TROY TECHNICAL

# マテリアルインフォマティクス
## ウィークリーレポート

2026年10月24日-10月30日 | Issue 2026-W43

**データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ**

| 13 | 10 |
| --- | --- |
| 分析対象 | 重点テーマ |

発行 2026-10-30 | 日本語版 | 承認済み固定表紙



# マテリアルインフォマティクス:個別発表から認定証拠へ境界が移動

日本語記事13件を棚卸しし、意思決定に重要なテーマを選定した。

シグナル 01 | データ取得

## EdenGNN|結晶材料の電荷密度を1桁以上高速に予測する等変ニューラルネットワーク

結晶材料の電荷密度を、既存の汎用モデルよりも1桁以上高速に予測できる機械学習フレームワーク「EdenGNN」が開発されました。この手法は、完全に学習可能な放射基底関数を用いた基底展開定式化と、電荷移動を捉えるΔ-learning戦略を組み合わせることで計算コストのボトルネックを解消しています。これにより、大規模な電子構造計算やハイスループットな材料スクリーニングの実用性が大幅に向上すると期待されています。

シグナル 02 | モデル化

## リチウム金属電池|AIで132万個の分子を分析し非フッ素系希釈剤368種を特定

ソウル大学の研究チームが、AIを用いてリチウム金属電池用の次世代電解質素材を探索し、約132万個の分子から有望な候補368種を特定した。物理・化学的指標を組み合わせた機械学習アルゴリズムにより、従来の実験ベースの探索を大幅に効率化し、選別した素材のうち3種類で安定的な充放電性能を確認している。これにより、環境負荷が高くコストも嵩むフッ素系素材に代わる非フッ素系希釈剤の開発が加速すると期待される。

シグナル 03 | 候補設計

## オープンポリマーデータセット|リポジトリによる再利用性の格差と品質課題(2020-2025)

2020年から2025年に公開された53,000件以上のポリマーデータセットを監査した結果、データの再利用性は科学的内容よりも「どのリポジトリに保存したか」に強く依存することが判明しました。リポジトリの選択が再利用スコアの分散の37.9%を説明しており、保存先によって品質に極めて大きな差が生じています。ポリマーインフォマティクスや機械学習モデルの精度は、こうしたオープンデータの再利用性に依存するため、現状の「量だけが増え品質が停滞している」状況は深刻な課題となります。

シグナル 04 | 実験

## CLaCとは|MITが開発した結晶構造とテキストを統合するAI、電池材料探索の効率化

MITの研究チームが、3D結晶構造と自然言語を同時に学習するビジョン・ランゲージモデル「CLaC(Contrastive Language-Crystal model)」を開発しました。このモデルは、対照学習を用いて結晶の幾何学的構造と記述文を数学的に結びつけ、自然言語によるクエリから適切な材料候補を抽出することを可能にします。これにより、従来のテキストベースのAIが抱えていたデータの偏りや構造理解の欠如という課題を克服し、次世代電池などの材料探索を加速させます。

編集判断

**今週の経営判断は データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ に集中する。自社条件で関連証拠を再現できる場合だけ次へ進む。**

経営の3アクション

1. 事業会社: 価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る.
2. 供給企業: 組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する.
3. 経営層: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.

証拠の読み方

FACTは収集記事に書かれた内容、事業への読みとACTIONは編集判断、UNKNOWNは記事だけでは確定しない項目を示す。リンク先があることだけで、全主張が独立検証済みとは扱わない。

## 条件と一緒に読む主要数値・証拠5件

**132万**
A13

数値の条件
ソウル大学の研究チームが、AIを用いてリチウム金属電池用の次世代電解質素材を探索し、約132万個の分子から有望な候補368種を特定した。物理・化学的指標を組み合わせた機械学習アルゴリズムにより、従来の実験ベースの探索を大幅に効率化し、選別した素材のうち3種類で安定的な充放電性能を確認している。これにより、環境負荷が高くコストも嵩むフッ素系素材に代わる非フッ素系希釈剤の開発が加速すると期待される。

**2020年**
A10

数値の条件
2020年から2025年に公開された53,000件以上のポリマーデータセットを監査した結果、データの再利用性は科学的内容よりも「どのリポジトリに保存したか」に強く依存することが判明しました。リポジトリの選択が再利用スコアの分散の37.9%を説明しており、保存先によって品質に極めて大きな差が生じています。

**2000年**
A11

数値の条件
清華大学の研究チームが、過去の文献データを用いて非対称有機触媒反応の選択性を予測する機械学習フレームワーク「OrgAIcat」を開発しました。2000年から2020年までの文献から抽出した13,360件のアルドール反応と9,194件のマイケル付加反応のデータセット(iSynth)を基盤としています。これにより、膨大な計算コストを要する量子化学計算なしで、高選択的な触媒の迅速な探索が可能になります。

**2025年**
A09

数値の条件
グラフニューラルネットワーク(GNN)が、グリーン水素製造に不可欠な電極触媒の設計プロセスを根本的に変えようとしています。2025年12月16日に発表されたレビュー論文によれば、GNNは原子構造から材料特性を直接学習することで、従来の試行錯誤や高コストな計算手法を代替します。これにより、水素発生反応(HER)や酸素発生反応(OER)における高性能かつ低コストな新材料の発見が加速します。

**P05**
A05

数値の条件
NVIDIAは、モデルの再学習やアーキテクチャ変更なしに、機械学習(ML)原子間ポテンシャルの計算を高速化するTensor Core FP32手法を公開しました。Blackwell GPUのBF16x9やAmpere GPUのTF32x3を用いることで、精度をFP32ベースラインに近づけたまま、行列演算(GEMM)や分子動力学ステップの速度を向上させています。

数値の読み方
数値は収集記事が示した条件と一緒に掲載する。試験法、寸法、温度、商用段階が異なる値を、条件補正なしで比較しない。

# バリューチェーンはどこで動いたか

各段階に主テーマと補助テーマを接続する。矢印は装飾ではなく、次工程へ渡す証拠を示す。

1

## データ取得

P01/P06

結晶材料の電荷密度を、既存の汎用モデルよりも1桁以上高速に予測できる機械学習フレームワーク「EdenGNN」が開発されました。

2

## モデル化

P02/P07

ソウル大学の研究チームが、AIを用いてリチウム金属電池用の次世代電解質素材を探索し、約132万個の分子から有望な候補368種を特定した。

3

## 候補設計

P03/P08

2020年から2025年に公開された53,000件以上のポリマーデータセットを監査した結果、データの再利用性は科学的内容よりも「どのリポジトリに保存したか」に強く依存することが判明しました。リポジトリの選択が再利用スコアの分散の37.

4

## 実験

P04/P09

MITの研究チームが、3D結晶構造と自然言語を同時に学習するビジョン・ランゲージモデル「CLaC(Contrastive Language-Crystal model)」を開発しました。

5

## 量産・統制

P05/P10

NVIDIAは、モデルの再学習やアーキテクチャ変更なしに、機械学習(ML)原子間ポテンシャルの計算を高速化するTensor Core FP32手法を公開しました。

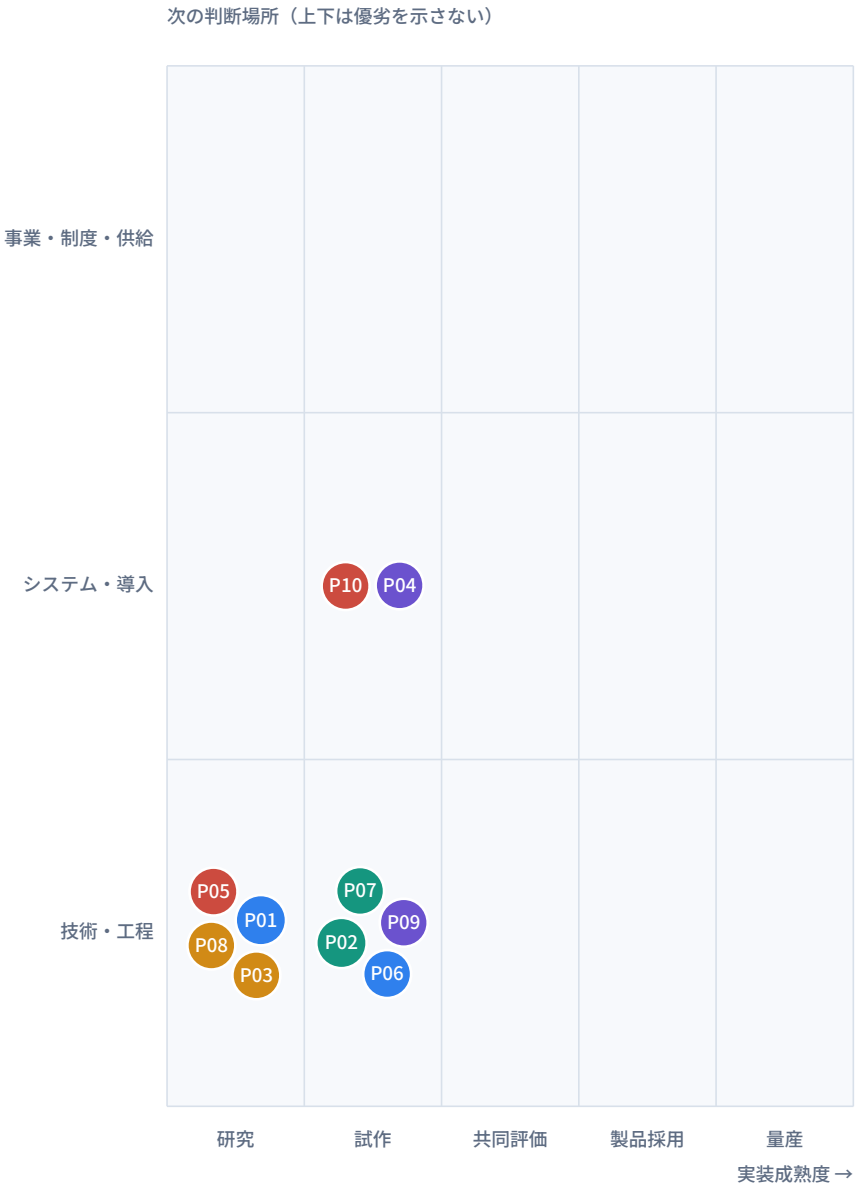
各受渡しで必要な証拠

| | |
|---|---|
| データ取得 → モデル化 | 試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用. |
| モデル化 → 候補設計 | 試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用. |
| 候補設計 → 実験 | 試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用. |
| 実験 → 量産・統制 | 試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用. |

共通管理点

**担当者が関連証拠を再現し、次を記録するまで商用判断へ進めない: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.**

# プライオリティマップ:実装成熟度と次の判断場所




| | |
|---|---|
| P01 | EdenGNN\|結晶材料の電荷密度を1桁以上高速に予測する等変ニューラルネットワーク<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P02 | リチウム金属電池\|AIで132万個の分子を分析し非フッ素系希釈剤368種を特定<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P03 | オープンポリマーデータセット\|リポジトリによる再利用性の格差と品質課題(2020-2025)<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P04 | CLaCとは\|MITが開発した結晶構造とテキストを統合するAI、電池材料探索の効率化<br>システム・導入 \| 根拠: 統合 |
| P05 | NVIDIA Tensor Core\|ML原子間ポテンシャルの計算速度向上と精度維持の手法<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P06 | エポキシ樹脂の劣化解析\|主成分分析(PCA)による硬化剤別の強度低下メカニズム<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P07 | ナトリウム電池\|SEI形成を解明する機械学習ポテンシャルqNEPの性能と手法<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P08 | OrgAIcat\|不完全な文献データから高選択的な有機触媒を予測するMLモデルの性能<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P09 | グラフニューラルネットワーク\|グリーン水素用電極触媒設計の効率化と2025年の最新動向<br>技術・工程 \| 根拠: 統合・事業語なし |
| P10 | MARVEL-AI\|A*STARが主導するAI材料開発プラットフォームの機能と実用化経路<br>システム・導入 \| 根拠: 実装 |

