

汎用な Neural Network Potential 「Matlantis」を使った新素材探索

Materials discovery using universal Neural Network Potential “Matlantis”

(株) Preferred Computational Chemistry¹, ENEOS (株)², (株) Preferred Networks³,

○浅野 裕介¹, 入口 広紀¹, 渡邊 卓², 品川 幾³, 高本 聡³

Preferred Computational Chemistry Inc.¹, ENEOS Corp.², Preferred Networks Inc.³,

○Yusuke Asano¹, Hiroki Iriguchi¹, Taku Watanabe², Chikashi Shinagawa³, So Takamoto³

E-mail: yusukeasano@pfcc.co.jp

近年、触媒やバッテリー材料、半導体材料などの設計において第一原理計算の重要性が高まっている。その第一原理計算結果を高速に予測する技術として Neural Network Potential (NNP)があるが、これまでは特定の材料領域での利用にとどまっていた。我々は様々な領域で高速に材料設計・探索を実施できるようにするため、55 元素に対応した汎用な NNP を開発。「Matlantis」として Software as a services (SaaS)で提供している。本講演では我々が開発した汎用な NNP の技術紹介と、「Matlantis」を使った材料設計事例を紹介する。