

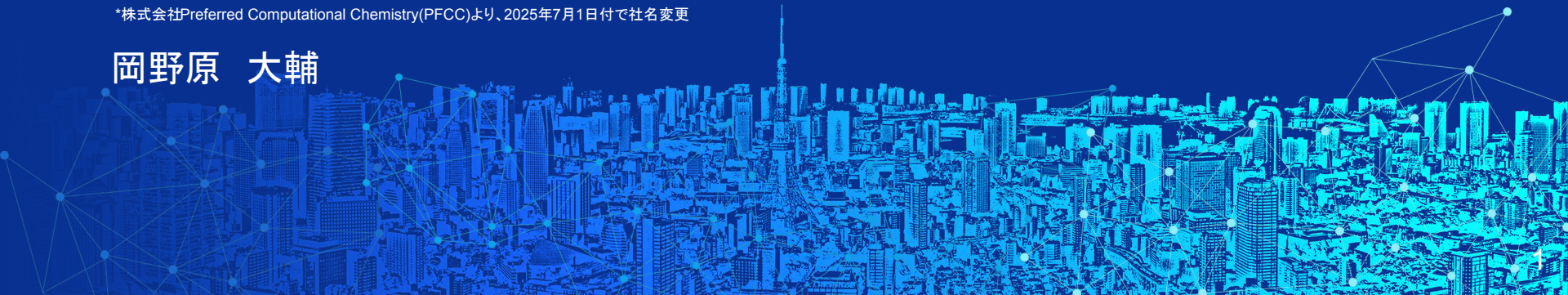
2025/6/30

Matlantis：材料開発を加速する AI原子レベルシミュレーション

Preferred Networks 代表取締役 最高技術責任者
Matlantis株式会社* 代表取締役社長

*株式会社Preferred Computational Chemistry(PFCC)より、2025年7月1日付で社名変更

岡野原 大輔



Matlantis : 材料開発のための AI原子レベル シミュレーション

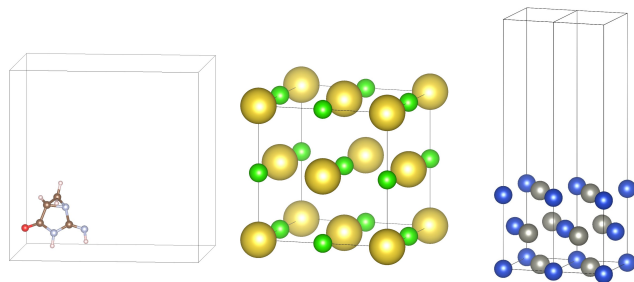


2021年6月1日に設立

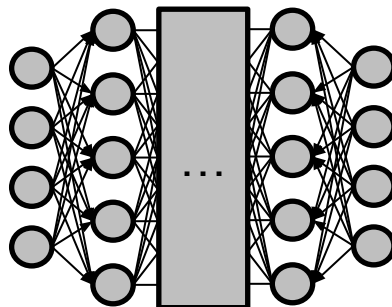
3社のジョイント・ベンチャー:



