

お名前:
井深 丈
所属:
ENEOS株式会社 中央技術研究所 デジタル研究所
役職名:
デジタル研究所長
略歴:
1998年 ENEOS入社。社内情報システム開発、燃料電池制御システム開発、各種シミュレーション・AI技術開発に従事。解析・シミュレーショングループマネージャー、データサイエンスグループマネージャー、先進技術研究所副所長を経て、2023年度より現職。
講演題目:
ENEOSにおける材料開発のDX ～Matlantis™共同開発者とユーザーの視点から～
講演要旨:
カーボンニュートラルやエネルギーセキュリティなどの社会的な要請に迅速に応えるためにはデジタルによる技術革新が欠かせない。ENEOSは材料開発を大幅に加速する汎用原子レベルシミュレータMatlantisをPreferred Networks社と共同で開発・事業化した。現在もシミュレータ開発を継続すると同時に、材料開発への実用も推進している。そのため本講演ではこれら双方の立場でMatlantisを中心とした材料開発のDXについて語る。開発者の視点からは、Matlantisの機能拡張について最近の注目点や今後への期待を述べる。Matlantisユーザーの視点からは、ENEOSグループ内での材料開発(触媒、潤滑油、ポリマーなど)への適用状況のほか、大学や他社など外部連携への活用についても紹介する。

お名前:
浦田 新吾
所属:
AGC株式会社 先端基盤技術研究所 RX推進室
役職名:
室長
略歴:
‘97: 九州大学 理学研究科 物理学専攻 修士卒業 ‘97: AGC (旧 旭硝子) 株式会社入社 ‘99-‘01: 財団法人地球環境産業技術研究機構 新規冷媒等プロジェクト室 研究員(出向) ‘03: 日本大学 生産工学部 論文博士(工学) 情報化学の手法を用いた含フッ素エーテルの環境影響評価と物性推算に関する研究 ‘05-‘14: ガラス製造プロセスの基礎研究・製造支援に従事 ’14-‘16: カリフォルニア大学バークレー 客員研究員 ‘16-: 主に研究開発のDXに従事
講演題目:
素材開発におけるシミュレーションの進化と役割の変化
講演要旨:
ガラスをはじめとするアモルファス材料はその構造が不明確なため、分子シミュレーションが誕生した当初から、その恰好の研究対象である。一方、工業的なガラス材料の開発においては、実プロセスとの時間の乖離に加えて、微量な元素の影響で特性が変化するガラスの繊細さを表現できないなど、分子シミュレーションの活用には多くの課題があった。また、力場の開発など特殊な技術を要するケースも少なくなく、専門家が用いる特別なツールとして認識されてきた。機械学習力場・Matlantisは、それらの課題を克服する新たな技術であり、今では素材開発に不可欠なツールとして実験研究者による活用が広がっている。弊社での応用事例として、酸化物固体電解質であるアルカリホウ珪酸ガラスへの適用を例に、古典力場、量子計算とも比較しながら、その優位性について紹介したい。

お名前:
野武 晃
所属:
東京エレクトロン株式会社 デジタルデザインセンター 装置インテリジェンス開発部
役職名:
略歴:
2014年 内資系新薬開発メーカー入社 ・ メディシナルケミストを経てインシリコ創薬に従事 2020年 東京エレクトロン株式会社入社 ・ マテリアルズインフォマティクスに関連した社内開発やマーケティングに従事
講演題目:
TELにおけるMatlantis活用事例の紹介 -シリコン絶縁膜モデリングへの適用-
講演要旨:
近年の半導体微細化に伴い、従来のシリコン酸化膜より特性の優れた絶縁膜の開発が半導体製造装置業界には求められている。そこで我々はPFP[1, 2]と第一原理計算を用いて、目標とすべきシリコン系低誘電率絶縁膜を探索することにした。非晶質シリコン、非晶質シリコン酸化膜並びに非晶質シリコン窒化膜などの代表的な膜の分子モデルを作成し、得られた非晶質の各分子モデルの妥当性を複数の指標で検証した。当日はMatlantisの社内展開の概要についても可能な範囲で報告したい。 [1] S. Takamoto, et al., Nat Commun 13, 2991 (2022). doi: 10.1038/s41467-022-30687-9 [2] Matlantis (https://matlantis.com/), software as a service style material discovery tool.

