

2021年8月30日

各位

**AIが生成した材料の構造画像を用い、物性を予測する技術を開発  
—カーボンナノチューブをはじめとする機能性材料の開発がさらに加速—**

日本ゼオン株式会社

日本ゼオン株式会社（社長：田中 公章）は、2017年より参画している国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」において、先端素材高速開発技術研究組合（ADMAT）、産業技術総合研究所（産総研）と共同で、人工知能（AI）によって材料の構造画像を生成し、高速・高精度で物性の予測を可能とする技術を開発しました。

今回開発した技術により、カーボンナノチューブ（CNT）のような複雑な構造を持つ材料に対し、材料物性の高精度な予測を実現可能にします。これにより、従来はAI技術を適応できなかった様々な材料系についても材料選定から加工・評価まで一連の実験作業を高速・高精度にコンピューター上で再現（仮想実験）することが可能になり、材料開発のさらなる加速化が期待されます。

今後も同プロジェクトを通じ、CNTをはじめとするナノ材料と高分子材料との複合材料を対象としたAI開発技術に取り組むとともに、幅広い材料へ適用可能な技術開発につなげ、新技術および新材料開発の可能性拡大に貢献してまいります。

昨今、材料開発のさらなる高度化・高速化の要求が高まっており、ディープラーニング（深層学習）などの情報処理技術を活用する動きが活発になっています。これらは、さまざまな材料データをコンピューターに学習させることで、高性能な新しい材料の提案を可能とするAI技術で、人の勘や経験に頼る従来の材料開発をさらに高度化することができます。しかし、コンピューター上で扱える材料は構造が定義できる低分子化合物や周期構造を持つ金属、無機化合物に限定されることが大きな課題でした。

このような背景のもと、同プロジェクトではカーボンナノチューブ（CNT）をはじめとする機能性材料開発の高速化を目指し、データ駆動を活用した研究を進めており、ADMAT、産総研と共同で、より汎用性の高い材料ヘディープラーニングを適用する手法を開発しました。

今回開発した技術では、まず複雑な構造を持つCNT膜の構造画像と物性をAIに学習させます。その上で、種類の異なるCNTを任意の割合で混合したさまざまなCNT膜の構造画像としてコンピューター上で生成することで、その物性の高精度な予測を可能にしました。この技術は、従来のAIでは適応できなかった複雑な構造を持つ材料の組成選定・加工・評価といった一連の実験作業をコンピューター上で高速・高精度に再現（仮想実験）することを可能にするもので、材料開発のさらなる加速化を期待できます。

なお、本技術の詳細は8月30日（英国時間）に、Nature Researchが発行する国際学術誌「Communications Materials」の電子版に掲載されました。

以上

本件に関するお問い合わせ先

日本ゼオン株式会社 コーポレートサステナビリティ統括部門 広報室

電話：03-3216-2747