

AIでセラミックス材料研究に挑む

中山 将伸
名古屋工業大学
環境セラミックス

今は革命期

時代の変革期に
始めてみませんか？

みんなのAI？

2020年ころ

第4次AIブーム

- ・生成AI (ChatGPT公開 2022)
- ・機械学習力場

専門家の時代

2010年ころ

第3次AIブーム

- ・深層学習
- ・Bigデータ
- ・GPU
- ・Materials Informatics

2000年ころ

ITブーム

- ・ムーアの法則CPU
- ・第一原理計算

名工大で提供していること

1. 学術指導

公知の技術範囲で、AIや材料計算を材料研究開発に生かす方法論を指導
20年間以上蓄積してきた材料計算・材料インフォマティクス技術の知見
技術資料・ソフトウェアの提供

例: 企業研究者の短期名工大派遣

例: 関連ソフトウェアの使用法指導

例: 対面 & オンライン、ハンズオンセミナーの開催歴多数

2. 共同・受託研究

豊富な共同研究・受託研究の研究歴(一部は論文公開)

研究室の人的・時間的リソースが不足している場合は、新たなお申し出を受け入れられないことがあります。ご了承ください。

材料研究へのAI導入メリット

1. 研究開発の効率化と加速

反復計算やデータ解析などの単調作業をAIが担うことで、研究者はより創造的な課題設定や解釈に集中できます。たとえば、**実験条件の最適化**(例: 合成温度・組成比)をAIが予測することで、試行錯誤の回数を減らし、新材料発見までの時間を短縮できます。

2. 新たな材料知見の発見

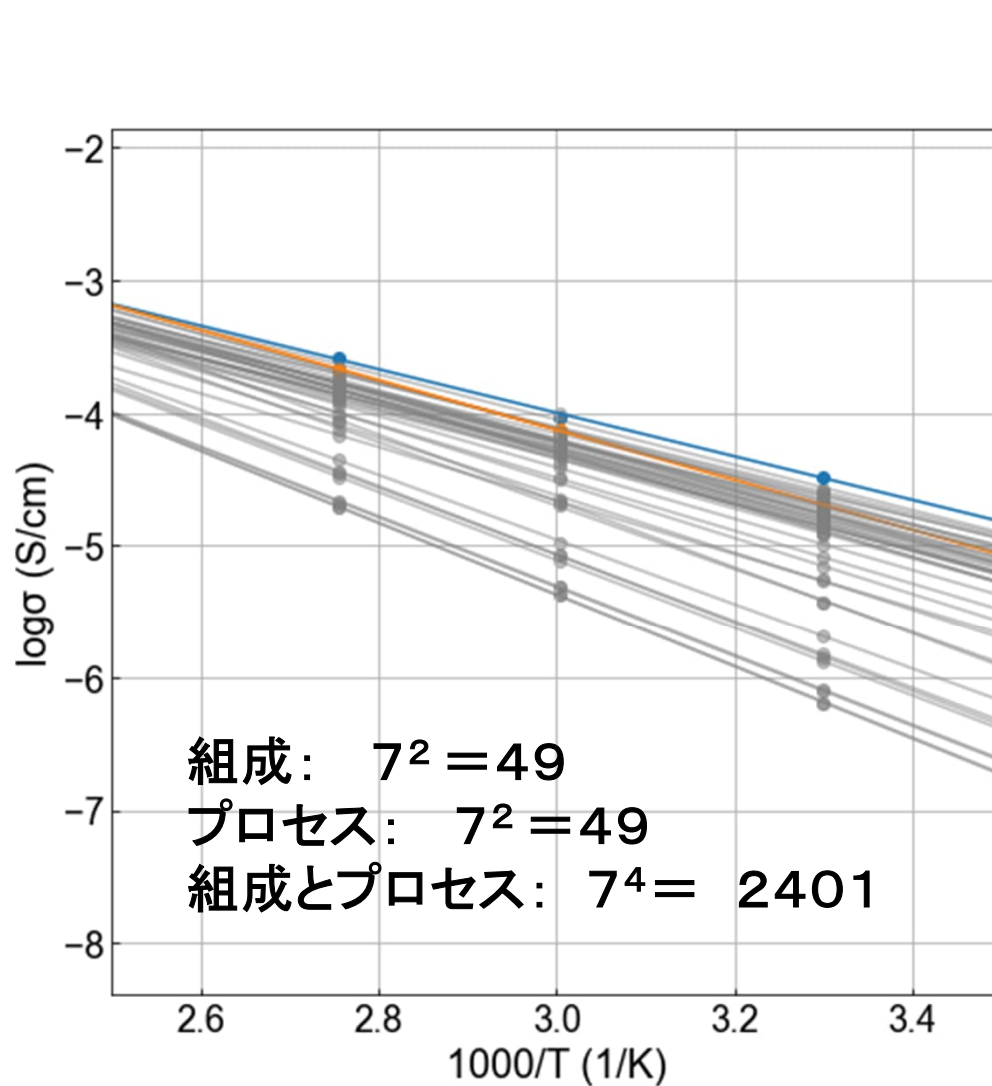
人間が見落としがちな**複雑な組成・構造・特性の相関**をAIが抽出できます。また、高額な分析装置の導入や高スキル人材による解析などのコストを浮かすこともできます。

