

AIで加速する結晶構造予測 および逆生成

岡野原 大輔

今回は、AIを活用した結晶構造予測（CSP=Crystal Structure Prediction）および逆生成（Inverse Design）の基本的な考え方から、代表的な手法、応用事例、そして今後の課題について解説する。

結晶構造予測とは

物質は原子の集合体であり、それぞれの原子がどのように配置されているかによって物質の性質が決まる。この原子の並び方を結晶構造とよぶ。たとえば同じ炭素原子でも、並び方が異なればまったく異なる見た目や特性をとる黒鉛にもダイヤモンドにもなる。また、塩化ナトリウムのように単純な構造をとる結晶もあれば遷移金属酸化物のように複雑な構造をとる結晶（図1）も存在する。さらに外部の圧力や温度によっても形成される結晶構造は変化する。

結晶構造予測は、ある化学組成が与えられたとき、それに対応する最も安定な結晶構造を理論的に予測する方法である。通常は、ランダムに多くの結晶構造を仮定し、それぞれの安定性、つまりエネルギーを評価し、最も安定な構造を探索する。このエネルギー計算には、密度汎関数法

（DFT）が利用されることが多いが、最近では汎用性と性能が改善されてきたニューラルネットワークポテンシャルが利用されることも多くなっている。

CSPは、水平方向が候補構造、高さ方向がエネルギーに相当するようなエネルギー地形上で、最も低い箇所（極小）を探索する問題である。この地形は非常に複雑で、単に今の候補構造から貪欲的にエネルギーを下げるような構造変化を求める手法では最適解に到達しない。

これまでCSPの最適化として、ランダム構造探索、遺伝的アルゴリズム（例：USPEX（文献1））などが提案されている。これらは初期構造をランダムあるいは経験的ルールで生成し、エネルギー評価に基づいて構造を進化（変位・交叉・局所緩和）させていく。

以前よりこうした手法は広く使われていたが、広大な探索空間を計算するためには膨大な計算コストが必要であるという問題があった。しかし近年、高速かつ高精度なニューラルネットワークポテンシャルの登場により、これらの手法を大規模に実施できるようになってきた。さらに、洗練された最適化手法と組み合わせることで、未知の結晶構造を計算で予測したり（図2）、元素系が与えられたときに、異なる化学組成の構造を同時に探索して、相図を推定するといったことも可能となっている（文献2）。

さらに最近では、生成モデルを活用して有望な初期構造を直接生成し、そのうえで上記のような手法で結晶構造を予測する方法や、探索そのものを機械学習で行う方法も多く提案されている。この背景には、Materials Project（文献3）などの材料データベースの整備が進んでいることがあげられる。

たとえば、ShotgunCSP（文献4）では、データベースに基づき既知構造をもとに新規候補を大規模に生成し、それらの安定性を転移学習（あるタスクで学習されたモデルを類似のタスクに応用すること）によって精度を向上させ