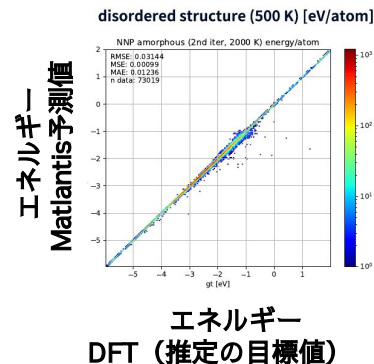
材料候補
研究者が調べたい新材料



独自AIモデル



**候補材料の特性を
高精度に予測**



材料探索を高速化する汎用原子レベルシミュレーター



MATLANTIS

数字で見るMatlantis™

シミュレーション速度



20M 倍

3,000原子で従来のDFT計算と比較した場合

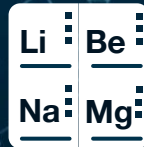
最大対応原子数



44k 原子

Professional Planで
Pt bulkの場合

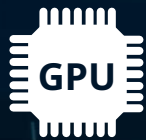
対応元素数



96 元素

自然界に存在するすべての
元素を含む

1 GPU換算の計算量



2,264 年

5,900万以上の構造からなる訓練
データの生成にかかった計算量を
1台のGPUで処理した場合の年数

クライアント数



100+

企業および学術機関
などの団体

累計原子数



30T 原子

2023年1月～2024年6月に
シミュレーションした原子の総数

Matlantis™は持続可能な世界を実現する革新的な材料の創出に貢献します。



触媒



電池



半導体



合金



潤滑剤



セラミック



吸着剤



分離膜

PFP v7 2024年12月現在

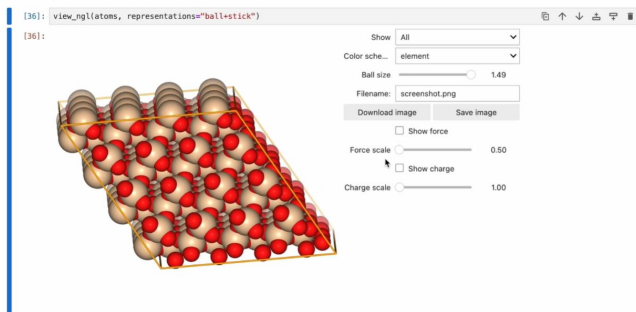
Matlantisのニューラルネットワークポテンシャル「PFP」は、PFNのスーパーコンピュータおよび
国立研究開発法人産業技術総合研究所の AI橋渡しクラウド (ABCI) を用いて開発されました。

© Preferred Computational Chemistry, Inc.

Matlantisでのシミュレーションの様子

モデリングを行い→計算を実行

→原子の動きが可視化され、新材料の物性も予測できます



材料のモデリングを行い

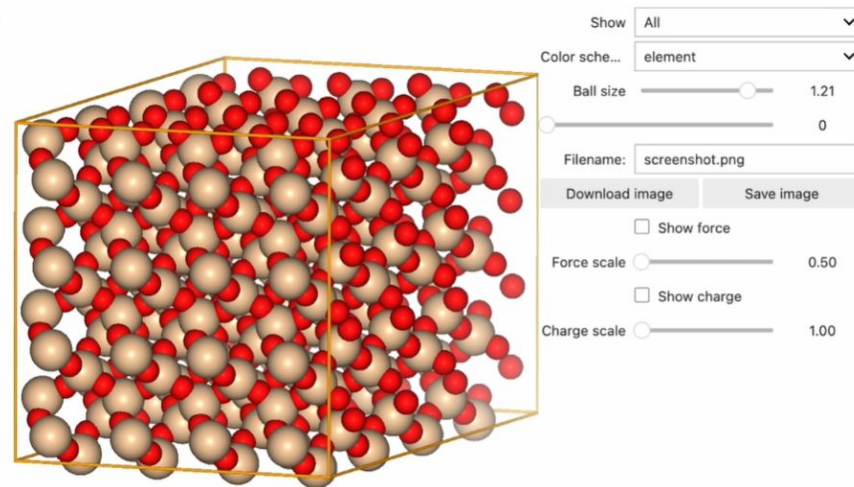
```
Dyn step: 26, energy: -3673.649
Dyn step: 27, energy: -3673.661
Dyn step: 28, energy: -3673.678
Dyn step: 29, energy: -3673.675
Dyn step: 30, energy: -3673.675
Dyn step: 31, energy: -3673.678
Dyn step: 32, energy: -3673.668
Dyn step: 33, energy: -3673.648
Dyn step: 34, energy: -3673.636
Dyn step: 35, energy: -3673.624
Dyn step: 36, energy: -3673.616
Dyn step: 37, energy: -3673.612
Dyn step: 38, energy: -3673.615
Dyn step: 39, energy: -3673.622
Dyn step: 40, energy: -3673.634
Dyn step: 41, energy: -3673.649
Dyn step: 42, energy: -3673.664
Dyn step: 43, energy: -3673.677
Dyn step: 44, energy: -3673.687
Dyn step: 45, energy: -3673.691

[ ]: from pfcc.extras.visualize.view import view_ngl
from pfcc.extras.visualize.povray import traj_to_gif, traj_to_gpg

```

計算を実行

[38]:



原子の動きが可視化できます
新材料の物性も予測できます

Matlantisが材料開発シミュレーションの世界を変革

Matlantis登場前

- 1回の計算時間が長いので、厳選した仮説について計算を回す
- 計算ミスがあると数週間の手戻り

- 計算依頼は数週間-数ヶ月単位
- アカデミア共研は年単位

- (オンプレの場合特に)
● 計算機のメンテナンスが大変



Matlantis登場後

- 1回の計算時間が短いのでちょっとした思いつきをすぐ試せる
- 速いフィードバックで進められる



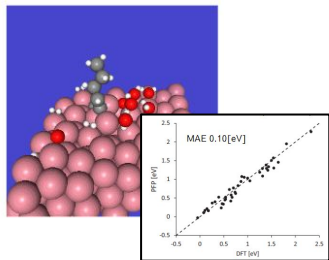
- 実験科学者と一緒に、その場でシミュレーションを実施しながら双方向に議論



- 計算機のメンテナンス不要
- 本質的な研究活動に使う時間を増やす

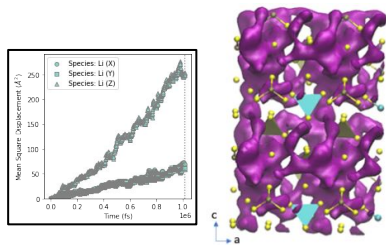
代表的な適用分野

触媒



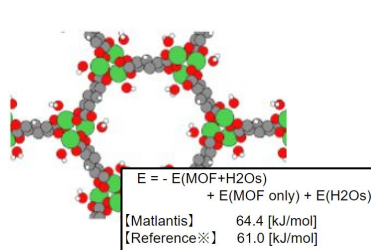
Large scale screening for optimal dopant species

バッテリー



Li diffusion in solid electrolyte

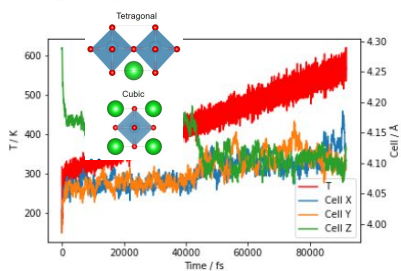
吸着剤



Adsorption energy in MOF

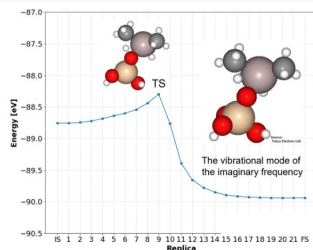
次の時代を支える
多くの新材料開発に
Matlantisは使われて
いる

セラミックス



Phase transition in BaTiO₃

半導体



Reaction analysis of trimethylaluminum

高分子

磁性体

金属

その他の
多くの分野
で利用

グローバル展開のこれまで

2021年 日本でのサービス開始

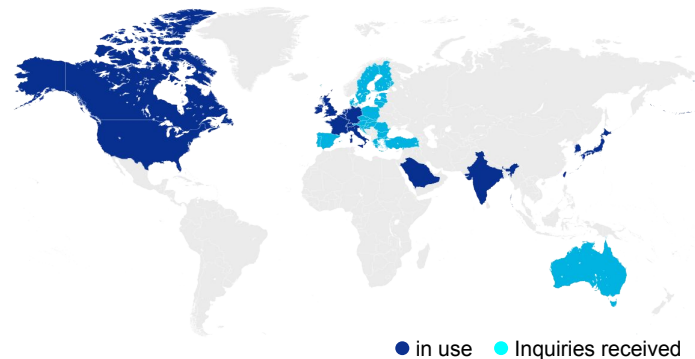
- リリース直後から海外のアカデミックユーザー(大学、研究機関)は複数存在
- 研究者同士での口コミによる広がりが主体
 - 日本で研究していた研究者が、現地に戻り、現地で広める例も多い
- アカデミック主体の製品ということもあり、現地のアカデミックから広げる戦略

2023年 米国および欧州に現地サーバーを設置(有償提供開始)

- 海外企業が安心して活用できる体制を整え、日本より営業、サービスを開始
- 企業企業との商談・PoCなど進めるも、
現地法人がないと、実際に法人契約に到達するハードルがより高いと痛感
▶海外展開活動を本格化

2024年 MIT Ju Li教授 テクニカルアドバイザー就任 三菱商事株式会社と業務資本提携 米国拠点を設置 (マサチューセッツ州、ケンブリッジ市)