3. 高速な探索、高度な反応解析

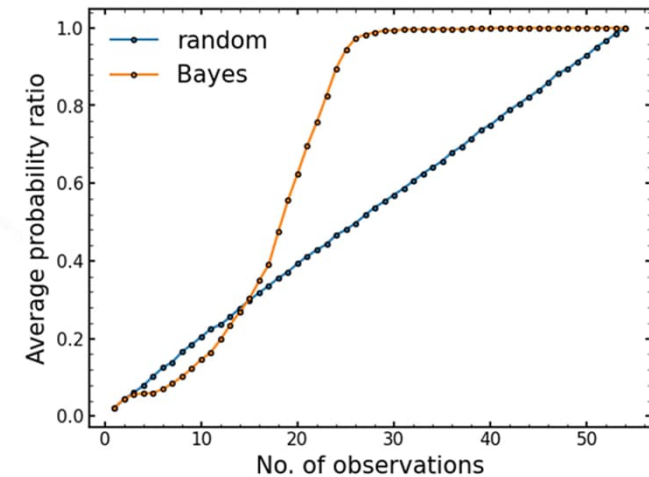
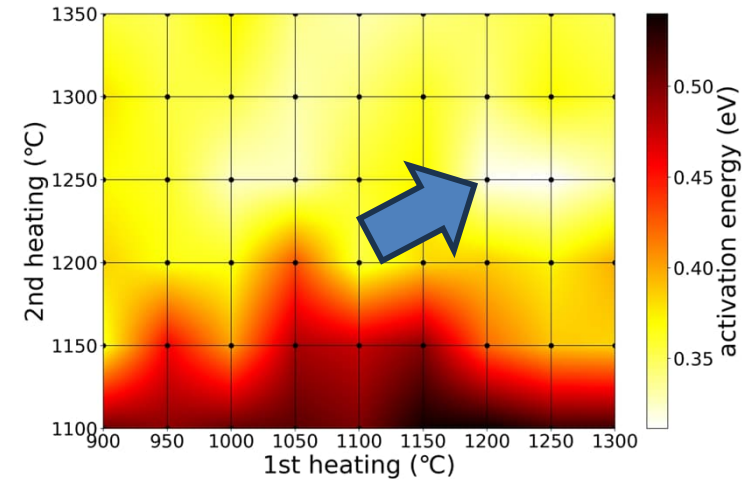
第一原理計算や実験では膨大な組成や構造を網羅するのが困難ですが、機械学習力場を使うと**高精度かつ短時間でスクリーニング**できます。また、いままでシミュレーション不可能だった複雑反応も評価が可能になりつつあります

話題① プロセス依存性(焼成温度 仮焼・本焼)

同一組成にあっても、焼成条件が異なれば抵抗は2桁変化することもある。



7 × 8 = 56通り



H. Takeda et al., Mater. Adv. (2022)

材料研究へのAI導入メリット

1. 研究開発の効率化と加速

反復計算やデータ解析などの単調作業をAIが担うことで、研究者はより創造的な課題設定や解釈に集中できます。また、実験条件の最適化(例:合成温度・組成比)をAIが予測することで、試行錯誤の回数を減らし、新材料発見までの時間を短縮できます。

2. 新たな材料知見の発見

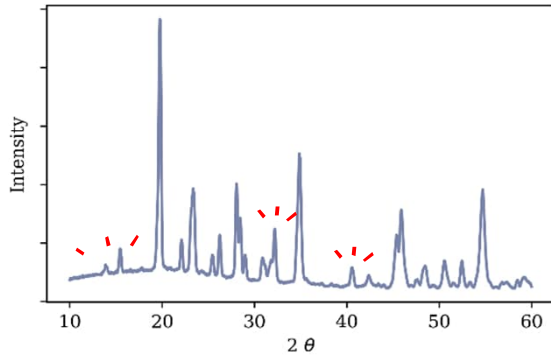
人間が見落としがちな複雑な組成・構造・特性の相関をAIが抽出できます。また、高額な分析装置の導入や高スキル人材による解析などのコストを浮かすこともできます。

3. 高速な探索、高度な反応解析

第一原理計算や実験では膨大な組成や構造を網羅するのが困難ですが、機械学習力場を使うと高精度かつ短時間でスクリーニングできます。また、いままでシミュレーション不可能だった複雑反応も評価が可能になりつつあります