**再現可能な配置ルール**

横軸は研究・試作・共同評価・製品採用・量産の5段階。縦の帯は次の判断場所を技術・工程、システム・導入、事業・制度・供給に分ける。まず記事見出しの根拠語を使い、見出しで判断できない場合だけ概要を参照する。上下は影響の大小を意味しない。円径は編集スコアを示す。

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

## P01 EdenGNN|結晶材料の電荷密度を1桁以上高速に予測する等変ニューラルネットワーク

A04 | データ取得 | 研究

日付未収録

FACT

結晶材料の電荷密度を、既存の汎用モデルよりも1桁以上高速に予測できる機械学習フレームワーク「EdenGNN」が開発されました。この手法は、完全に学習可能な放射基底関数を用いた基底展開定式化と、電荷移動を捉えるΔ-learning戦略を組み合わせることで計算コストのボトルネックを解消しています。これにより、大規模な電子構造計算やハイスループットな材料スクリーニングの実用性が大幅に向上すると期待されています。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP01の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 19/25 | 成熟度 1/5 | 判断場所: 技術・工程

## P02 リチウム金属電池|AIで132万個の分子を分析し非フッ素系希釈剤368種を特定

A13 | モデル化 | 試作

日付未収録

FACT

ソウル大学の研究チームが、AIを用いてリチウム金属電池用の次世代電解質素材を探索し、約132万個の分子から有望な候補368種を特定した。物理・化学的指標を組み合わせた機械学習アルゴリズムにより、従来の実験ベースの探索を大幅に効率化し、選別した素材のうち3種類で安定的な充放電性能を確認している。これにより、環境負荷が高くコストも嵩むフッ素系素材に代わる非フッ素系希釈剤の開発が加速すると期待される。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP02の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 19/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

## P03 オープンポリマーデータセット|リポジトリによる再利用性の格差と品質課題 (2020-2025)

A10 | 候補設計 | 研究

日付未収録

FACT

2020年から2025年に公開された53,000件以上のポリマーデータセットを監査した結果、データの再利用性は科学的内容よりも「どのリポジトリに保存したか」に強く依存することが判明しました。リポジトリの選択が再利用スコアの分散の37.9%を説明しており、保存先によって品質に極めて大きな差が生じています。ポリマーインフォマティクスや機械学習モデルの精度は、こうしたオープンデータの再利用性に依存するため、現状の「量だけが増え品質が停滞している」状況は深刻な課題となります。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP03の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 1/5 | 判断場所: 技術・工程

## P04 CLaCとは|MITが開発した結晶構造とテキストを統合するAI、電池材料探索の効率化

A08 | 実験 | 試作

日付未収録

FACT

MITの研究チームが、3D結晶構造と自然言語を同時に学習するビジョン・ランゲージモデル「CLaC(Contrastive Language-Crystal model)」を開発しました。このモデルは、対照学習を用いて結晶の幾何学的構造と記述文を数学的に結びつけ、自然言語によるクエリから適切な材料候補を抽出することを可能にします。これにより、従来のテキストベースのAIが抱えていたデータの偏りや構造理解の欠如という課題を克服し、次世代電池などの材料探索を加速させます。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP04の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: システム・導入

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

## P05 NVIDIA Tensor Core|ML原子間ポテンシャルの計算速度向上と精度維持の手法

A05 | 量産・統制 | 研究

日付未収録

FACT

NVIDIAは、モデルの再学習やアーキテクチャ変更なしに、機械学習(ML)原子間ポテンシャルの計算を高速化するTensor Core FP32手法を公開しました。Blackwell GPUのBF16x9やAmpere GPUのTF32x3を用いることで、精度をFP32ベースラインに近づけたまま、行列演算(GEMM)や分子動力学ステップの速度を向上させています。原子レベルのシミュレーションで課題となる数値的な安定性と計算速度の両立を実現するアプローチとなります。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP05の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 1/5 | 判断場所: 技術・工程

## P06 エポキシ樹脂の劣化解析|主成分分析(PCA)による硬化剤別の強度低下メカニズム

A06 | データ取得 | 試作

日付未収録

FACT

教師なし学習の一種である主成分分析(PCA)を用いて、フィラー含有アミン硬化エポキシ樹脂の複雑な劣化挙動を体系的に整理することに成功した。FTIRスペクトル解析により、水分、酸化、フィラー(炭酸カルシウム)の3つの要因が強度低下に寄与していることを突き止め、その影響度は使用する硬化剤によって大きく異なることが判明した。これにより、従来は解明が困難だった樹脂の化学的劣化と機械的強度の相関を定量的に把握する手法が提示された。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP06の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

## P07 ナトリウム電池|SEI形成を解明する機械学習ポテンシャルqNEPの性能と手法

A12 | モデル化 | 試作

日付未収録

FACT

ナトリウム電池の電極表面に形成される保護膜(SEI)の生成過程を、ナノ秒スケールでシミュレーション可能にする新手法「qNEP」が開発されました。電荷を考慮したニューロエボリューションポテンシャルを用いることで、従来の機械学習ポテンシャルでは困難だった100ナノ秒までの安定的なシミュレーションを実現しています。これにより、直接観察が困難だったSEIの緻密化や相分離といった成熟過程の解析が可能になります。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP07の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

## P08 OrgAIcat|不完全な文献データから高選択的な有機触媒を予測するMLモデルの性能

A11 | 候補設計 | 研究

日付未収録

FACT

清華大学の研究チームが、過去の文献データを用いて非対称有機触媒反応の選択性を予測する機械学習フレームワーク「OrgAIcat」を開発しました。2000年から2020年までの文献から抽出した13,360件のアルドール反応と9,194件のマイケル付加反応のデータセット(iSynth)を基盤としています。これにより、膨大な計算コストを要する量子化学計算なしで、高選択的な触媒の迅速な探索が可能になります。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP08の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 1/5 | 判断場所: 技術・工程

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

## P09 グラフニューラルネットワーク|グリーン水素用電極触媒設計の効率化と2025年の最新動向

A09 | 実験 | 試作

日付未収録

FACT

グラフニューラルネットワーク(GNN)が、グリーン水素製造に不可欠な電極触媒の設計プロセスを根本的に変えようとしています。2025年12月16日に発表されたレビュー論文によれば、GNNは原子構造から材料特性を直接学習することで、従来の試行錯誤や高コストな計算手法を代替します。これにより、水素発生反応(HER)や酸素発生反応(OER)における高性能かつ低コストな新材料の発見が加速します。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP09の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

## P10 MARVEL-AI|A*STARが主導するAI材料開発プラットフォームの機能と実用化経路

A07 | 量産・統制 | 試作

日付未収録

FACT

シンガポールのA*STARが、AIによる材料探索から実用化までを加速させる新イニシアチブ「MARVEL-AI」を立ち上げた。AIモデルによる候補特定と自動実験による検証をループさせることで、金属合金やポリマーなどの開発サイクルを劇的に短縮する。これにより、研究段階から産業実装までのギャップを埋め、半導体やエネルギー分野などの高付加価値な材料革新を目指す。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP10の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: システム・導入

# 関係者別プレイブックと0-5年ロードマップ

| 関係者 | NOW \| 0-30日 | NEXT \| 1-12か月 | LATER \| 1-5年 |
|---|---|---|---|
| 事業会社 | 価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る | 量産相当条件で受入基準と停止基準を明示して評価する。 | 技術・供給者の変更を吸収できるポートフォリオと設計へ移る。 |
| 材料・装置・技術企業 | 組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する | 顧客と信頼性・工程窓・故障解析の共通データを作る。 | 界面、履歴、ライフサイクル支援、回収サービスを標準化する。 |
| 商社・投資・法務 | Map データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用. | 能力、品質、変更通知、責任、代替、撤退を契約へ入れる。 | 地域・技術・顧客の集中リスクを分散する。 |

ロードマップ

NOW | 0-30日
**証拠台帳**
担当: Strategy + quality
成果物: claim, source, condition, owner

NOW | 0-30日
**リスク選別**
担当: Procurement + legal
成果物: unknowns, alternatives, stop

NEXT | 1-12か月
**共同認定**
担当: R&D + supplier
成果物: 工程窓・故障データ

NEXT | 1-12か月
**商用ゲート**
担当: Business + finance
成果物: 単位採算・供給能力

LATER | 1-5年
**プラットフォーム戦略**
担当: 経営
成果物: ポートフォリオ・界面ロードマップ

LATER | 1-5年
**サービス層**
担当: Operations + channel
成果物: 監視・保守・回復

Go / No-Goゲート

| ゲート | 担当 | 必要な証拠 | 中止条件 |
|---|---|---|---|
| G1 証拠 | 品質 | 出典・試験条件・再現性 | 追跡可能な証拠なし |
| G2 統合 | 研究開発 | 界面・工程窓・故障解析 | システム条件を満たさない |
| G3 商用 | 事業 | 能力・総原価・契約・代替 | 採算または供給が成立しない |
| G4 運用 | 運用 | 監視・保守・変更通知・撤退 | 責任ある運用計画なし |

## 分析対象記事 | 01-07件目

全記事の正式タイトルと元記事URLを省略せず表示する。URLは折返しても全文を保持し、クリックできる。

| ID | 記事タイトル(全文) | 元記事URL(全文・クリック可能) |
|---|---|---|
| A01 | MXene\|AIによる過去の結晶データ再解析で33個の候補を特定、11種の新物質を合成 | https://xenospectrum.com/en/ai-rediscovered-multilayer-mxenes-science-2026/ |
| A02 | AI材料モデルの新ベンチマーク\|物理的整合性の検証と熱伝導率予測の課題 | https://bioengineer.org/new-benchmark-tests-whether-ai-materials-models-get-physics-right/ |
| A03 | 遷移金属炭化物\|機械学習による融点予測、組成のみで十分な精度が出るか | https://bioengineer.org/machine-learning-shows-composition-alone-predicts-melting-in-transition-metal-carbides/ |
| A04 | EdenGNN\|結晶材料の電荷密度を1桁以上高速に予測する等変ニューラルネットワーク | https://bioengineer.org/equivariant-neural-network-predicts-charge-density-over-an-order-of-magnitude-faster/ |
| A05 | NVIDIA Tensor Core\|ML原子間ポテンシャルの計算速度向上と精度維持の手法 | https://blockchain.news/news/nvidia-blog-tensor-core-speedups-ml-interatomic-potentials |
| A06 | エポキシ樹脂の劣化解析\|主成分分析(PCA)による硬化剤別の強度低下メカニズム | https://bioengineer.org/research-report-unsupervised-learning-based-analysis-of-degradation-behavior-in-filler-containing-amine-cured-epoxy-formulations/ |
| A07 | MARVEL-AI\|A*STARが主導するAI材料開発プラットフォームの機能と実用化経路 | https://www.a-star.edu.sg/news/press-releases/marvel-ai-accelerating-advanced-materials-innovation-from-discovery-to-deployment |

