

圧倒的な計算スピードで、原子レベルの革新を 新材料発見を加速する AI シミュレーション



Matlantis は、AI と材料科学を融合した原子スケールのシミュレーションプラットフォームです。

従来の常識を覆す高精度かつ圧倒的な計算速度で、反応・拡散・界面挙動といった複雑な現象を実験に先立って予測できます。

材料の構造・組成・温度条件などを変化させた際に、「何が起きるか」「どこで反応が進むか」といった実験のヒントとなる洞察を即座に提供。

研究の仮説立案・条件選定・結果解釈を加速させ、実験と計算の連携による新たな開発スタイルを実現します。



Matlantis の 4 つの特徴



圧倒的な計算速度

大規模な系や長時間の現象も、従来では考えられない速さでシミュレーション。試行錯誤のサイクルを劇的に加速し、新たな発見を短期間で導きます。



多種多様な材料に対応する真の汎用性

自然界に存在する全元素に対応。バルク結晶だけでなく表面や界面、アモルファスなど、多様な構造が計算可能。未知の材料探索を力強く支援します。



学習済みモデルで すぐに高精度予測

厳選された膨大なデータで学習済みのモデルを標準搭載。専門知識や追加の学習なしに、すぐに高精度な物性予測を開始できます。



クラウドで手間なく 開始・運用

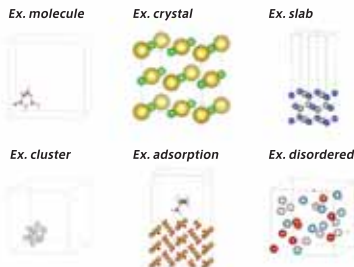
Web からアクセスするだけですぐに利用開始。複雑な環境構築の他、ソフトやハードのメンテナンスは一切不要。研究開発に専念できる環境を提供します。

高い汎用性と精度を備えた、独自の AI モデルにより計算を大幅に高速化

Matlantis は世界最先端の AI 技術を使い、物性計算の基礎となるエネルギー・力を直接学習することで、原子の挙動を再現しています。これによって汎用性を維持したまま計算コストを大幅に削減し、現実に近い複雑な系を、大量かつ高速に計算することができます。

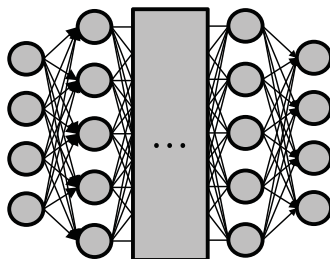
教師データ (数千万)

分子・結晶等様々な構造の DFT 計算を実施
Preferred Networks社の強力計算設備を活用



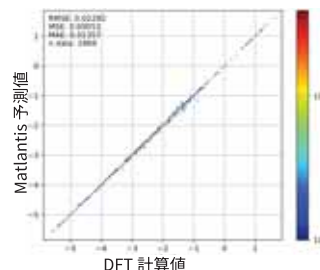
Graph Neural Network

量子化学知見を取り込んだ独自の
AI モデル構築



学習・出力

教師データを再現できるまで
モデルの学習を実施

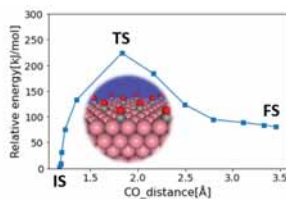


様々な物性を計算可能

有機分子	振動モード・振動数
弾性定数	弾性定数 ヤング率 体積弾性率 ポアソン
フォノン分散と固体の熱物性	フォノン分散 ヘルムホルツエネルギー 比熱
動力学計算	粘性係数 拡散係数 比熱 熱伝導率
反応経路解析	活性化エネルギー

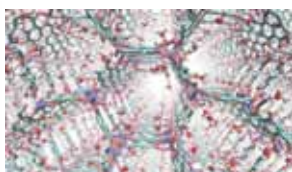
Matlantis に標準搭載された計算モジュールを用いることで、様々な物性値の計算が高速に行えます。Matlantis はその高速性により、実験前に物性値を計算できるため、計算結果から実験の指針を得ることや、事前のスクリーニングとして活用できます。

計算事例



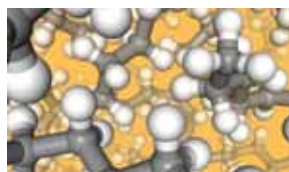
触媒

コバルト触媒における CO 分子
解離反応の活性化エネルギー



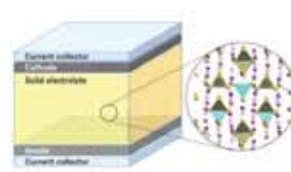
吸着剤

MOF-74Ni における H₂O 分子の
吸着と拡散挙動



潤滑油

逆非平衡分子動力学シミュレーションによる液体粘度
の予測



電池

硫化物固体電解質中の Li
拡散

世界で**100**以上の企業・研究機関に選ばれています

AGC

AkzoNobel

ENEOS

HYUNDAI

RESONAC

TOYOTA BATTERY

Matlantis の機能 / プラン詳細など詳しく知りたい方は
こちらからお気軽にお問い合わせください。

Matlantis

検索

Web

matlantis.com/ja/