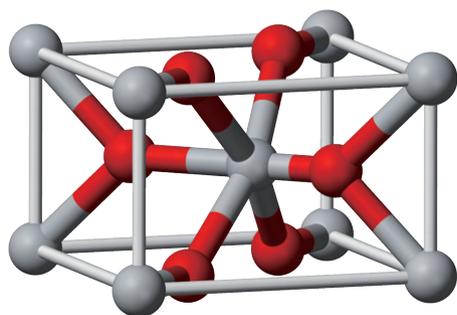


図1 酸化チタンの結晶構造の単位例 このような単位が繰り返されて結晶構造が構成される。

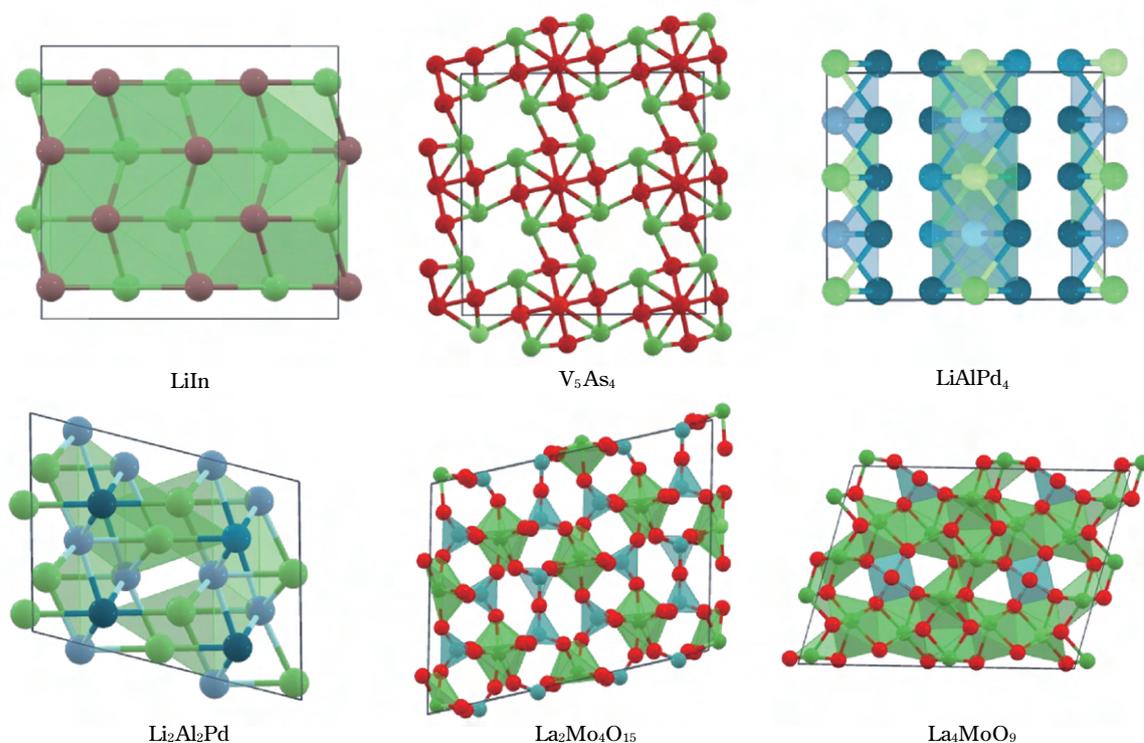


図2 結晶構造探索手法で新たに見つかった結晶例（文献2から引用）

たエネルギー予測モデルで評価した。さらに、既知構造からの元素置換や結晶対称性に基づく部分構造の組み合わせによる2種類の生成アルゴリズムを組み合わせることで、90種類のテスト構造に対して93.3%の精度で最安定構造を予測することに成功している。

また、MatterGen（文献5）は、周期表全域の元素を含む多様な無機構造を網羅的に学習し、安定かつ多様性に富む新規構造を生成できると報告している。MatterGenによって生成された構造の約90%がDFT計算で安定性が確認され（エネルギー緩和後に結晶構造を保持）、そのうち半数以上は既存データベースには存在しない新規構造であった。一部の構造については実験による合成と物性評価も行われ、目標とした特性をもつことが確認されている。

逆生成

結晶構造予測はランダムに材料を探し、そのなかで所望の性質をもつものがあるかどうかを探すようなアプローチである。これとは逆に、「こういう性質をもつ材料がほしい」というゴールを設定し、そこから逆にどのような組成や結晶構造であればその性質を満たせるかを求めるアプローチが逆生成である。近年では生成AIを用いて、材料

の構造そのものを生み出す研究が進んでいる。実際に生成された構造が本当に存在可能か（すなわち安定しているか）は、その後、物理シミュレーションや実験によって検証される。

たとえば先程のMatterGenにおいても、条件付き生成を使うことで特定の性質をもつような組成、およびそのような結晶を生成することができると報告している。

このようなアプローチにより、有望な候補構造を短時間で絞り込むことが可能となる。従来では何週間もかかっていたプロセスが、AIの導入によって数時間で完了することもある。さらに、AIは過去の経験や人間の直感に頼らず新たな視点で構造を提案でき、複数の条件・制約にも柔軟に対応可能である。

材料別での応用状況

具体的にこれらのアプローチがどのように活用され始めているのか、いくつか分野を取上げて紹介しよう。

リチウムイオン電池をはじめとする二次電池においては、正極・負極・電解質の開発が活発である。特に次世代電池として注目される全固体電池では、イオン伝導性と化学的安定性の両立が重要であり、CSPを用いて未知の安定なイオン伝導性結晶を探索する研究が進んでいる。これに