## 分析対象記事 | 08-13件目

全記事の正式タイトルと元記事URLを省略せず表示する。URLは折返しても全文を保持し、クリックできる。

| ID | 記事タイトル(全文) | 元記事URL(全文・クリック可能) |
|---|---|---|
| A08 | CLaCとは\|MITが開発した結晶構造とテキストを統合するAI、電池材料探索の効率化 | https://www.intelligentliving.co/mit-taught-ai-read-crystals-find-better/ |
| A09 | グラフニューラルネットワーク\|グリーン水素用電極触媒設計の効率化と2025年の最新動向 | https://bioengineer.org/graph-neural-networks-reshape-electrocatalyst-design-for-green-hydrogen/ |
| A10 | オープンポリマーデータセット\|リポジトリによる再利用性の格差と品質課題(2020-2025) | https://bioengineer.org/reuse-quality-of-open-polymer-datasets-a-reproducible-cross-repository-audit-2020-2025/ |
| A11 | OrgAIcat\|不完全な文献データから高選択的な有機触媒を予測するMLモデルの性能 | https://bioengineer.org/machine-learning-model-turns-decades-of-literature-data-into-a-fast-route-to-highly-selective-organocatalysis/ |
| A12 | ナトリウム電池\|SEI形成を解明する機械学習ポテンシャルqNEPの性能と手法 | https://bioengineer.org/machine-learning-simulations-reveal-how-sodium-batteries-form-their-protective-interface/ |
| A13 | リチウム金属電池\|AIで132万個の分子を分析し非フッ素系希釈剤368種を特定 | https://www.aitimes.kr/news/articleView.html?idxno=42475 |

# マテリアルインフォマティクス 採用記事 全文集

出力日: 2026-11-01

採用記事数: 13 件

# 収録記事一覧

#01 MXene｜AIによる過去の結晶データ再解析で33個の候補を特定、11種の新物質を合成
#02 AI材料モデルの新ベンチマーク｜物理的整合性の検証と熱伝導率予測の課題
#03 遷移金属炭化物｜機械学習による融点予測、組成のみで十分な精度が出るか
#04 EdenGNN｜結晶材料の電荷密度を1桁以上高速に予測する等変ニューラルネットワーク
#05 NVIDIA Tensor Core｜ML原子間ポテンシャルの計算速度向上と精度維持の手法
#06 エポキシ樹脂の劣化解析｜主成分分析（PCA）による硬化剤別の強度低下メカニズム
#07 MARVEL-AI｜A*STARが主導するAI材料開発プラットフォームの機能と実用化経路
#08 CLaCとは｜MITが開発した結晶構造とテキストを統合するAI、電池材料探索の効率化
#09 グラフニューラルネットワーク｜グリーン水素用電極触媒設計の効率化と2025年の最新動向
#10 オープンポリマーデータセット｜リポジトリによる再利用性の格差と品質課題（2020–2025）
#11 OrgAIcat｜不完全な文献データから高選択的な有機触媒を予測するMLモデルの性能
#12 ナトリウム電池｜SEI形成を解明する機械学習ポテンシャルqNEPの性能と手法
#13 リチウム金属電池｜AIで132万個の分子を分析し非フッ素系希釈剤368種を特定

# #01 MXene｜AIによる過去の結晶データ再解析で33個の候補を特定、11種の新物質を合成

公開日 2026年10月30日　xenospectrum



## 概要

スウェーデンのリンショーピン大学を中心とする国際研究チームが、機械学習を用いて過去の結晶構造データを解析し、見落とされていたMXene候補を33個特定した。この知見に基づき、希土類元素を含む11種類の新しい層状化合物の合成に成功した。過去の知見と現代のAI解析を組み合わせることで、新材料発見の効率的なワークフローを提示した点に意義がある。

## 詳細

### 主要成果

国際研究チームは、機械学習によるデータベース解析と過去の文献レビューを組み合わせ、これまで見落とされていたMXene（マキシン）の候補物質を33個特定した。この成果は2026年10月29日に学術誌『Science』に掲載された。チームは得られた知見を活用し、希土類元素を含む11種類の新しい層状化合物を合成することに成功した。既知化合物の再合成を含め、実験的に得られた多層MXeneは合計18種類に達する。

### 技術・詳細

本研究では、AIが未知の物質をゼロから設計したのではなく、既存の膨大な結晶構造データからMXeneに類似した原子配列を持つ候補を抽出する役割を担った。具体的には、Materials ProjectおよびOpen Quantum Materials Database (OQMD) のデータを対象に、結晶対称性、原子間距離、元素配置などの条件で絞り込みを行い、多層MXeneに相当する構造を持つ56個の化合物を抽出した。そのうち33個が、これまでMXeneとして認識されていなかった候補であった。

合成プロセスにおいては、機械学習による分類、研究者による文献確認、第一原理計算、そして「自己伝播高温合成（SHS）」を組み合わせたワークフローを採用した。SHSは、短時間の点火によって高温化学反応を誘発させる手法で、外部からの持続的な加熱を必要とせず、数分以内に合成が完了するのが特徴である。

### 背景・業界の文脈

MXeneは、主に遷移金属の炭化物や窒化物からなる二次元材料の総称で、2011年に米国のドレクセル大学の研究者によって初めて報告された。高い電気伝導性と大きな比表面積を持つため、電池電極、電磁波遮蔽、触媒などの用途で研究されている。代表的な材料にはチタンベースの$Ti_3C_2T_x$がある。

従来のMXene合成は、MAX相と呼ばれる層状の前駆体結晶から、フッ化水素酸などの強酸を用いて特定の原子層を選択的にエッチングし、剥離させる手法が一般的であった。しかし、この手法は前駆体の合成やエッチングに時間を要し、強酸の使用に伴う安全性や環境負荷が課題となっていた。本研究が焦点を当てたのは、一般式$\mathrm{M}_2\mathrm{XT}_2$（M: 金属、X: 主に炭素または窒素、T: 終端元素）で表される多層構造である。

## 今後の展望

今回の研究で特定された33個の候補は、1970年代などの数十年前の研究で既に合成されていたが、当時はグラフェンなどの二次元材料研究が普及していなかったため、層状ハロゲン化物として扱われ、その潜在能力が十分に探索されていなかった。過去の結晶構造データを現代の視点から再評価し、実験的な合成へと繋げる一連のワークフローを確立したことで、埋もれていた既存知見から効率的に新材料を発見する道が開かれた。

---

元記事: https://xenospectrum.com/en/ai-rediscovered-multilayer-mxenes-science-2026/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #02 AI材料モデルの新ベンチマーク｜物理的整合性の検証と熱伝導率予測の課題

公開日 2026年10月27日　BIOENGINEER　アメリカ



## 概要

コロンビア大学とケンブリッジ大学の研究チームが、AIによる材料モデルが物理的に正しい根拠に基づいて予測を行っているかを検証する新しいベンチマークを開発した。このベンチマークは、量子レベルの原子間相互作用をマクロな熱的・機械的特性に変換する機械学習モデルを評価し、予測結果が正しくてもその物理的根拠が誤っているケースを明らかにしている。材料探索の高速化にAIが導入される中、予測の信頼性を担保するための重要な指標となる。

## 詳細

### 主要成果

コロンビア大学のMichele Simoncelli助教授と、ケンブリッジ大学のBalázs Póta氏、Paramvir Ahlawat氏、Gábor Csányi氏らの研究チームは、AI材料モデルの物理的な正しさをテストする新しいベンチマークを開発し、Nature Communications誌で発表した。このベンチマークは、AIモデルがマクロな材料特性を予測する際、その根拠となる原子レベルの物理現象（原子振動など）を正しく記述できているかを定量的に評価するものである。検証の結果、形成エネルギーや材料安定性の予測精度が同等であっても、原子振動の記述が不正確でありながら、結果的に熱伝導率の予測値だけが正解に近いという「誤った理由による正解」を導き出すモデルが存在することが判明した。

### 技術・詳細

材料の遮音性、耐熱性、熱膨張などの特性は、原子核と電子の相互作用や摂動への反応といった微視的な挙動に起因する。本来、これらの量子挙動はシュレーディンガー方程式によって記述されるが、現実的な材料においてこの方程式を解析的に解くことは極めて困難であり、計算コストもシステムサイズに応じて激増する。そこで登場したのが「機械学習原子間ポテンシャル」と呼ばれるモデルである。これは量子力学的な計算から得られた原子位置、エネルギー、力、応力のデータセットを学習することで、シュレーディンガー方程式を毎回解くことなく原子間相互作用を予測し、従来の計算手法より約1000倍の高速化を実現している。

しかし、本研究チームは、従来のモデル評価が主に「エネルギー」の予測精度に偏っていたことを指摘する。エネルギーだけでは、原子のダイナミクスを決定する「力」の誤差を見逃す可能性があり、特に温度変化や機械的摂動への反応を予測する際に問題となる。チームは100種類以上の異なる結晶材料を用い、AIモデルの予測を従来の量子力学計算と比較した。その結果、エネルギーベースの予測に長けていても、量子レベルの微細な熱振動を歪めて捉えているモデルがあることが明らかになった。

## 背景・業界の文脈

現在、AIによる材料モデルは単なる研究段階を脱し、大手テクノロジー企業やスタートアップ企業によって候補材料のスクリーニングに実用的に導入されている。特に、アルゴリズムが提案した材料をロボットラボが自動的に合成・テストするというクローズドループな開発体制が構築されつつある。このような状況下で、AIが導き出した答えが「信頼に足るものか」という問いは、学術的な関心事ではなく、実用上の極めて重要な課題となっている。

## 今後の展望

Simoncelli氏は、材料のマクロな特性を、原子振動という原子レベルの物理学を正しく記述した結果として予測できるモデルこそが「物理的に意識された（physics-aware）」モデルであると定義している。速度だけでなく、物理的な整合性を伴った正しさを追求することが、今後のAI材料科学における標準的な指標になると考えられる。

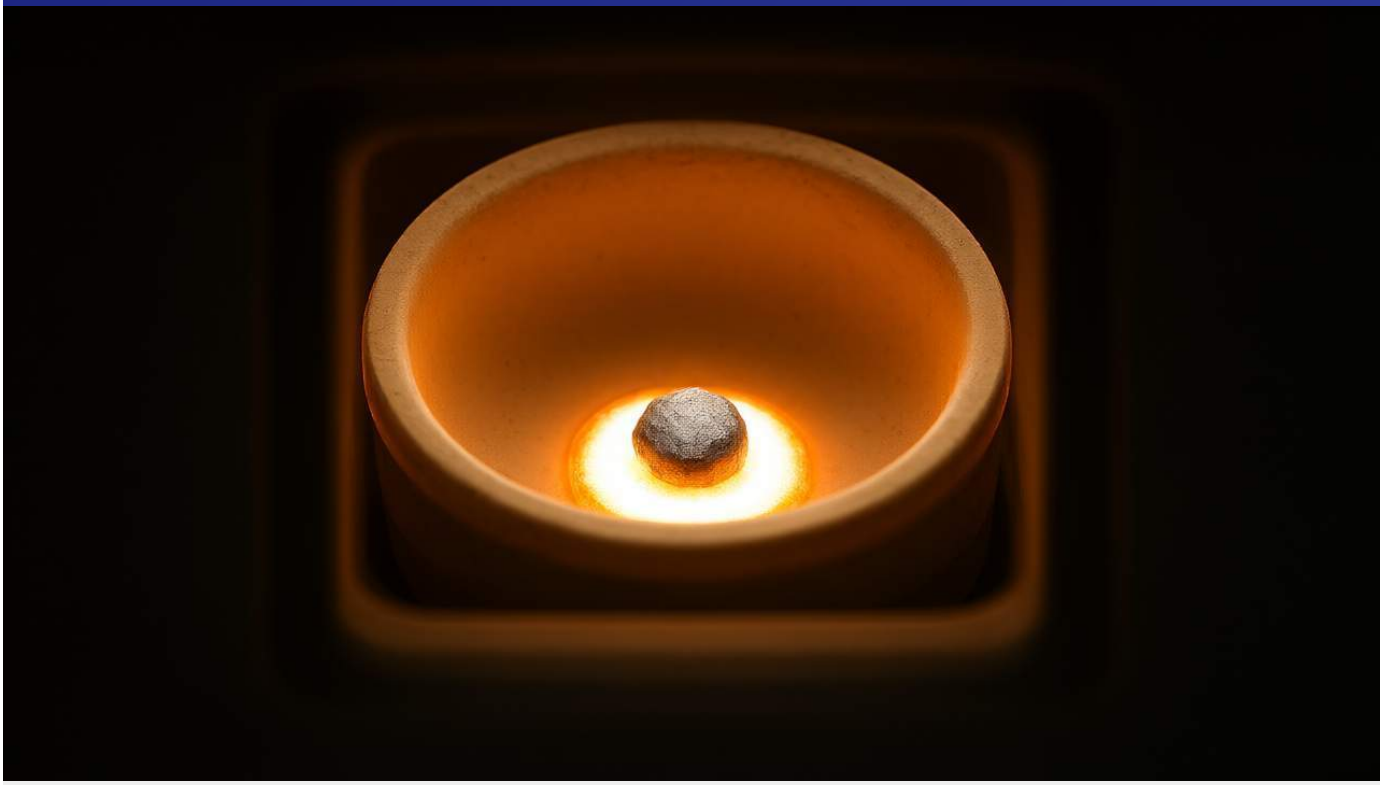
---

元記事: https://bioengineer.org/new-benchmark-tests-whether-ai-materials-models-get-physics-right/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #03 遷移金属炭化物｜機械学習による融点予測、組成のみで十分な精度が出るか