お名前:

高桑 達哉 ・ 岩崎 類

所属:

住友電気工業株式会社 IoT研究開発センター AI推進部 MI/PI推進Gr

役職名:

グループ長

略歴:

高桑 達哉

材料開発、化学プラントのプロセス設計などに従事した後に、MIのプロジェクトに参画し実務担当者として進めた結果、MIの破壊力に感動を覚えて当該分野を極める道を目指す。

岩崎 類

入社当初はアルミ合金の開発に携わり、その後はデータ分析で多岐にわたる案件を担当。キャリアを通じて培った材料科学とデータサイエンスの知識を買われてMIに転向し、Matlantisユーザーとなった。計算科学の高速化がもたらす時代の変革を突き進む。

講演題目:

Matlantisが及ぼす破壊的な価値 for Industry

講演要旨:

住友電気工業株式会社ではMatlantisを活用しはや2年以上が経過しました。当社の材料開発に破壊的な価値を提供していただき、沢山の成果に繋がってきました。本講演ではMatlantisを用いた具体的な解析事例のご紹介と当社のMatlantisの機能をフル活用するための取組や、パワーユーザーとなる人材の輩出に向けた取組なども事例と合わせてお話しさせて頂き、今後、Matlantisの開発への期待なども述べさせて頂きたいと思っております。本報告がMatlantisのコミュニティの持続的な発展に繋がることを願っております。

お名前:

酒井 佑規

所属:

太陽誘電株式会社

役職名:

略歴:

2014年、東京工業大学博士後期課程修了。東京大学の特別研究員、テキサス大学オースティン校のポスドク・研究員を経て2021年より現職。

講演題目:

Matlantisを活用した企業研究開発体験プログラム

講演要旨:

弊社は本年、東京工業大学の物質・情報卓越教育院の授業の一環として実施される「プラクティススクール」の実施企業として採用して頂いた。この授業は、物質・情報卓越教育院に所属する大学院博士課程の学生に対し、情報科学・シミュレーションを活用して企業における研究開発を体験してもらうことを趣旨としており、学生たちに答えのわかっている課題ではなく、企業のリアルな開発課題に取り組んで課題を解決することを目標としている。弊社の電子デバイスの研究開発においては材料設計技術がキーポイントとなるため、複数の研究課題に関する取組においてMatlantisを使用した計算科学的手法を活用した。Matlantisを活用することで、わずか6週間という短い滞在期間でも、効率的に検討を進めることができた。今回の講演では、これらの取り組みの概略について説明する。

お名前:

山崎 久嗣

所属:

トヨタ自動車株式会社

役職名:

主幹

略歴:

早稲田大学理工学部助教→トヨタ自動車電池研究部中途入社(2008年)→先端材料技術部

講演題目:

Matlantisを用いた材料探索の加速

講演要旨:

これまで、ハイスループット第一原理計算を用いた材料探索を行ってきており、材料発見による開発加速に貢献してきた。しかし、計算機上で新材料を生成しても、その構造が安定に存在するかどうかは、その新材料に含有する元素に対する、幅広いエネルギー計算が必要となり、多くの第一原理計算をする他に方法がなかった。場合の数にも依るが、材料発見よりも計算時間が掛かることがほとんどで、その安定性を見極めが最初の壁となっていた。近年、第一原理計算の結果を高速に予測できるMatlantisが登場したことで、それらの計算が格段に加速したと思っており、本公演では、いくつかの事例をご紹介します。有効なやり方、課題などを議論させていただきたい。