2025年 現地社員複数名を採用 経済産業省グローバルサウス未来志向型共創等事業採択



2024.06.01 5000

米MITのJu Li教授がPFCCのテクニカルアドバイザーに就任

株式会社Preferred Computational Chemistry (代表取締役社長：坂野雅大樹、以下、PFCC)において、米マサチューセッツ工科大学 (MIT) のJu Li (ジュ・リー) 教授が、テクニカルアドバイザーに就任しました。



海外法人ユーザー: 韓ヒュンダイ (2024年)、蘭アクゾノーベル (塗料世界大手 2025年) など

海外アカデミックでは20研究室・団体

グローバル展開にあたっての課題 (1/2)

各国の法規制を確実に守りながら、事業開発と現地拠点の構築等を同時並行かつ高速に進めることが求められ、スタートアップにとって負荷は極めて高い

- 海外オペレーション構築の課題

- ビザ、法人拠点探索、人材採用、法務、税務、個人情報関係対応…
- 特に米国は州毎に法務、税務が違う：リモートワークでは従業員居住の各州で対応が必要

- ウェブサービス提供・開発における課題

- セキュリティ、ISO取得、(技術情報を扱うため) 輸出管理、外為法の遵守
- 海外法人との共同開発における規制遵守(例：米国と共同開発した場合米国基準の法規制対応が必要)

- 営業・マーケティング・サポートでの課題

- 信用、ブランド力がない中での認知と信頼の獲得ハードル（無名からのスタート）
- 現地体制の構築
 - 日本からの営業・サポートでは、時差・言語の壁があり、現地体制
 - 専門性の高いソフトウェアでは「地場に根付くこと」が大事であり、現地に拠点がありスタッフがいることが重視される。

グローバル展開にあたっての課題 (2/2)

海外で成功した本邦スタートアップは少なく、ノウハウが少ない

- 各社の状況により、気をつけるべき点や複雑性は様々
 - Matlantis社の場合SaaS×ディープテック(輸出規制)×他拠点サポート・共同開発ニーズ
- 振り返ると、各専門家の専門領域の狭間で行き詰まることも多かった
 - JETROの支援にて、専門家へのマッチングをいただけたことは推進に繋がった
 - 一方、事業とグローバル展開全体像を把握し、専門家と実務を進められる経験者の確保は困難
- Matlantis社の場合、
最近海外展開をはじめた別のスタートアップからの情報が参考になった
 - 直近海外展開した企業が次の企業を支援する仕組みなど検討できないか
(弊社としても、協力できる部分があれば協力させていただきたい)

グローバル展開にあたって、政府に対する期待

- 輸出規制を考慮した、グローバル多拠点での共同開発のモデルケースの整備
- 海外進出活動への支援
 - 現地拠点設立、調査費用、現地パートナーとの支援など
- アカデミックユーザーに対しての利用支援
 - 海外アカデミア・研究機関でのユーザーを広げ、企業向けに拡大していきたい
 - なお、国内アカデミア向けも競争力維持のため一層支援していただきたい
- 現地との面的・長期的なネットワークの構築支援
 - 例：現地との共同開発・開発人材の交流支援

**素材・材料開発については日本が世界で重要な役割を示している。
弊社は、それを背後から支援し、AIx材料でも重要な役割を果たしたいと考える。
政府にはスタートアップのグローバル展開支援を引き続きお願いしたい。**

補足資料

Matlantis内部で使われるPFP(機械学習原子間ポテンシャル) の進化

PFP(MLIP)はサポート可能な元素数、系のサイズ、対象材料を拡大してきた

	2021.06	2022.08	2023.10	2024.04	2024.09	
PFP Version	v1	v3	v5	v6	v7	リリースからの 改善幅
主な進化内容	D3 correction (v1.1)	元素数の拡大。高速実行を実現するためPFVMを利用	原子間の相互作用の取り扱いを改善	モデルで新アーキテクチャ採用	自然界に存在する ほぼすべての元素 をサポート	
対応元素数	55	72	72	72	96	
対応最大原子数	3,000	10,000	19,000	44,000	44,000	
学習データ数	10×10^6	22×10^6	42×10^6	42×10^6	59×10^6	
						+41
						~15x
						~6x

* 対応最大原子数については、ユーザープランによって対応数が異なる

* 学習データの質・多様性についても大きく改善し続けている