公開日 2026年10月29日　BIOENGINEER



## 概要

遷移金属炭化物の融点予測において、元素組成のみを用いた機械学習モデルが十分な精度を持つことが明らかになりました。形成エネルギーや局所的な結合幾何構造などの詳細情報を追加しても、予測精度に統計的に有意な向上は見られませんでした。この結果は、超高温セラミックスの物性予測において、複雑な記述子よりも組成データが支配的な役割を果たすことを示唆しています。

## 詳細

### 主要成果

遷移金属炭化物の融点予測において、元素組成と元素特性の記述子のみを用いるモデルが、最も効率的な予測手段であることが示されました。研究チームが実施した検証では、組成ベースのモデルに「形成エネルギー」や「金属-炭素結合の幾何構造」といったより詳細な情報を加えても、予測精度の向上に統計的な有意差は認められませんでした。これにより、組成情報だけで融点を十分に予測可能であることが実証されました。

### 技術・詳細

本研究では、74の化学式グループから抽出された105種類の材料と、1,182個の局所的な金属-炭素結合を分析対象としました。幾何学的記述子の正確性を確認するため、Materials Projectデータベースの緩和結晶構造から結合長を再構築したところ、平均絶対誤差（MAE）2.6 × $10^{-5}$ Å、平方根平均二乗誤差（RMSE）2.9 × $10^{-5}$ Åという極めて高い一致率を確認しています。

モデルの評価には、化学式ごとにグループ化したネストされた交差検証（nested evaluation）を採用し、訓練データとテストデータの間に類似組成が混入する「データリーク」を防止しました。この厳格なプロトコル下での決定係数（$R^2$）は、形成エネルギーで0.806、融点で0.880を記録しました。また、16のパーティションにわたる有限ルール式から構築されたアンサンブルモデルでは、融点予測において$R^2$ 0.911、MAE 95.1 K、RMSE 132.4 Kという高い精度を達成しました。

さらに、ベースラインとなる組成記述子に他の情報を追加して精度変化を測定する「アブレーション実験」を実施しました。その結果、決定係数の増加分は形成エネルギーで0.0138、結合幾何構造で0.0090、両方の組み合わせで0.0124に留まり、ブートストラップ信頼区間はすべてゼロを含んでいました。Holm調整済みのペア統計検定により、これらの向上はノイズである可能性が高く、有意ではないと結論付けられました。

### 背景・業界の文脈

超高温セラミックスの分野では、電子構造や結合幾何学、熱力学的量などのリッチな情報をモデルに組み込むことで、予測精度を向上させられるかという議論が長年続いてきました。材料インフォマティクスにおいて、マルチスケールの記述子（原子レベルから構造レベルまでの異なる尺度の指標）を導入することは一般的ですが、それが実際に予測性能に寄与するかどうかは、本研究のような厳格な検証が必要とされていました。

## 今後の展望

研究チームは、本データセットの範囲内では、組成と元素特性が融点予測における再現可能な信号の大部分を担っていると結論付けています。形成エネルギーや局所的な結合幾何構造は、特定の炭化物がなぜその融点を持つのかという「解釈的な文脈」を提供する上では有用ですが、予測精度を独立して向上させるものではありません。今後は、予測精度の追求よりも、物理的なメカニズムの理解にこれらの記述子を活用することが重要になると考えられます。

---

元記事: https://bioengineer.org/machine-learning-shows-composition-alone-predicts-melting-in-transition-metal-carbides/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #04 EdenGNN｜結晶材料の電荷密度を1桁以上高速に予測する等変ニューラルネットワーク

公開日 2026年10月23日　BIOENGINEER　アメリカ



## 概要

結晶材料の電荷密度を、既存の汎用モデルよりも1桁以上高速に予測できる機械学習フレームワーク「EdenGNN」が開発されました。この手法は、完全に学習可能な放射基底関数を用いた基底展開定式化と、電荷移動を捉えるΔ-learning戦略を組み合わせることで計算コストのボトルネックを解消しています。これにより、大規模な電子構造計算やハイスループットな材料スクリーニングの実用性が大幅に向上すると期待されています。

## 詳細

### 主要成果

Xiwen Li氏、Hongjun Xiang氏らの研究チームは、結晶材料の電荷密度を極めて効率的に予測する機械学習フレームワーク「Equivariant Density Graph Neural Network（EdenGNN）」を開発しました。このモデルは、既存の汎用的な電荷密度予測アプローチと比較して、計算速度を1桁以上（over an order of magnitude）向上させています。本成果はNature Machine Intelligence誌に掲載されました。

### 技術・詳細

EdenGNNは、電荷密度とオーグメンテーション占有率（augmentation occupancies）の両方を予測します。これにより、プロジェクター拡張波（projector augmented-wave）精度での電子構造計算が可能になります。効率化を実現した技術的なポイントは以下の2点です。

- 完全に学習可能な放射基底関数（radial basis functions）を使用した基底展開定式化の採用。
- 電荷移動を正確に捉えるためのΔ-learning戦略の導入。

汎用性を検証するため、研究チームはMaterials Projectデータベースを用いてユニバーサル版の「EdenGNN-Uni」をトレーニングしました。このモデルは周期表全域の非磁性構造をカバーしており、未知の材料に対しても広範な化学空間においてバンド構造を正確に予測できることが示されました。また、GNoMEデータベースから抽出した代表的なテスト構造を用いてDFT（密度汎関数理論）計算と比較したところ、予測されたバンド構造は良好に一致し、汎用的な機械学習ハミルトニアン手法よりも堅牢性が高いことが報告されています。

### 背景・業界の文脈

材料の電子構造を計算する標準的な手法である密度汎関数理論（DFT）は、その中心に電荷密度の計算を据えています。しかし、DFT計算は計算コストが非常に高く、これまでも汎用的な予測を目指した機械学習モデルが開発されてきましたが、それら自体が膨大な計算コストを必要とするという課題がありました。EdenGNNは、この計算コストのボトルネックを解消するために設計されました。

## 今後の展望

著者らは、今回の結果によって機械学習による電荷密度モデルが、スケーラブルな第一原理（ab initio）手法として確立されたと主張しています。これにより、材料探索における大規模な電子構造計算やハイスループットスクリーニングがより現実的なものになると見られています。なお、本モデルの性能はトレーニングデータに依存しており、報告されたユニバーサルモデルは非磁性構造に適用されるものであるとしています。

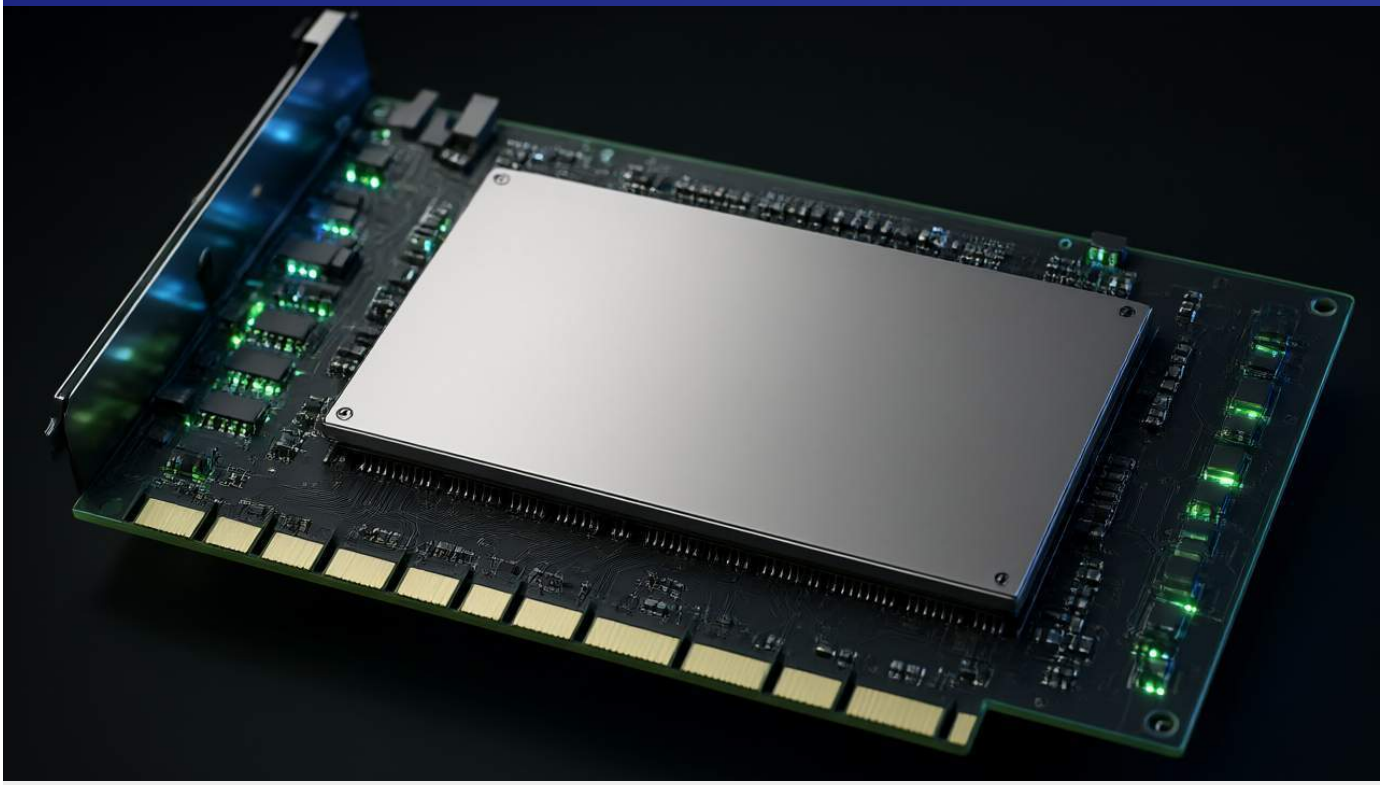
---

元記事: https://bioengineer.org/equivariant-neural-network-predicts-charge-density-over-an-order-of-magnitude-faster/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #05 NVIDIA Tensor Core｜ML原子間ポテンシャルの計算速度向上と精度維持の手法