話題② XRDパターンのAI解析

XRDパターンと物性の関係



焼成条件を変えたNASICON固体電解質（イオン伝導度とXRDデータ 54件）

バーチャルノイズ

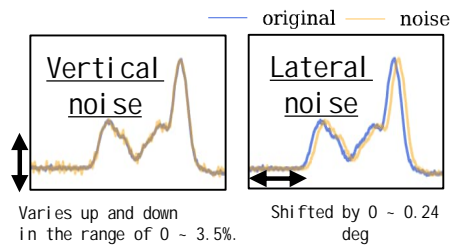
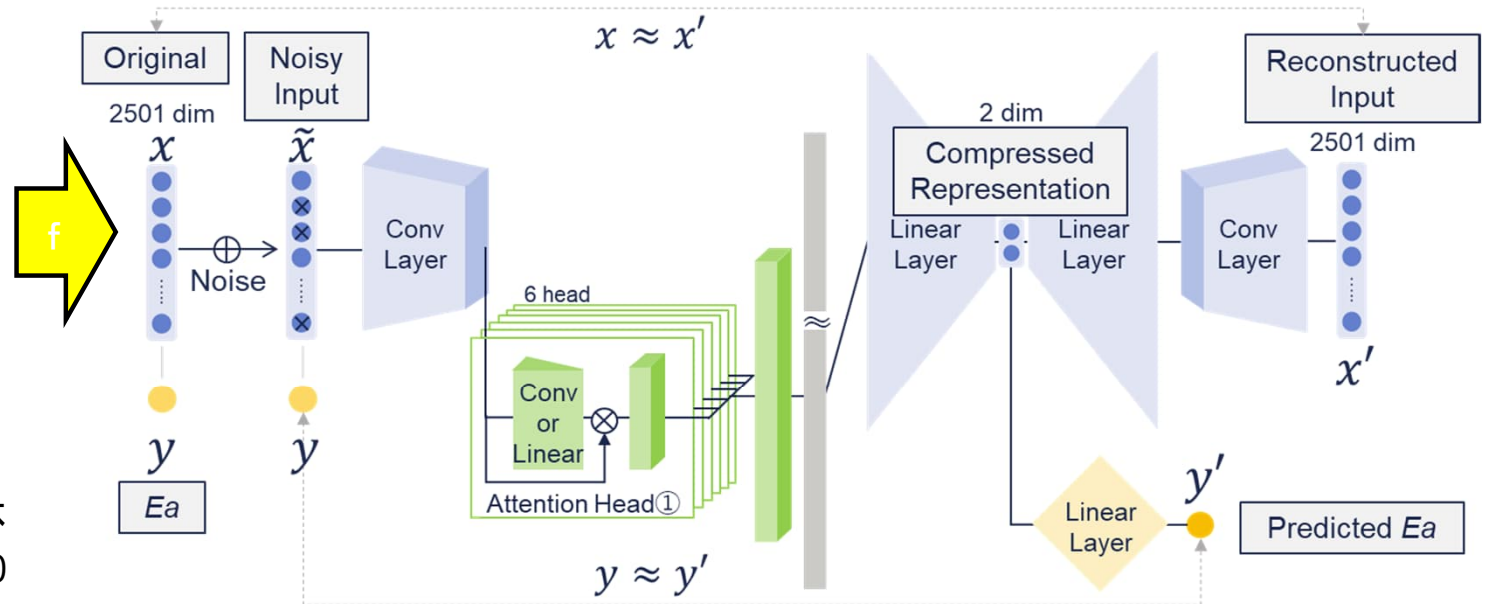