より、新たな高伝導率・低界面抵抗をもつ候補材料が提案されている。

また、高分子電解質の分野でも、言語モデルと拡散モデルとよばれる生成モデルを組み合わせることで、46種類の新規ポリマーが提案され、そのうち17種は既存ポリマーを上回る高いリチウムイオン導電性を示したと報告されている(文献6)。

触媒設計においては、高エントロピー合金(HEA=High Entropy Alloy、5種類以上の金属を高濃度で混合した合金)触媒の表面サイトに着目し、Persistent Homologyとよばれるトポロジー解析手法で活性サイトの形状特徴を抽出し、それらの特徴量を入力とする生成モデル(PGH-VAE)を開発した。このモデルはOH吸着エネルギーの予測に特化し、解釈性の高い潜在空間を構築することで高精度な予測と構造最適化を可能にしている(文献7)。これは、構造全体ではなく注目したい特徴のみを抽出・最適化するという新しい方向性の応用例である。

半導体分野においては、所望のバンドギャップや光学特性をもつ材料の開発が進められている。電子バンド構造計算と生成モデルを統合した材料探索が実施されており、逆生成モデルによって提案された構造のバンド計算を高速に評価し、それをフィードバックすることで目標とする材料を効率的に探索する手法が試みられている(文献8)。

今後の課題

AIを使った結晶構造予測や逆生成は強力な手段ではあるが、依然として課題は多く残っている。

第一に、学習データの偏りがあげられる。第一原理計算は正確であるものの、計算コストが高く、実用上はニューラルネットワークポテンシャルなどの近似モデルを用いる

必要がある。しかし、それらのモデルが有効に機能するのは訓練データがカバーした範囲に限られ、新しい系への一般化が難しい場合がある。逆生成においても同様の問題が存在する。

第二に、合成可能性の問題である。AIが提案した構造が計算上は安定でも、実際には合成困難な場合がある。これに対応するため、合成のしやすさを予測するAIモデルも近年登場している。ここでは、前回紹介した反応経路の探索や合成条件予測といった、化学反応AIとの連携も期待される。

第三に、構造予測という問題一つを取っても、電場やひずみ場をかけた動的条件下での予測、極限環境下での予測、励起状態での構造変化など、多くの未解決の課題が残っている。

このように、計算化学とAIの融合は材料探索を大きく加速しているが、探索空間の膨大さという根本的な問題は依然として存在しており、今後も継続的な手法の改良と検証が必要である。

参考文献

1. C. W. Glassほか, *Comput. Phys. Commun.*, **175**, 713 (2006).
2. T. Shibayamaほか, "Efficient Crystal Structure Prediction Using Genetic Algorithm and Universal Neural Network Potential", arXiv: 2503.21201
3. A. Jainほか, *APL Mater.*, **1**, 011002 (2013).
4. C. Liuほか, *npj Comput. Mater.*, **10**, 298 (2024).
5. C. Zeniほか, *Nature*, **639**, 624 (2025).
6. Z. Yangほか, *npj Comput. Mater.*, **10**, 296 (2024).
7. B. Wangほか, *npj Comput. Mater.*, **11**, 147 (2025).
8. Z. Songほか, *Nat. Commun.*, **16**, 1053 (2025).

現代化学 購読のご案内

- ☆ 毎月発行と同時に直接お手もとにお送りします。送料無料。
- ☆ 電子版のお申込みは**当社 HP 定期購読受付フォーム**より、冊子版のお申込みは、HP・E-mail から承っております。
- ☆ 電子版購読の詳細や注意点は**当社 HP**をご覧ください。
- ☆ 購読料は長期の購読ほど割安です。

便利な定期購読をおすすめします

価格	冊子版(送料無料)	電子版	冊子+電子版
6ヵ月	(6冊:6,600円) ▶ 4600円	4600円	4600円 + 2000円
1ヵ年	(12冊:13,200円) ▶ 8700円	8700円	8700円 + 4000円
2ヵ年	(24冊:26,400円) ▶ 15800円	15800円	15800円 + 7500円

申込み先
問合わせ先

〒112-0011 東京都文京区千石 3-36-7 (株)東京化学同人
E-mail: gendaikagaku@tkd-pbl.com
URL: <https://www.tkd-pbl.com/subscribe>

お申込みはこちら ➡