公開日 2026年10月29日　Blockchain News　アメリカ



## 概要

NVIDIAは、モデルの再学習やアーキテクチャ変更なしに、機械学習（ML）原子間ポテンシャルの計算を高速化するTensor Core FP32手法を公開しました。Blackwell GPUのBF16x9やAmpere GPUのTF32x3を用いることで、精度をFP32ベースラインに近づけたまま、行列演算（GEMM）や分子動力学ステップの速度を向上させています。原子レベルのシミュレーションで課題となる数値的な安定性と計算速度の両立を実現するアプローチとなります。

## 詳細

### 主要成果

NVIDIAが2026年10月29日に公開した開発者ブログによると、同社のTensor Core FP32手法を用いることで、機械学習原子間ポテンシャルの計算速度を大幅に向上させることが可能です。EPFLのLab COSMOが開発したTransformerベースのポテンシャル「Point Edge Transformer（PET）」を用いた検証では、モデルの再学習や構造変更を行うことなく、FP32ベースラインに近い挙動を維持したまま高速化を達成しました。

Blackwell GPUにおけるBF16x9パスでは、17,280原子のワークロードにおいて大規模なPET GEMM（一般行列乗算）が2.2倍から2.5倍に加速されました。分子動力学（MD）ステップの速度向上は、192原子の水ボックスで1.2倍〜1.4倍、17,280原子のシステムで1.4倍〜1.7倍（cuBLAS戦略が「performant」か「eager」かによる）となりました。また、BF16x9の誤差はPET自体の非決定性のレベルを下回る結果となっています。

Ampere GPUのTF32x3では、A100 Tensor Core GPUにおいて大規模PET GEMMが約1.7倍〜1.9倍に加速されました。2,600万パラメータのチェックポイントでは、大規模システムでのMDステップが1.5倍高速化し、2億5,500万パラメータのチェックポイントでは192原子システムで1.4倍の速度向上を記録しました。この際の力誤差は3.9 × $10^{-6}$ eV/Åでした。

### 技術・詳細

本手法の核心は、数値精度の維持と計算効率の最適化にあります。原子レベルのシミュレーションは微小な数値差が蓄積しやすいため、精度管理が極めて重要です。検証の結果、TF32x3はFP32と同様に滑らかなCO/Pt(111)ポテンシャルエネルギー曲線を描き、192原子の水ボックスを用いた30 psのNVEシミュレーションでも、FP32と同等の限定的なエネルギー変動を示しました。対照的に、1パスのTF32では点間の変動が顕著であり、エネルギーのドリフトも大きくなる傾向が見られました。

また、NVIDIA ALCHEMI ToolkitのFIRE2オプティマイザーを用いた539原子のカンター合金スラブの構造緩和テストでは、FP32が218ステップで収束したのに対し、TF32x3は3回の試行で218〜222ステップで収束し、いずれも1.0 × $10^{-3}$ eV/Åの力許容値に達しました。一方で、1パスのTF32は500ステップ以内に収束せず、制限を1,000ステップに倍増させても収束に失敗しました。

実装面では、BlackwellのBF16x9は各FP32オペランドを3つのBF16コンポーネントに分解し、9つの積をFP32で再結合します。これは環境変数「CUBLAS_EMULATE_SINGLE_PRECISION=1」などで有効化できます。AmpereのTF32x3は、FP32オペランドを主要なTF32コンポーネントと残差コンポーネントに分割し、3つのクロス積を評価して残差同士の項を省略する手法です。これはCUTLASSのOpMultiplyAddFastF32オペレーターを使用し、モデルインターフェースでのFP32入出力を維持しています。

## 背景・業界の文脈

原子間ポテンシャルの計算において、実行時間の多くは最適化済みの一般行列乗算（GEMM）に費やされます。そのため、さらなる最適化の余地（ヘッドルーム）は限られていますが、ここを効率化することがエンドツーエンドの性能向上に直結します。ただし、得られる恩恵はシステムサイズに依存します。小規模なシステムでは、カーネルの起動オーバーヘッドや近接原子の処理、グラフ操作の割合が大きいため、GEMMの高速化によるメリットは相対的に小さくなります。一方で、大規模システムほどGEMMの計算量が増えるため、本手法による加速効果が顕著に現れます。

## 今後の展望

NVIDIAは、TF32x3の性能がモデルの行列形状やハードウェアに対するカーネルチューニングに依存することを指摘しています。また、BF16x9およびTF32x3の導入にあたっては、個別のワークロードにおける精度および安定性の要件に照らして検証を行う必要があるとしています。本報告は製品の発売ではなく技術的なパフォーマンスレポートであり、具体的な価格や市場への影響、広範な採用見込みについては言及されていません。

元記事: https://blockchain.news/news/nvidia-blog-tensor-core-speedups-ml-interatomic-potentials

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #06 エポキシ樹脂の劣化解析｜主成分分析（PCA）による硬化剤別の強度低下メカニズム

公開日 2026年10月28日　BIOENGINEER



## 概要

教師なし学習の一種である主成分分析（PCA）を用いて、フィラー含有アミン硬化エポキシ樹脂の複雑な劣化挙動を体系的に整理することに成功した。FTIRスペクトル解析により、水分、酸化、フィラー（炭酸カルシウム）の3つの要因が強度低下に寄与していることを突き止め、その影響度は使用する硬化剤によって大きく異なることが判明した。これにより、従来は解明が困難だった樹脂の化学的劣化と機械的強度の相関を定量的に把握する手法が提示された。

## 詳細

### 主要成果

本研究では、主成分分析（PCA）を用いることで、エポキシ接着剤の劣化に伴う複雑なスペクトル変化を整理し、機械的強度の喪失と結びつける手法を確立した。特に、使用する硬化剤の種類によって劣化のプロセスや時間軸が劇的に異なることが明らかになった。例えば、アミドアミン（AMAM）を用いた系では、引張強度が単調に減少せず、「低下→部分的な回復→再低下」という特異な挙動を示すことが確認された。

### 技術・詳細

実験では、Cemedine Co., Ltd.製のベース樹脂（エポキシ樹脂、CTBN変性エポキシ、シリカ、炭酸カルシウム、酸化カルシウムを含む）に、3種類の硬化剤（脂肪族ポリアミンのTETA、芳香族ジアミンのMDA、市販アミドアミンのAMAM）を混合して試料を作成した。加速劣化試験は、63 °Cおよび87 °Cの温水浸漬、ならびに120 °C・相対湿度100%の湿潤空気曝露の3条件で実施された。

劣化後の試料に対し、ハンドヘルドFTIR分光計を用いて赤外スペクトルを測定し、PCAを適用した結果、分散の約90%を説明する3つの主要成分が抽出された。

- 第1の成分：3000〜3600 $cm^{-1}$のOH伸縮領域（水分関連）
- 第2の成分：1700および1100 $cm^{-1}$付近のカルボニル、CO、CN振動（酸化関連）
- 第3の成分：700、900、1400 $cm^{-1}$付近の炭酸カルシウムバンド（フィラー相）

これらの成分の分離度は硬化剤に依存し、TETAとAMAMでは明確に区別できたが、MDAの63 °C条件では水分関連と酸化関連の変化が類似した時間軸で進行し、重なり合っていた。一方、MDAを87 °Cまで昇温させると、各劣化プロセスの速度と支配性が分かれ、成分の分離が進むことが示された。

### 背景・業界の文脈

半導体パッケージから自動車、航空機の軽量接合部まで、現代社会の多くの構造物は接着剤によって支えられている。しかし、材料の経年劣化に伴う化学的変化を解明し、それがどのように機械的強度の低下に直結するかを特定することは、極めて困難な課題であった。本研究では、あえて前処理を最小限に抑えた生のスペクトルデータにPCAを適用することで、モデル依存の仮定を排除し、物理的に意味のある変化を抽出することを目指した。

## 今後の展望

AMAM系で見られた強度の部分的な回復は、水とポリマーネットワークの相互作用によるネットワークの緩和や再編成が一時的に強度を向上させた可能性が示唆されている。また、最終段階での急激な強度喪失がフィラー関連の要因（第3成分）と一致したことは、劣化後期において界面の変化が重要になるという仮説を提示している。これらのメカニズムは現時点では暫定的な仮説であり、今後の独立した実験による検証が期待される。

---

元記事: https://bioengineer.org/research-report-unsupervised-learning-based-analysis-of-degradation-behavior-in-filler-containing-amine-cured-epoxy-formulations/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #07 MARVEL-AI｜A*STARが主導するAI材料開発プラットフォームの機能と実用化経路

公開日 2026年10月30日　A*STAR　シンガポール



## 概要

シンガポールのA*STARが、AIによる材料探索から実用化までを加速させる新イニシアチブ「MARVEL-AI」を立ち上げた。AIモデルによる候補特定と自動実験による検証をループさせることで、金属合金やポリマーなどの開発サイクルを劇的に短縮する。これにより、研究段階から産業実装までのギャップを埋め、半導体やエネルギー分野などの高付加価値な材料革新を目指す。

## 詳細

### 主要成果

MARVEL-AIは、AIによる材料探索、自動実験、および検証を統合し、実世界での産業応用へと繋げるプラットフォームである。特筆すべきは、AIと自動化の導入による実験スループットの劇的な向上だ。ポリマー開発においては、従来の8時間で最大3サンプルという逐次処理から、24時間連続稼働で最大25サンプルを並行処理する体制へ移行し、1日あたり75サンプルの製造を実現した。これは従来比で約25倍の出力向上に相当する。

### 技術・詳細

本プラットフォームは、予測、実験、検証を反復的に繰り返す「クローズドループ」を構築している。AIが有望な材料候補を特定して実験をガイドし、自動化された実験系で合成とテストを行い、得られたデータを再びAIにフィードバックして次の探索方向を決定する。具体的な成果として、以下の3分野が挙げられている。

- **金属合金：**自社開発の合成・特性評価技術により、1日あたり最大470種類のユニークな合金サンプルのスクリーニングが可能となった。これは従来手法の400倍以上のスループットであり、より広範な組成探索を実現している。
- **複合材料：**AIによる開発を通じて、水素輸送カプセルのフルスケールプロトタイプを製作。従来比で重量を50%削減し、耐久性を4倍に向上させた。
- **ポリマー：**前述の通り、自動化ワークフローにより日次出力を約25倍に拡大した。

対象とする材料クラスは、金属合金、ポリマーおよび有機物、セラミックス、複合材料の4種類である。

### 背景・業界の文脈

新材料の開発には、実験、特性評価、検証、プロセス開発、産業転換という多くのステップが必要であり、研究と下流開発の間でリソースの浪費や断絶が発生しやすい。MARVEL-AIは、A*STARの材料研究エンジニアリング研究所（IMRE）を拠点とし、シンガポールの高等教育機関（IHLs）や政府機関（METI、EnterpriseSG、EDB、NRF）の支援を受けて、RIE2030計画の下で推進されている。これにより、単なる「発見」に留まらず、製造プロセスの開発や産業実装までをシームレスに接続する体制を整えている。

## 今後の展望

今後は、航空宇宙、精密電子機器、特殊ポリマーなどの分野で企業や投資家との連携を強化し、現実世界の課題解決に取り組む。具体的には、過酷な環境向けの保護コーティングや、重要原材料への依存を減らしたエコフレンドリーなプリント可能合金の開発、AI駆動の膜材料研究などが計画されている。また、CuspAIの生成AIプラットフォームやGoogle Cloudのセキュアな研究環境との連携を通じ、次世代材料の設計と商用転換を加速させる方針である。