fig. Imaged figure of noise imposition

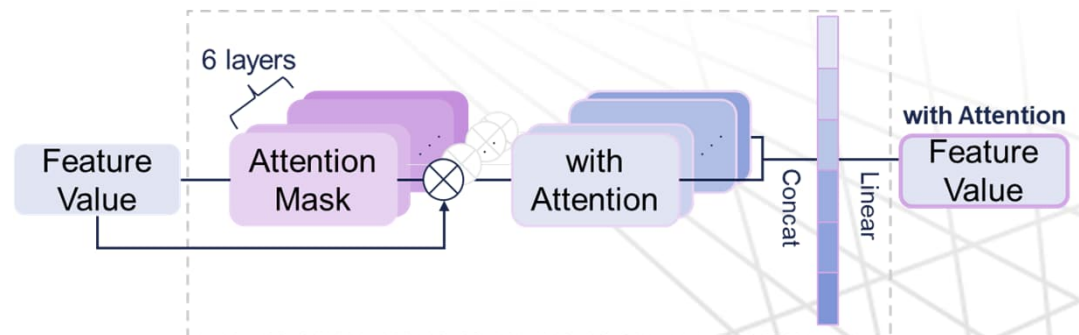


Denoising Autoencoder

- Noise Reduction
- dimensional compression

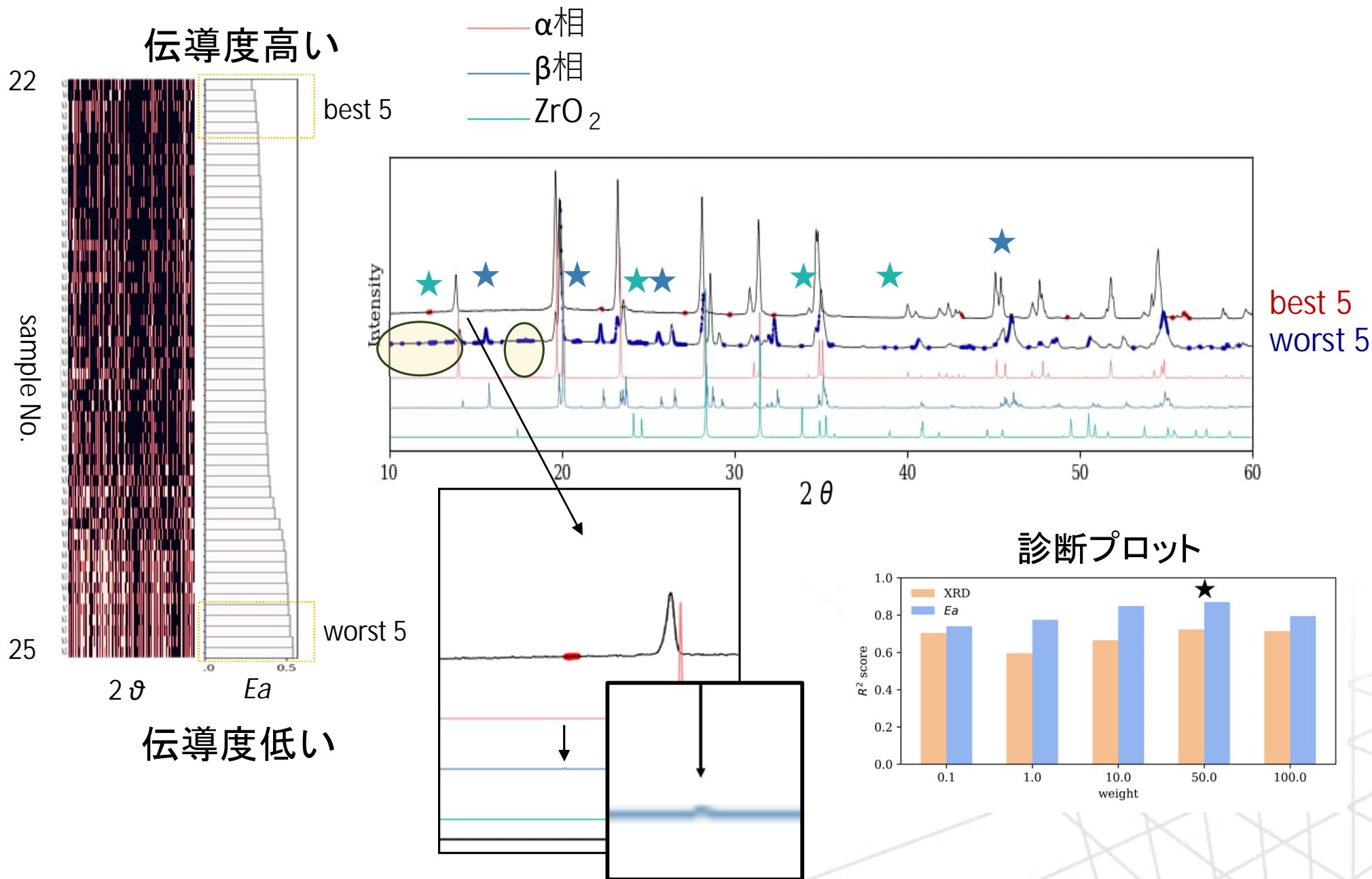
