

先進事例 マテリアルズ・インフォマティクス

マテリアルズ・インフォマティクス (MI) で、
材料開発生産性の劇的な向上へ

JSRのマテリアルズ・インフォマティクス (MI) 開発スキーム



JSRの主力製品群は多種の原料を混ぜる複合材料であることが多く、調合の妙によって機能を発現させています。このような複合材料は、組合せが無数にあり、その開発に多大な時間と労力を払ってきました。データ科学と従来の化学を組合せたMI技術を材料開発チームが日常的に使うツールとして実装することにより、材料開発の生産性を劇的に向上させることを目指して、MIツールを内製化して継続的に改善しています。MIは発展が著しい分野であり、アカデミアで開発された最新アルゴリズムがすぐに材料開発の現場に投入できることも特徴です。そのため、統計数理研究所や奈良先端科学技術大学院大学などの外部機関との協業も多く進め、最新技術の取り込みにも注力しています。

MIツールが全員にとって当たり前のツールになり、そのツールが常に最新アルゴリズムを取り込みながら進化し続けるような状況を作り出したいと考えています。まだ誰も見たことがないツールを創りあげていくという面白い挑戦に、メンバーの士気も上がっています。

JSR株式会社 リサーチフェロー RDテクノロジー・デジタル変革センター
マテリアルズ・インフォマティクス推進室 次長

大西 裕也



先進事例 オープンイノベーション

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻との共同研究により、
次世代メモリ向けの高性能材料を予測

予測したらせん構造のタングステン



高密度演算やAI、通信などの技術進化に伴う情報処理量の爆増と並行して、半導体の消費電力削減が深刻な社会課題となっています。現在、エネルギーロスを伴わないスピンの発生という物理現象が注目され、次世代半導体に活用する数多くの研究が進められています。

JSR・東京大学協創拠点CURIEでは、東京大学大学院理学系研究科の複数の研究室との共同研究により、進化的アルゴリズムと呼ばれる計算手法を活用してスピンの発生する物質の探索を進めています。その結果、タングステン結晶がらせん状に歪んだ構造で、巨大スピン流が生成することの予測に成功しました。本予測手法は、巨大スピン流を発生する材料探索の新たな指針となり、社会課題を解決する新たな機能性デバイスの早期実現につながると期待しています。

今回の研究成果は、東京大学大学院理学系研究科の複数の研究室との共同研究が密に実施可能な、JSR・東京大学協創拠点CURIEのメリットを活かしたアウトプットの一例です。今後もCURIEをハブに、理論計算や固体物理、材料の技術と知見を両者で持ち寄ることで、Material Innovationを積み重ね、社会貢献を行ってまいります。

JSR株式会社 RDテクノロジー・デジタル変革センター JSR・東京大学協創拠点CURIE

久保 光太郎