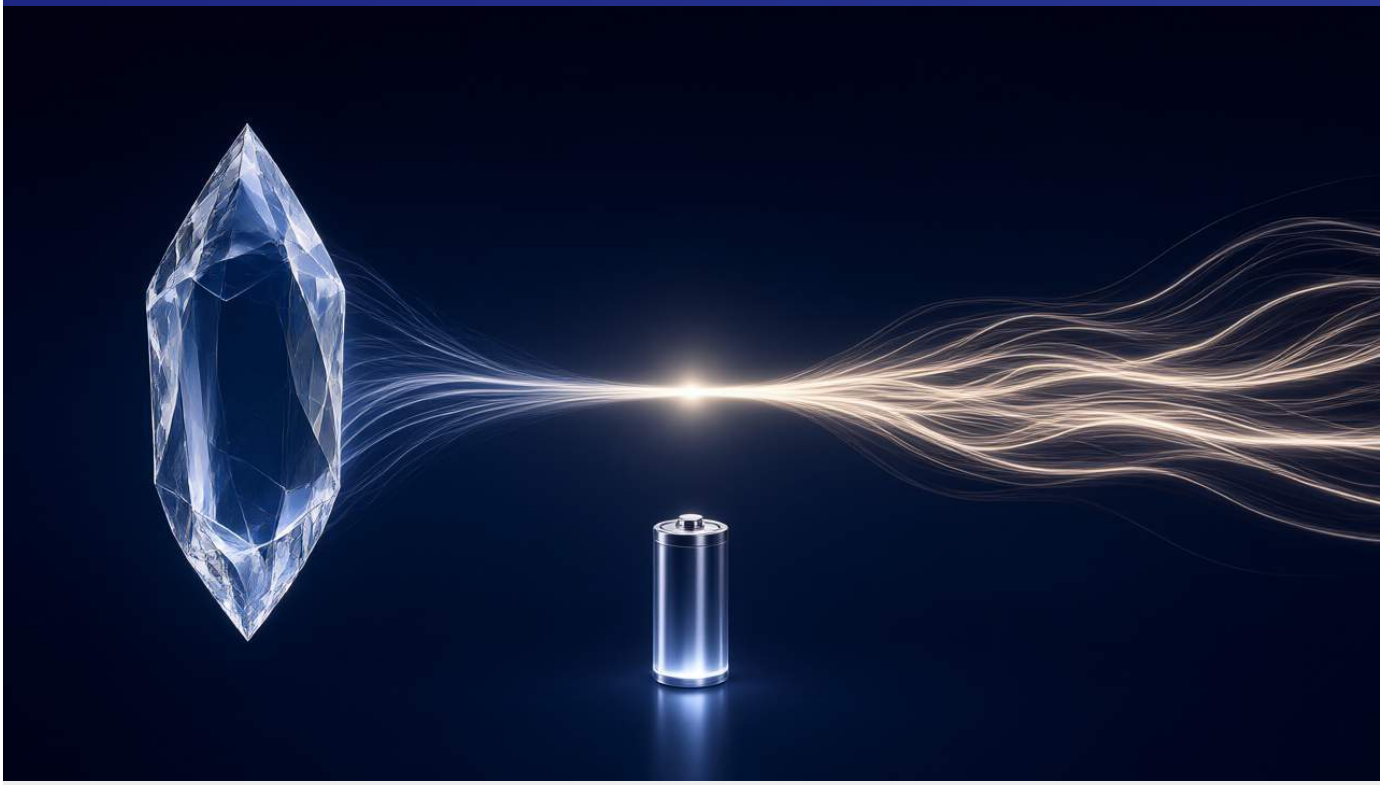
---

元記事: https://www.a-star.edu.sg/news/press-releases/marvel-ai-accelerating-advanced-materials-innovation-from-discovery-to-deployment

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #08 CLaCとは｜MITが開発した結晶構造とテキストを統合するAI、電池材料探索の効率化

公開日 2026年10月25日　Intelligent Living　アメリカ



## 概要

MITの研究チームが、3D結晶構造と自然言語を同時に学習するビジョン・ランゲージモデル「CLaC（Contrastive Language-Crystal model）」を開発しました。このモデルは、対照学習を用いて結晶の幾何学的構造と記述文を数学的に結びつけ、自然言語によるクエリから適切な材料候補を抽出することを可能にします。これにより、従来のテキストベースのAIが抱えていたデータの偏りや構造理解の欠如という課題を克服し、次世代電池などの材料探索を加速させます。

## 詳細

### 主要成果

MITの研究チームは、結晶構造の3Dデータと自然言語の記述を統合的に処理できるAIモデル「CLaC」を構築しました。このモデルを用いた検証では、全固体電池の電解質候補を自然言語で検索した際、他の独立した研究ですでに有望視されていた材料を正しくリストアップすることに成功しました。また、ゼロショットテスト（直接の学習を受けていないタスク）において、結晶構造と組成記述の照合精度は95.4%に達し、テキストのみのベースラインモデル（Gemma）の17.8%や、未学習モデルの13.5%を大幅に上回る性能を示しました。

### 技術・詳細

CLaCは、結晶グラフエンコーダー（3D原子配置を幾何学的関係を維持したまま読み取る）と、テキストエンコーダー（自然言語記述を読み取る）の2つのブランチで構成されています。対照学習（Contrastive Learning）を用いることで、正しいペアの構造とテキストを共有空間内で近づけ、不一致なペアを遠ざける学習を行っています。これにより、研究者は化学式や固定ラベルを使わず、特性に関する記述を入力するだけで、幾何学的に合致する結晶構造を抽出できるようになりました。

学習データには、オープンデータベース「Materials Project」の約126,000物質を使用しました。テキストデータは、約400万本の学術論文から抽出した段落と、計算された特性に基づき言語モデルが生成した「合成ナラティブ（Synthetic Narratives）」の2種類を組み合わせています。特に合成ナラティブは、論文が存在しない物質についても組成や構造、用途などを網羅的に記述できるため、文献ベースのデータよりも約300倍多様な結晶をカバーしています。

### 背景・業界の文脈

材料科学において、物質の特性や性能は原子の積み重なり方や結合などの「構造」に強く依存します。しかし、従来のAIツールは、結晶構造を3Dグラフとして扱うものと、論文などのテキストを扱う大規模言語モデル（LLM）に分断されていました。テキストのみのモデルでは、計算データベースにのみ存在する構造を認識できず、また既存の論文が少数の人気材料に偏っているため、AIの出力が既知の材料に偏るという「人気投票」のような状態に陥る課題がありました。

## 今後の展望

本研究は、新しい電池セルを構築したり材料を商用化したものではなく、材料データの検索手法におけるブレイクスルーを提示したものです。論文ベースで学習させた「CLaC-Paper」よりも、合成データを用いた「CLaC-Synthetic」の方が構造とテキストの整合性をより正確に学習できたことは、データの量だけでなく意味的な明快さが重要であることを示唆しています。構造と特性の結びつきをAIが理解することで、材料探索の効率が飛躍的に向上することが期待されます。

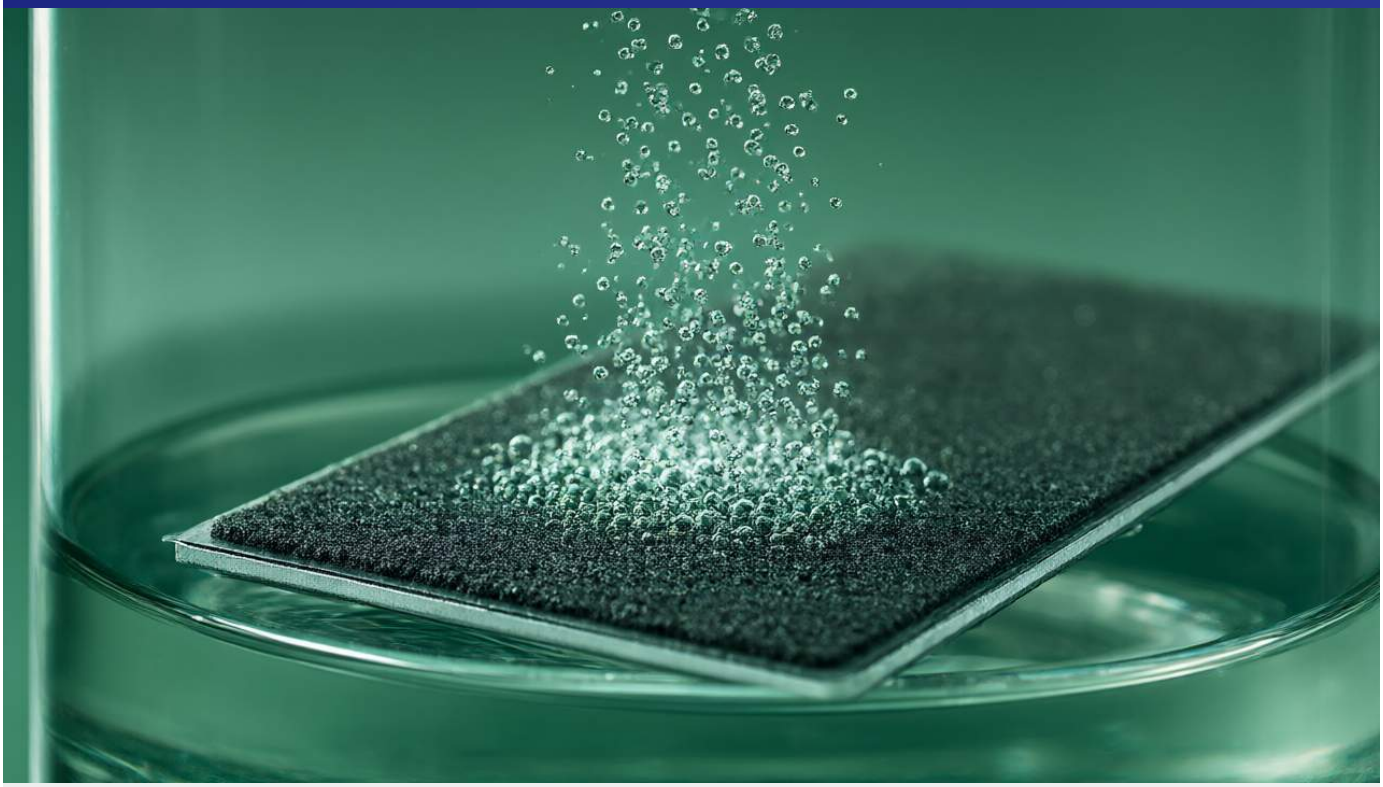
---

元記事: https://www.intelligentliving.co/mit-taught-ai-read-crystals-find-better/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #09 グラフニューラルネットワーク｜グリーン水素用電極触媒設計の効率化と2025年の最新動向

公開日 2026年10月30日　BIOENGINEER.ORG



## 概要

グラフニューラルネットワーク（GNN）が、グリーン水素製造に不可欠な電極触媒の設計プロセスを根本的に変えようとしています。2025年12月16日に発表されたレビュー論文によれば、GNNは原子構造から材料特性を直接学習することで、従来の試行錯誤や高コストな計算手法を代替します。これにより、水素発生反応（HER）や酸素発生反応（OER）における高性能かつ低コストな新材料の発見が加速します。

## 詳細

### 主要成果

グラフニューラルネットワーク（GNN）を用いることで、グリーン水素製造における水素発生反応（HER）および酸素発生反応（OER）のための高性能な電極触媒の探索が大幅に加速しています。具体的にHERでは、プラチナ（Pt）に匹敵する活性を持つ低コストな代替材料としてCu3PtやFeCuPt2などが特定されました。また、5.6 × 10^5個の吸着サイトをスクリーニングし、Fe2Sb4、Cu6Sb2、Cu6Sn2、Ni2Sb2といった安価な候補を特定した事例も報告されています。OERにおいては、商用触媒であるIrO2よりも理論的な過電圧が低い14種類の新規単原子触媒が同定されるなどの成果を上げています。

