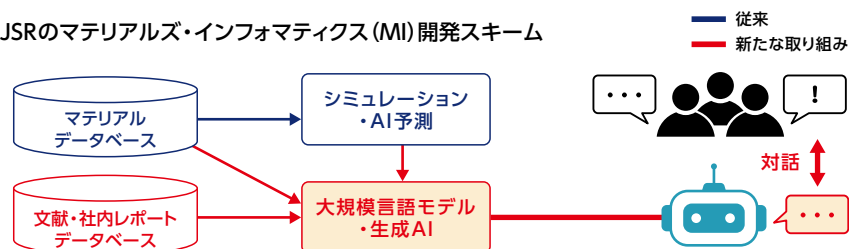


先進事例

マテリアルズ・インフォマティクス

シミュレーションや機械学習を自由自在に使いこなしながら
生成AIによる新しい時代の材料開発へ

JSRのマテリアルズ・インフォマティクス (MI) 開発スキーム



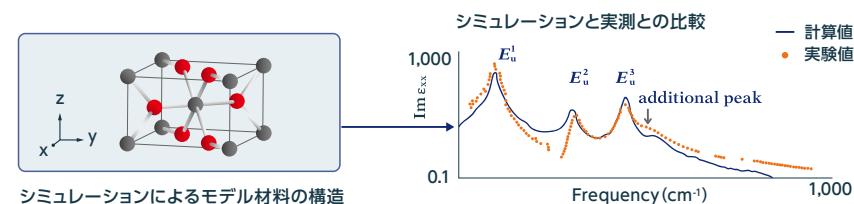
JSRの主力製品は目に見えないミクロな世界での複雑な現象によりその性能を発揮しています。その様子を直接観察することはできないので、効率的に開発を行うためにはシミュレーションや機械学習による事前の性能予測に基づく設計が不可欠です。JSRでは社内外のさまざまな材料をデータベース化し、シミュレーションや機械学習による性能予測を日々の材料開発に組み込んでいます。さらに近年の大規模言語モデル、生成AIの飛躍的な進歩に伴って、世界中のありとあらゆる論文や特許を理解したAIと人間の化学者が対話しながら材料開発を行う時代を見据えた、新たな取り組みも開始しています。これらの先端的なAI技術は自社で全てを賄うのではなくIBM (International Business Machines)をはじめとしたパートナー企業とともに技術開発を行っています。

近年のAI技術の進歩は信じられないほど速く、研究者の間でも不可能だと思われていたことが一夜にして可能になることが珍しくありません。悲観的な先入観を持つことなく、好奇心と柔軟性を持って新しい材料開発の姿を作っていきたいと考えています。

JSR株式会社 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
 刈脇 純太

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、
6G向けの低誘電損失材料の性能を予測ルチル型の二酸化チタン (rutile TiO_2)

次世代の高速移動通信システムとして注目を集めている6Gは、現在主流である4Gの約100倍に相当する100Gbpsクラスの高速度大容量通信をはじめ、超低遅延/超多接続/超低消費電力/低コストなどさまざまな可能性が期待されています。しかし6Gで用いられる高周波信号は、回路内を流れるときに減衰しやすい問題があります。したがって、減衰抑制のための材料開発が強く求められています。

JSR・東京大学協創拠点CURIEでは東京大学との共同研究により、キーマテリアルの1つである低誘電絶縁材料の開発に寄与するテラヘルツ誘電特性の高精度シミュレーション技術の開発に成功しました。本シミュレーションは、低誘電絶縁材料探索の新たな指針となり、6G高速移動通信の早期実現につながると期待しています。

本手法は結晶性材料の誘電関数の計算に限定されますが、結晶性高分子や無機結晶などの幅広い材料に適用でき、低誘電特性の材料開発への活用が期待されます。今後もさらなる高精度化や材料の適用範囲拡大を目指し、東京大学と連携して新しいシミュレーション技術の研究開発を進めていきます。

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
 山崎 民雄