Learning where to focus attention
Changed to emphasize areas that need attention

Regression prediction of E_a

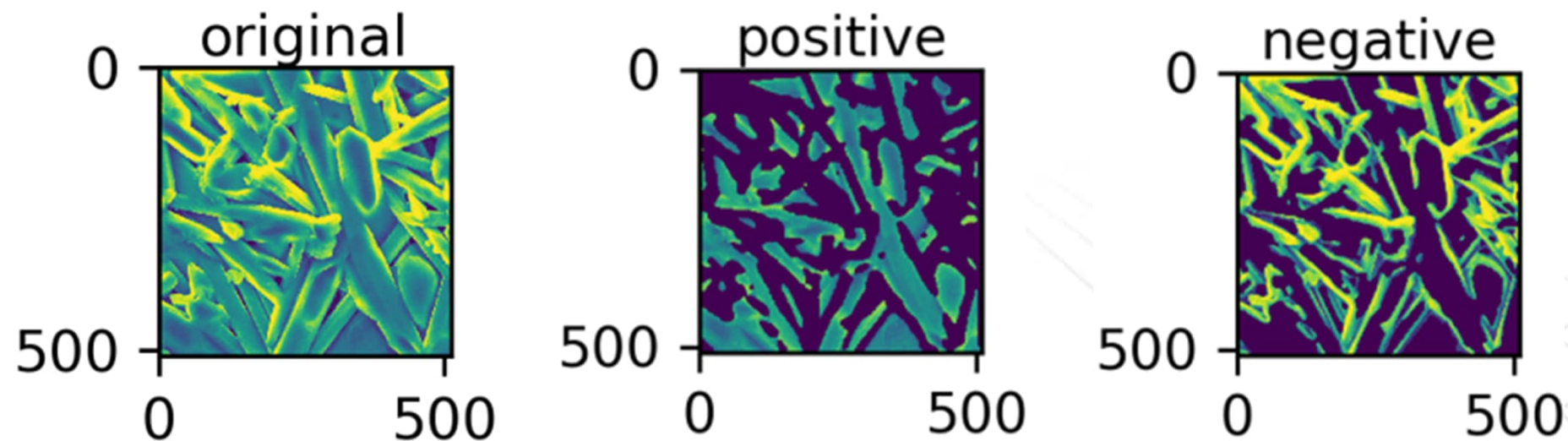
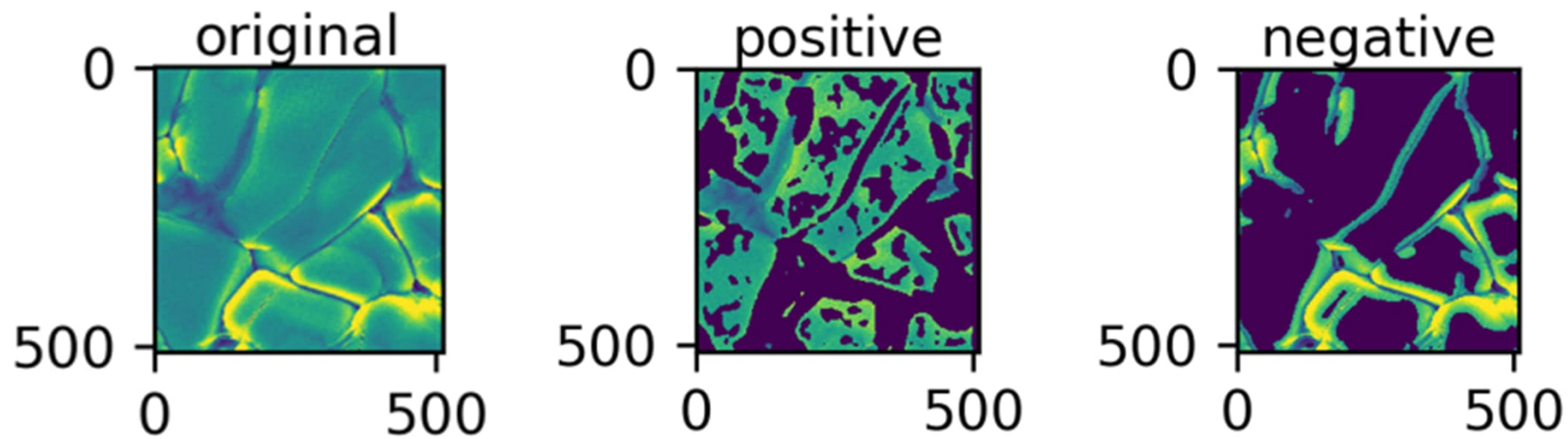