### 技術・詳細

従来の機械学習では、電気陰性度や配位数などの物理的構造を数値化する「特徴量エンジニアリング」という手動の工程が必要であり、これが最も時間のかかるボトルネックとなっていました。一方、GNNは分子や結晶を「原子を頂点、化学結合や空間的近接関係をエッジ」とするグラフとして表現します。メッセージパッシングという仕組みを通じて、原子が隣接原子から情報を収集・集約し、自身の状態表現を更新することで、トポロジーや幾何学的特徴を自動的に学習します。これにより、3次元構造を固定長のベクトルに圧縮して空間的な忠実度を損なう従来手法よりも、高い精度で特性を予測可能です。

GNNのアーキテクチャは主に以下の3つのパラダイムに分類されます。

- **不変モデル（Invariant models）：**DTNN、SchNet、DimeNet、GemNetなど。回転や平行移動で変化しないスカラー量（形成エネルギーやバンドギャップなど）の予測に適しています。
- **等変モデル（Equivariant models）：**EGNN、PaiNN、NequIP、MACEなど。幾何学的情報を保持し、出力が入力の幾何構造と同期して回転するため、力や分子動力学シミュレーションに不可欠です。
- **Transformerベースモデル：**Graphormer、TorchMD-Net、SE(3)-Transformer、Equiformerなど。幾何学的対称性を持つ自己注意機構を導入し、グローバルなコンテキストモデルと物理的精度の両立を図っています。

## 背景・業界の文脈

再生可能エネルギーを用いて水を電気分解して作るグリーン水素の普及には、カソードでの水素発生反応（HER）とアノードでの酸素発生反応（OER）を駆動する効率的な触媒が不可欠です。しかし、最適な材料の探索は長らく試行錯誤による遅く高コストなプロセスであり、密度汎関数理論（DFT）を用いた高スループットなコンピュータスクリーニングであっても、膨大な材料組み合わせの空間をすべて探索するにはコストがかかりすぎるという課題がありました。

## 今後の展望

GNNによるアプローチは、材料設計のワークフローを「手動の特徴量設計」から「構造からの直接学習」へと移行させています。特に、OC20などの大規模な公開データベースの活用が進むことで、さらなる精度向上と探索速度の向上が期待されます。これにより、貴金属などの高価な材料に依存しない、安価で高性能な電極触媒の迅速な開発が可能になると考えられています。

---

元記事: https://bioengineer.org/graph-neural-networks-reshape-electrocatalyst-design-for-green-hydrogen/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #10 オープンポリマーデータセット｜リポジトリによる再利用性の格差と品質課題（2020–2025）

公開日 2026年10月25日　BIOENGINEER.ORG



## 概要

2020年から2025年に公開された53,000件以上のポリマーデータセットを監査した結果、データの再利用性は科学的内容よりも「どのリポジトリに保存したか」に強く依存することが判明しました。リポジトリの選択が再利用スコアの分散の37.9%を説明しており、保存先によって品質に極めて大きな差が生じています。ポリマーインフォマティクスや機械学習モデルの精度は、こうしたオープンデータの再利用性に依存するため、現状の「量だけが増え品質が停滞している」状況は深刻な課題となります。

## 詳細

### 主要成果

2020年から2025年にかけて、主要な汎用研究データリポジトリ8件に蓄積された53,038件のポリマーデータセットを対象とした監査の結果、データの再利用性を決定づける最大の要因は、研究者が選択したリポジトリであるという衝撃的な事実が明らかになりました。統計的に、リポジトリの正体が再利用スコア分散の37.9%を説明しており、これは公開年やサブドメイン、サステナビリティに関する枠組みによる影響よりも1桁大きい影響力を持っています。

### 技術・詳細

本監査では、74個のポリマーおよびサステナビリティ関連キーワードを用いてデータを収集し、FAIR原則（検索可能性、アクセス可能性、相互運用性、再利用可能性）に基づいた11のバイナリ基準でスコアリングを行いました。その結果、メタデータの完備性に深刻な断絶があることが分かりました。

- **充足している項目（50%以上）：** DOI（93.2%）、詳細な抄録（87.4%）、キーワード（86.1%）、ライセンス（82.9%）などの書誌情報。
- **不足している項目（50%未満）：** 測定方法の記述（41.3%）、合成方法の記述（32.2%）、変数のリスト（21.5%）、オープン形式のファイル（10.3%）、識別可能な単位（8.3%）、README（4.3%）、コードへのリンク（1.2%）。

リポジトリ別の格差は顕著で、Dryad、Zenodo、Figshareが高スコア層（中央値5以上）に位置する一方、OSFは中央値1まで低下しました。特にDryadとOSFの比較では、ランダムに抽出したDryadのレコードがOSFのレコードを上回る確率は98.2%に達しています。

### 背景・業界の文脈

ポリマーインフォマティクスや機械学習モデルの訓練には、オープンに公開されたデータセットの集積が不可欠です。しかし、ポリマー分野にはコミュニティによるデータ寄託を受け付ける専門的なプラットフォームが不足しています。Polymer GenomeやOpenPolyなどは読み取り専用であり、NOMADやMaterials Projectなどの材料科学インフラに含まれるポリマー関連コンテンツは0.1%未満に留まっています。そのため、研究者は事実上、あらゆる分野が利用する汎用リポジトリにデータを保存せざるを得ない状況にあります。

## 今後の展望

データ公開の量は激増しており、年間の寄託数は2020年の5,905件から2025年には14,374件へと143%増加しました。しかし、平均再利用スコアは同期間に3.84から4.14へと7.7%しか上昇していません。つまり、エコシステムは「拡大」しているものの「深化」しておらず、量的な増加に対して品質の向上が追いついていないため、データ量が増えるほどノイズが増加するリスクを抱えています。

---

元記事: https://bioengineer.org/reuse-quality-of-open-polymer-datasets-a-reproducible-cross-repository-audit-2020-2025/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #11 OrgAIcat｜不完全な文献データから高選択的な有機触媒を予測するMLモデルの性能

公開日 2026年10月27日　BIOENGINEER.ORG　中国



## 概要

清華大学の研究チームが、過去の文献データを用いて非対称有機触媒反応の選択性を予測する機械学習フレームワーク「OrgAIcat」を開発しました。2000年から2020年までの文献から抽出した13,360件のアルドール反応と9,194件のマイケル付加反応のデータセット（iSynth）を基盤としています。これにより、膨大な計算コストを要する量子化学計算なしで、高選択的な触媒の迅速な探索が可能になります。

## 詳細

### 主要成果

清華大学のLuo Sanzhong教授らによる研究チームは、非対称有機触媒反応における選択性を予測する機械学習フレームワーク「OrgAIcat」を開発し、CCS Chemistry誌で発表しました。このモデルは、アルドール反応において$R^2$ = 0.716、マイケル付加反応において$R^2$ = 0.774という予測精度を達成しています。また、選択性の指標である鏡像体過剰率（ee）における平均絶対誤差は、それぞれ約7.30%および6.78%に抑えられています。さらに、反応を「低・中・良・優」の4段階で分類するモデルでは、AUC値で0.908および0.922という高い性能を示しました。

### 技術・詳細

本研究の基盤となるのは、2000年から2020年までに発表された844報の論文から抽出された「iSynth」データセットです。研究チームは、文献上のee値を自由エネルギー差（ΔΔG）に変換し、これを回帰モデルの予測ターゲットとして採用しました。モデルの核心となるのは、独自に開発した反応レベル記述子「R-SPOC」です。R-SPOCは以下の3つの情報を統合して構成されています。

- 触媒の構造および物理化学的特性
- 反応物と生成物の記述子の差として捉えた構造変化
- 溶媒、添加剤、温度などの反応条件

R-SPOCの最大の特徴は、明示的な遷移状態の探索や量子化学計算を必要としない点にあり、これにより数万件の文献データに対して低コストで適用することが可能です。検証実験では、触媒構造が最も予測に寄与し、反応変換と条件記述子がそれぞれ独立して寄与することが判明しました。

### 背景・業界の文脈

非対称有機触媒は、キラル医薬品や機能性材料、精密化学品の合成において極めて重要な手法です。しかし、過去の化学文献データは、ジャーナルが好む「高選択的な成功例」に偏っており、化学空間の極めて一部しかカバーしていないという課題がありました。実際、アルドール反応の潜在的な組み合わせは約10の16乗、マイケル付加は約10の17乗に達しますが、文献に記録されているのは約10の4乗に過ぎません。OrgAIcatは、このような選択バイアスの強い不完全なデータであっても、構造と選択性の関係を学習させることで実用的な予測ツールに変換できることを証明しました。

## 今後の展望

研究チームは、モデルの汎用性を検証するため、トレーニングデータに含まれない2021年から2024年の新論文を用いた外部テストや、未報告の新規キラル一次アミン触媒24種類を用いた実験的な検証を行いました。その結果、触媒構造の変化による選択性の違いをピアソン相関係数0.736で追跡できることを確認しています。これにより、実験者が膨大な試行錯誤を行うことなく、直感的に候補反応をランキングし、高選択的な触媒へ迅速に到達するルートが提供されることが期待されます。

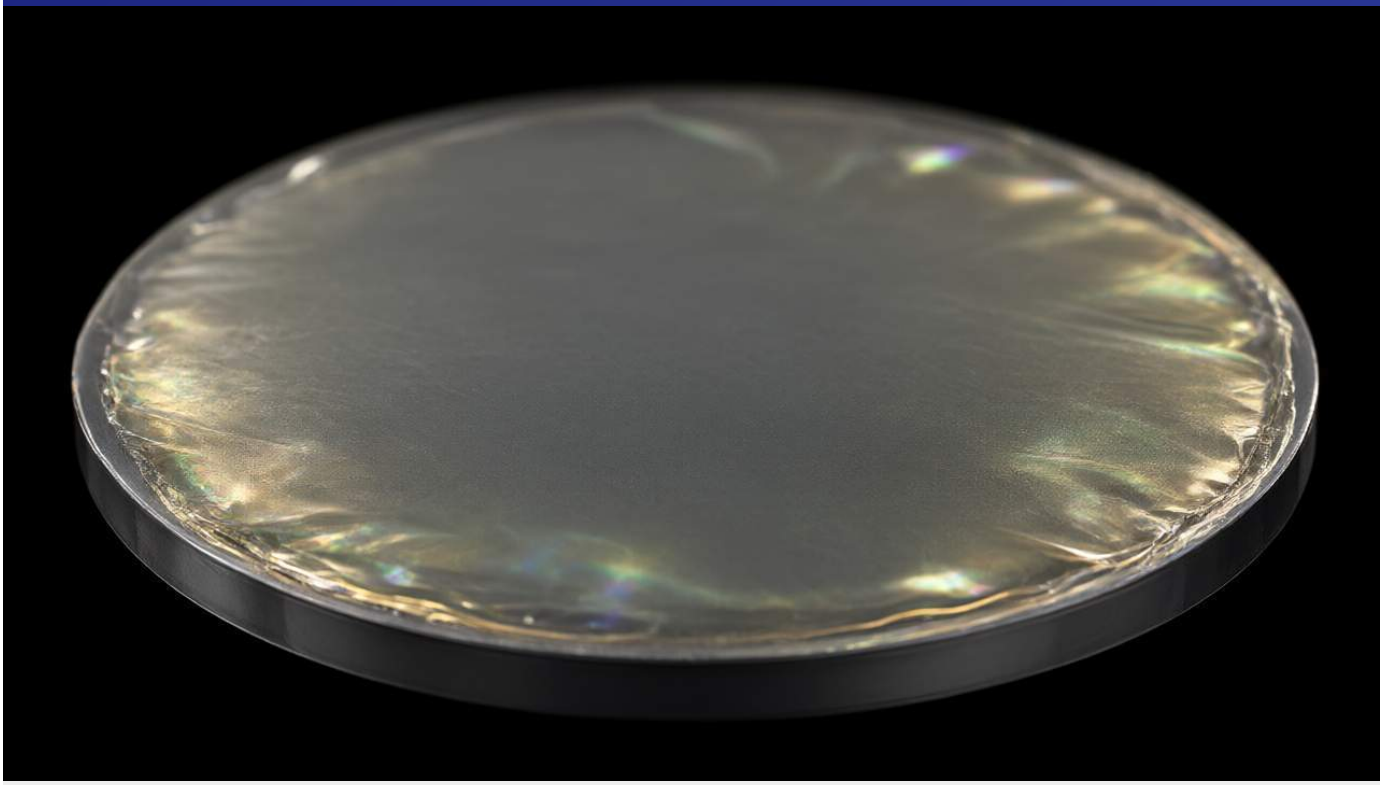
---

元記事: https://bioengineer.org/machine-learning-model-turns-decades-of-literature-data-into-a-fast-route-to-highly-selective-organocatalysis/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #12 ナトリウム電池｜SEI形成を解明する機械学習ポテンシャルqNEPの性能と手法

