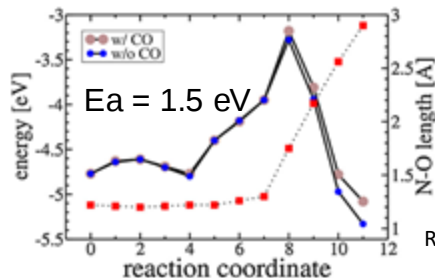
[2] Y. Kato, et. al. Nat. Energy 1, 16030.

- DFTおよび実験結果をよく再現
- 高速な計算により低温領域まで計算可能

触媒反応

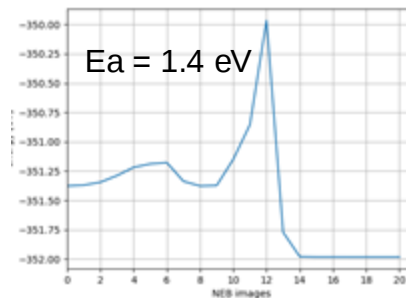
NO還元触媒反応解析と第二元素添加の効果

第一原理計算：Rh触媒上でのNO開裂反応エネルギーダイアグラム

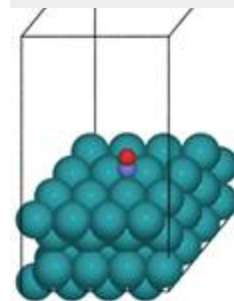


Ref: *Catalysis Today* 332 (2019) 272–279

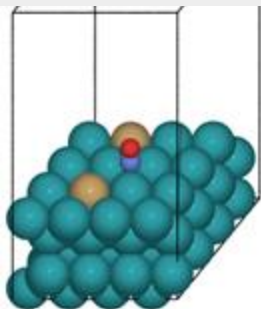
約10分でNEB計算完了



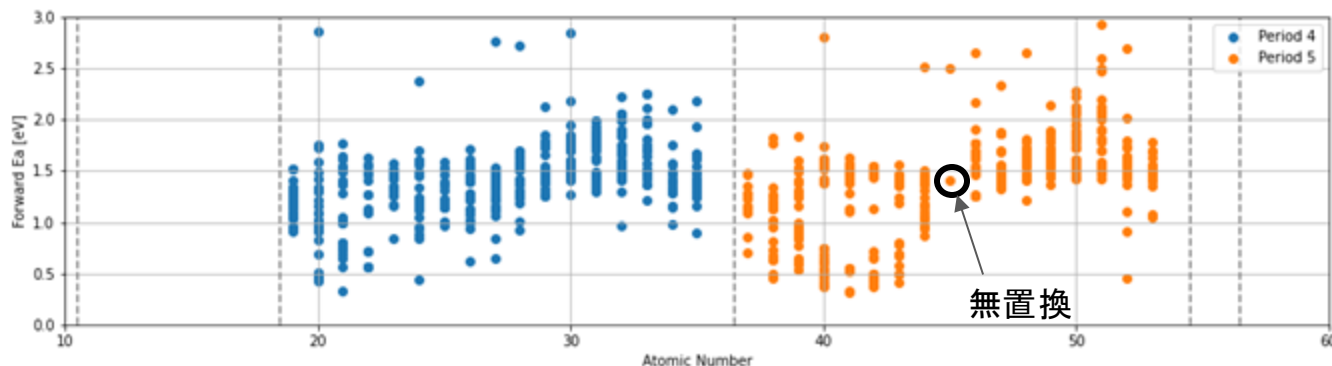
NNP image



NNPによる超高速
スクリーニングイメージ
(initial state)



Rh触媒の一部元素を置換してNO開裂反応の活性化エネルギーを計算
(1,224種の触媒表面状態についてMatlantisで全てNEB計算→約3日で計算完了)



有機反応・高分子

背景・目的

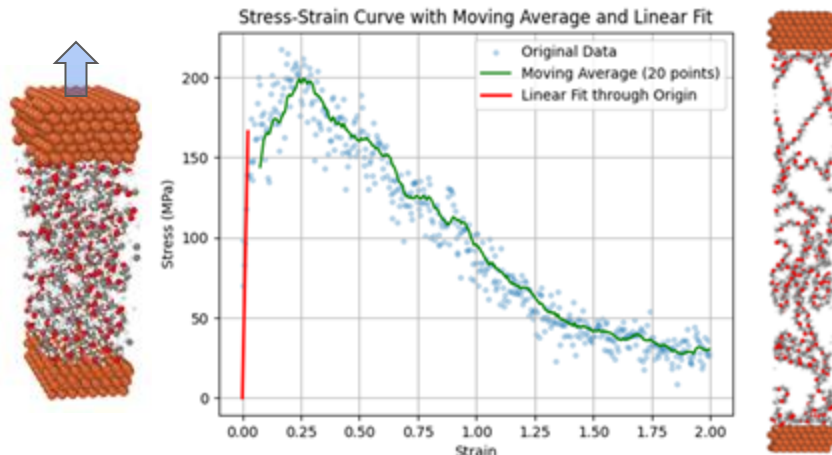
電子部品に使用される金属-ポリマー複合材料には、堅牢な金属-ポリマー結合技術が必要です。ただし、界面における機械的現象の微視的評価には大きな課題があります。MD シミュレーションを使用して、金属 - ポリマー複合材料界面の詳細な機械的特性を評価できますが、従来の古典的な MD シミュレーションでは、この目的のために正確な力場を生成することが困難でした。この例では、モデル樹脂としてポリエチレンオキシド 30 量体 (PEO) の応力 - ひずみ曲線を Matlantis で計算しました。