アテンションの導入

話題② 深層学習によるXRDパターン解析



話題② SEM写真とイオン導電性の関係可視化



材料研究へのAI導入メリット

1. 研究開発の効率化と加速

反復計算やデータ解析などの単調作業をAIが担うことで、研究者はより創造的な課題設定や解釈に集中できます。また、実験条件の最適化(例:合成温度・組成比)をAIが予測することで、試行錯誤の回数を減らし、新材料発見までの時間を短縮できます。

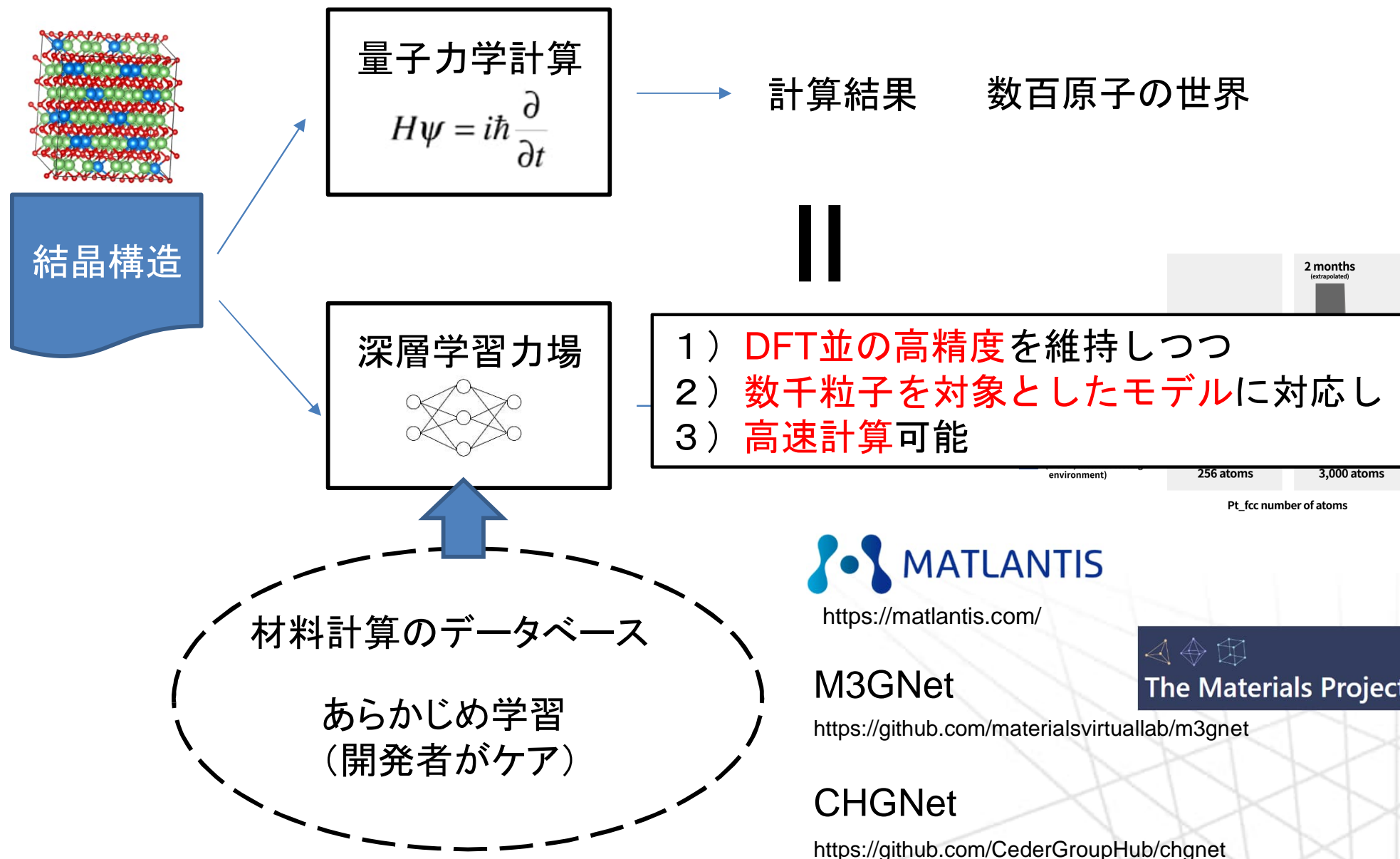
2. 新たな材料知見の発見

人間が見落としがちな複雑な組成・構造・特性の相関をAIが抽出できます。また、高額な分析装置の導入や高スキル人材による解析などのコストを浮かすこともできます。

3. 高速な探索、高度な反応解析

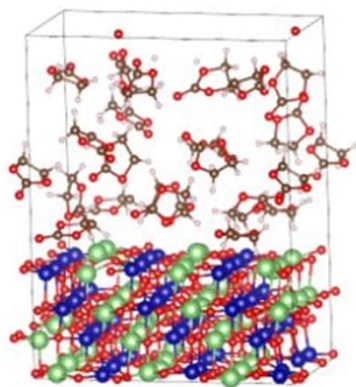
第一原理計算や実験では膨大な組成や構造を網羅するのが困難ですが、機械学習力場を使うと高精度かつ短時間でスクリーニングできます。また、いままでシミュレーション不可能だった複雑反応も評価が可能になりつつあります

話題③ 深層学習力場による材料シミュレーション



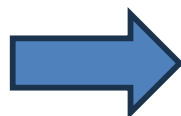
話題③ 深層学習力場による材料シミュレーション

量子力学計算(DFT)