公開日 2026年10月25日　BIOENGINEER.ORG



## 概要

ナトリウム電池の電極表面に形成される保護膜（SEI）の生成過程を、ナノ秒スケールでシミュレーション可能にする新手法「qNEP」が開発されました。電荷を考慮したニューロエボリューションポテンシャルを用いることで、従来の機械学習ポテンシャルでは困難だった100ナノ秒までの安定的なシミュレーションを実現しています。これにより、直接観察が困難だったSEIの緻密化や相分離といった成熟過程の解析が可能になります。

## 詳細

### 主要成果

研究チームは、ナトリウム金属電極と有機電解質の界面における保護膜「固体電解質界面（SEI）」の形成プロセスを解明するため、電荷を考慮したニューロエボリューションポテンシャル（qNEP）を導入しました。この手法により、従来の機械学習ポテンシャルが到達していた約100ピコ秒という極めて短い時間制限を突破し、約1,000原子のシステムにおいて100ナノ秒という、2〜3桁長いシミュレーション時間を達成しました。また、約27,000原子の大規模システムにおいても、数十ナノ秒スケールのシミュレーションが可能であることが示されました。

### 技術・詳細

qNEPの構築には、「Interface Reactor」サンプリング戦略に基づいた3つの柱が採用されています。第一に、高温での第一原理分子動力学（ab initio MD）サンプリングを行い、記述子空間のカバー範囲を広げて局所的な原子環境のエルゴード性を向上させました。第二に、アクティブラーニング中の重要なノードに短時間の第一原理シミュレーションを注入し、物理的に不適切なエネルギー経路への逸脱を防いでいます。第三に、フッ化ナトリウムや酸化ナトリウムなどの無機生成物と、有機分解中間体を系統的にトレーニングセットに組み込みました。

モデルの学習はGPUMDパッケージを用い、4基のRTX 4090 GPUで約2日間で完了しました。学習パラメータ数は6元素に対して22,633個と少なく、データ効率の高さが示されています。精度面では、トレーニングセットにおけるエネルギーの平均二乗誤差（RMSE）が10.50 meV/atom、力の誤差が251.89 meV/Åとなりました。これは、広く利用されているReaxFFの力場が同じセットで示した誤差（9,680 meV/Å）よりも約38倍精度が高く、計算速度はReaxFFより約1桁、第一原理MDより約6桁高速です。

## 背景・業界の文脈

ナトリウム電池は、資源が豊富で安価であり、既存のリチウムイオン電池の製造インフラを転用できるため、グリッドスケールのエネルギー貯蔵技術として期待されています。しかし、充電初期に電解質がアノード表面で分解して形成されるSEIというナノメートル規模の薄膜が、電池の効率や容量維持を左右します。このSEIは電子を遮断しつつナトリウムイオンのみを透過させる必要がありますが、その形成過程は極めて高速で反応性が高く、X線光電子分光法や透過電子顕微鏡などの従来の実験手法（ex situやアンサンブル平均の snapshot）では直接観察することが困難でした。

## 今後の展望

本モデルは、標準的な機械学習ポテンシャルが欠いていた「学習可能な原子電荷」を組み込んでいるため、異なる化学状態の原子を区別し、電解質分解時の電荷移動やナトリウムイオンの移動を追跡できます。研究チームはこのツールを用いて、3種類のカーボネート（エチレンカーボネート、ジメチルカーボネート、プロピレンカーボネート）と2種類のエーテル（ジメトキシエタン、ジグライム）の電解質をシミュレーションし、電解質のクラスによって分解経路が根本的に異なることを明らかにしました。これにより、より高性能なナトリウム電池のための界面設計への道が開かれます。

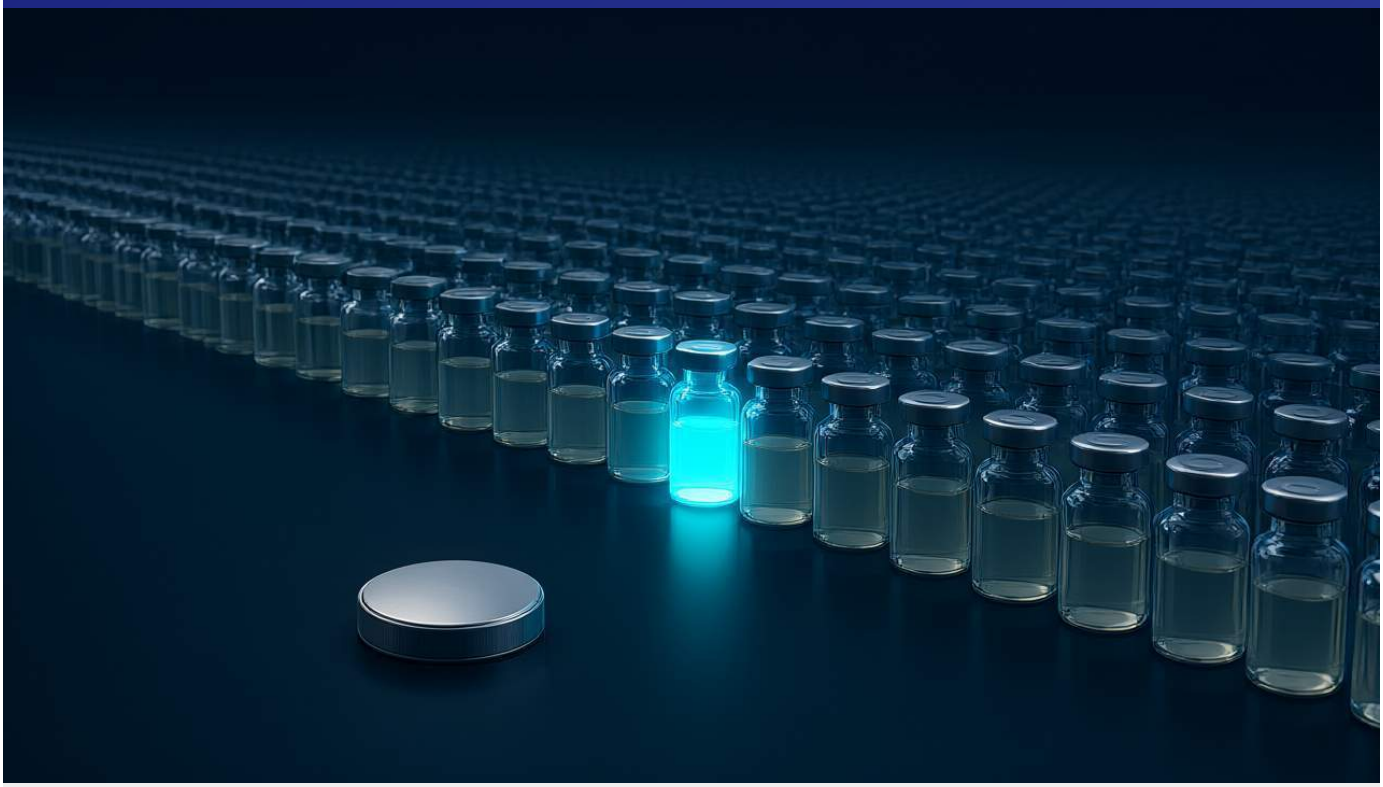
---

元記事: https://bioengineer.org/machine-learning-simulations-reveal-how-sodium-batteries-form-their-protective-interface/

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

# #13 リチウム金属電池｜AIで132万個の分子を分析し非フッ素系希釈剤368種を特定

公開日 2026年10月29日　AIタイムス　韓国



## 概要

ソウル大学の研究チームが、AIを用いてリチウム金属電池用の次世代電解質素材を探索し、約132万個の分子から有望な候補368種を特定した。物理・化学的指標を組み合わせた機械学習アルゴリズムにより、従来の実験ベースの探索を大幅に効率化し、選別した素材のうち3種類で安定的な充放電性能を確認している。これにより、環境負荷が高くコストも嵩むフッ素系素材に代わる非フッ素系希釈剤の開発が加速すると期待される。

## 詳細

### 主要成果

ソウル大学自然科学大学化学部の林鐘佑（イム・ジョンウ）教授研究チームは、AI（人工知能）を用いてリチウム金属電池の性能と寿命を左右する電解質素材を探索し、約132万個の分子から有望な候補368種を抽出する技術を開発した。研究チームは、これら選別された素材のうち3種類を実際の電池に適用し、安定的な充放電性能を実証した。一方で、選別基準を満たさなかった比較物質を用いた電池では、性能が急速に低下することが確認された。

### 技術・詳細

本研究では、分子の物理・化学的特性と機械学習を組み合わせたAIアルゴリズムを開発し、リチウム金属電池用の「非フッ素系電解質希釈剤」の探索を行った。AIが単なる統計的パターンを学習するのではなく、分子間の相互作用を説明する化学的基準を活用している点が特徴である。具体的には、以下の2つの物理・化学的指標を指標として活用した。

- **三フッ化ホウ素親和度（$BF_3$ Affinity）：** 分子の電子対供与特性を示し、分子がリチウムイオンに直接結合しようとする傾向を評価する。
- **分子極性指数（Molecular Polarity Index, MPI）：** 分子表面の電荷分布と静電的相互作用を示し、希釈剤が他の電解液成分と適切に相互作用できるかを判断する。

研究チームは、米国国立生物工学情報センター（NCBI）が運営する化学物質データベース「PubChem」にこのアルゴリズムを適用した。その結果、全探索対象の約0.028%にあたる368種の有望候補を特定し、実験対象を大幅に圧縮することに成功した。

### 背景・業界の文脈

リチウム金属電池は、従来のリチウムイオン電池よりも高いエネルギー密度を実現できるため、電気自動車（EV）の航続距離拡大や軽量化を実現する次世代技術とされる。しかし、リチウム金属は化学的反応性が高く、電解液との副反応によって寿命と安定性が低下するという課題がある。

この解決策として、リチウム塩の濃度を高めた「高濃度電解液」の研究が進んでいたが、粘度の上昇とイオン移動の鈍化が問題となった。これを補完するのが「局所高濃度電解液（LHCE)」であり、希釈剤を添加して粘度を下げつつ、リチウムイオン周辺の結合構造を維持させる手法である。従来はフッ素系化合物が広く利用されていたが、環境残留性の懸念や合成・製造コストの高騰から、非フッ素系の代替素材の開発が強く求められていた。

### 今後の展望

AIを用いて有望な候補を事前に絞り込むことで、素材開発における試行錯誤の時間とコストを大幅に削減できる。今後は、特定された368種の候補すべてについて実験的な検証を行うとともに、商用化に向けて長期寿命の確認、多様な動作条件下での安定性、および量産可能性についての追加評価が必要となる。本研究の結果は、国際学術誌「Journal of the American Chemical Society (JACS)」に掲載された。

---

元記事: https://www.aitimes.kr/news/articleView.html?idxno=42475

収集日: 2026年10月31日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)