方法

- Model: 8 PEO molecules (1696 atoms) sandwiched by two Fe(100) slabs (640 atoms)
- MD tensile simulation along the c-axis (z-axis) direction from the compressed structure

結果

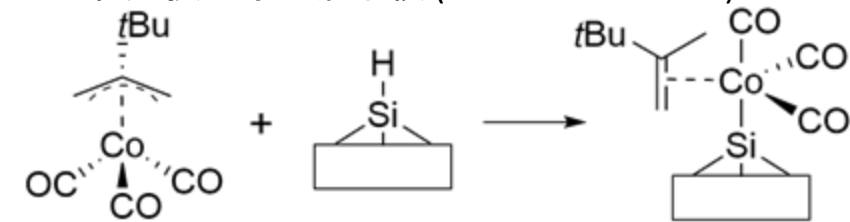
歪みに対する応力の移動平均から、材料の機械的強度を表す応力-ひずみ曲線を得た。小さなひずみ領域での線形近似では、ヤング率は 6.95 GPa でした。その後の動作は非線形で、引張強度は 200 MPa に近づき、その後徐々に減少しました。これらの結果は、樹脂材料で広く観察される特性と一致しており、Matlantis による MD シミュレーションを使用して金属 - ポリマー複合界面の機械的強度を評価できることを示しています。



半導体

ALDプロセス向けCoプリカーサーとSi基板の反応機構解析

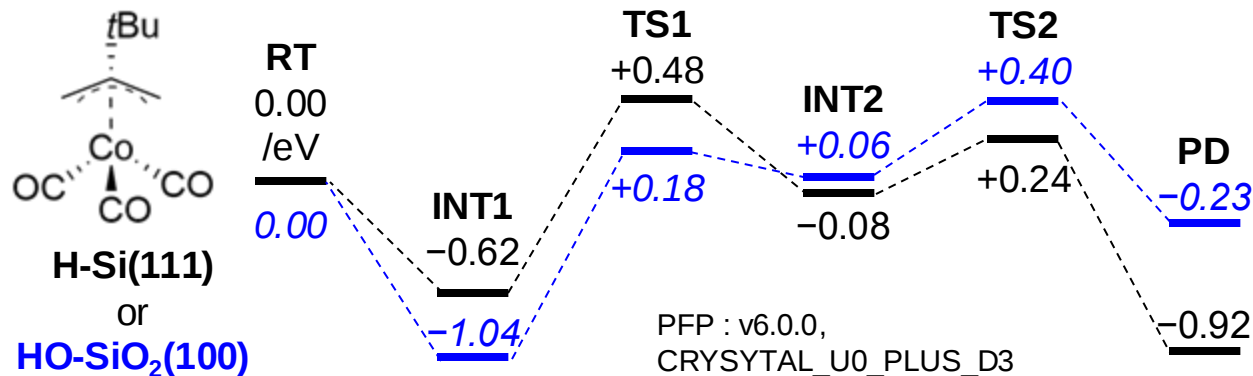
- 基板選択的原子層堆積 (area selective ALD)



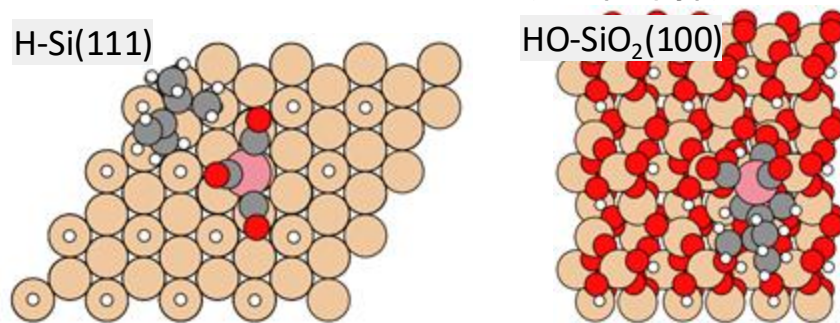
$t\text{Bu-allylCo(CO)}_3$ ([Chem. Mater. 2012, 24, 1025-1030](#))

水素終端Si上はCo成膜可 $\Leftrightarrow$ OH終端 SiO_2 上は製膜不可

- エネルギープロファイル



- GRRM20 with Matlantis による反応経路探索



- 反応するCoとSiもしくはOに人工力を付加 (AFIR法)
- 自動的かつ網羅的に反応経路を探索

- 複雑な反応メカニズム、エネルギープロファイルを計算できた
- エネルギー的な比較のみでは基板選択性の要因は不明、
 - ・ 配位子の脱離段階
 - ・ もう一分子の反応
- 等も検討する必要がありそう
- $t\text{Bu}$ の位置を変更した置換基効果についても、同様に計算済

“化学現象を目で見て試行錯誤”できる時代に

原子・現象を目で見て新たな気づきを得る。
その仮説をその場で試せるツール。



朝30分打ち合わせ

それを元に計算を流して
夕方には結果を元に議論



典型的な物性の
計算プログラムは
Matlantis上に配置

新しい材料を思いついたら
その場で定型として計算

“現象を目で見る”
“その場で考察する”
ためのサービス



革新的なマテリアルの創出に貢献し
持続可能な世界の実現を目指す