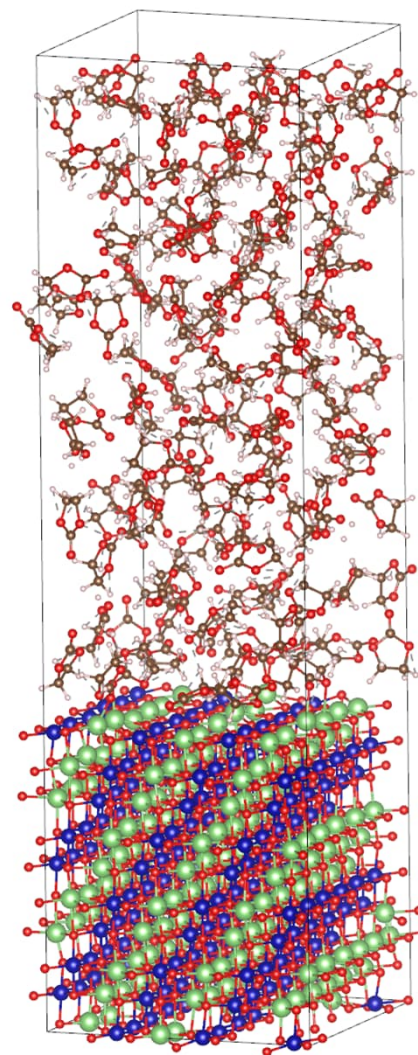


372 原子

数十ps



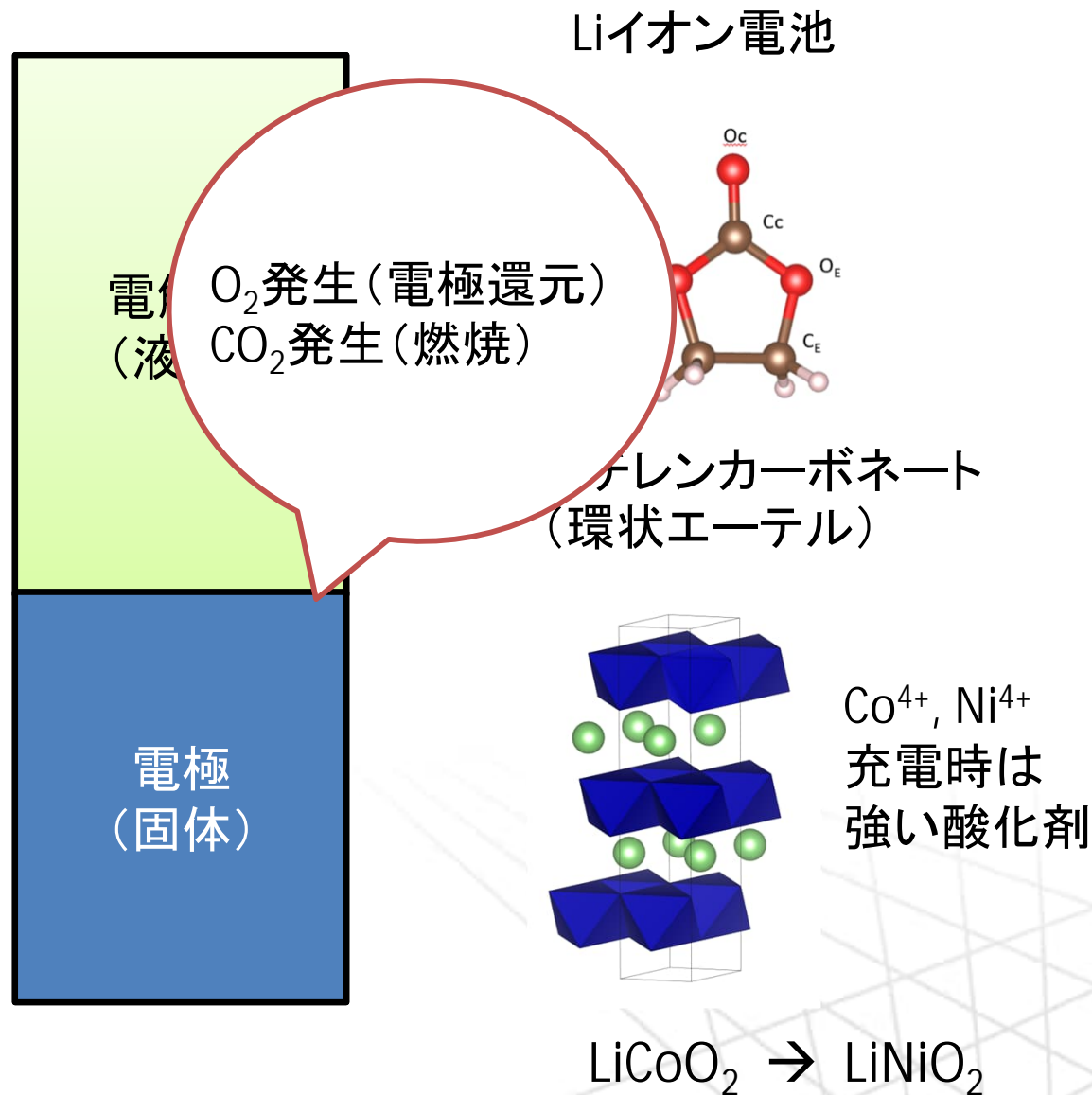
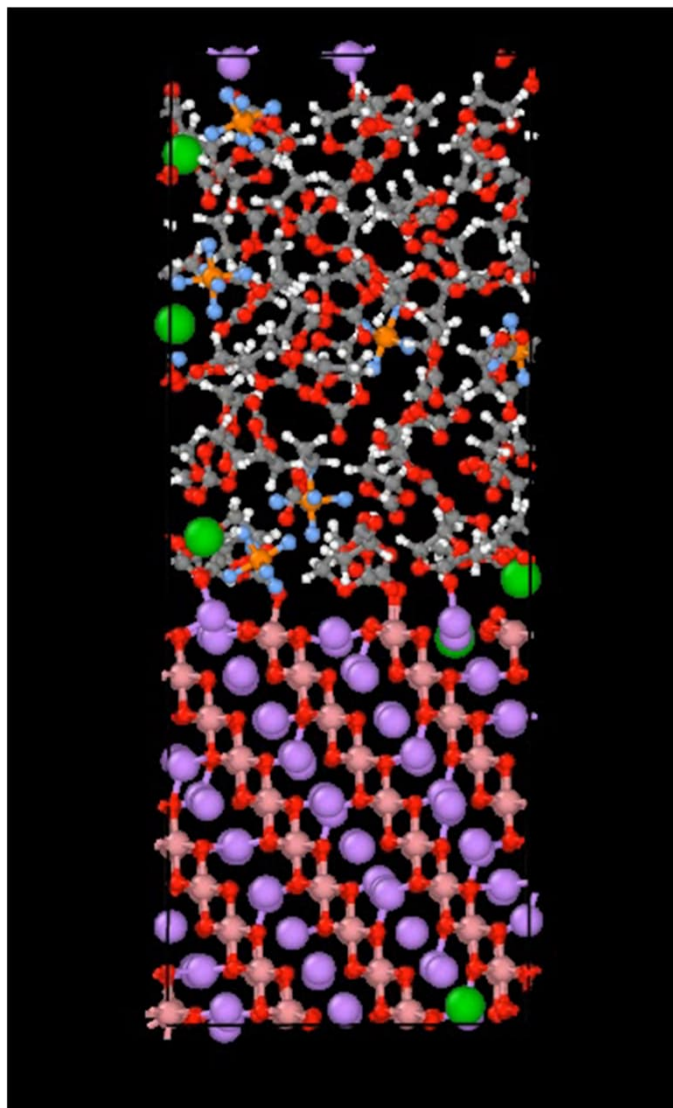
深層学習力場(NNP)



2202 原子

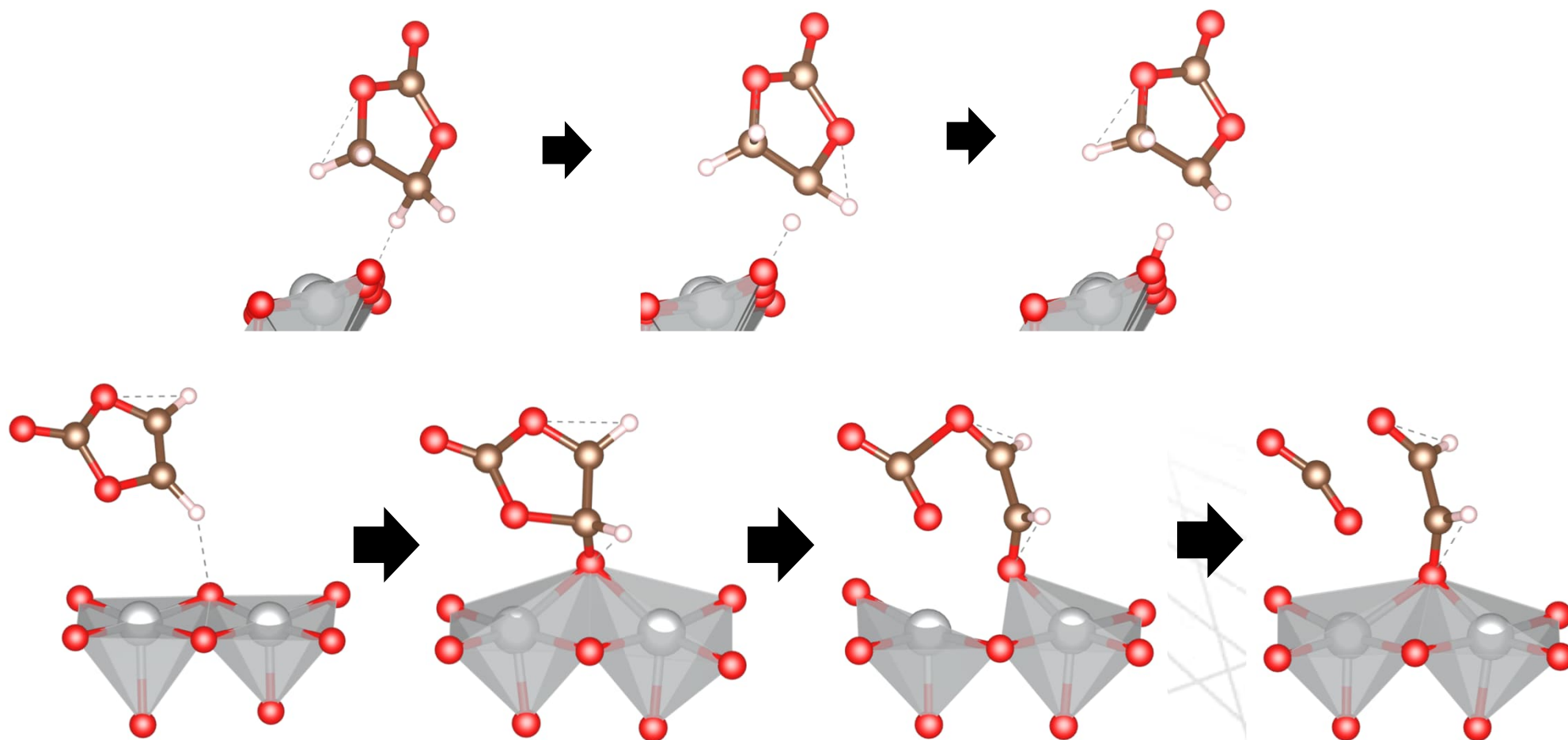
数千ps

話題③ 電極 | 電解液の計算



話題③ 水素解離吸着を起点とするCO₂生成分解

Reaction	LiNiO ₂	Li _{3/4} NiO ₂	Li _{1/2} NiO ₂	Li _{1/4} NiO ₂	NiO ₂
水素解離吸着		3	7	17	31
CO ₂ 生成			1	1	9
O ₂ 生成				1	3(2) ^{a)}



名工大とともに、AIで材料研究を次のステージへ。

- 開発期間の短縮とコスト削減
- 新材料発見の加速
- 人材育成と技術継承
- 次世代技術・ノウハウの獲得

参考文献

話題① *Mater. Adv.*, 3, 8141. (2022) [DOI: 10.1039/D2MA00731B](https://doi.org/10.1039/D2MA00731B)

話題② *APL Mater.* 12, 111120 (2024) [DOI: 10.1063/5.0231411](https://doi.org/10.1063/5.0231411)

話題③ *ACS Appl. Mater. Interfaces* 16, 53621 (2024) [DOI: 10.1021/acsami.4c03866](https://doi.org/10.1021/acsami.4c03866)

【お問合せ】

名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627

E-mail: nitfair@adm.nitech.ac.jp

URL: <https://technofair.web.nitech.ac.jp/>