

2024年6月、Advance/NanoLabo 新機能に関する速報

# 世界初、AIによる材料モデリング機能 “Autopilot”を Advance/NanoLabo に搭載



ユーザーが作りたい原子構造モデルを言葉で入力するだけで、自動的にモデルが生成される“Autopilot”の機能を世界に先駆けて開発しました。例えば、以下のような命令文で該当モデルが生成されます。

## 1. 命令文「NMC 電極の 110 表面と、1mol/L の LiBF<sub>4</sub> の EC:DMC(7:3)溶液の固液界面」

⇒ 層状 LiCoO<sub>2</sub> のスーパーセルを作り、Co を Mn と Ni に置換して(110)スラブを作った後、EC, DMC, Li<sup>+</sup>, BF<sub>4</sub><sup>-</sup> を指定された割合でパッキングします。 ※AI が NMC 電極の意味を理解した上でモデリングします。

## 2. 命令文「Fe/Ni/Cr/Mn = 7/1/1/1 の合金」

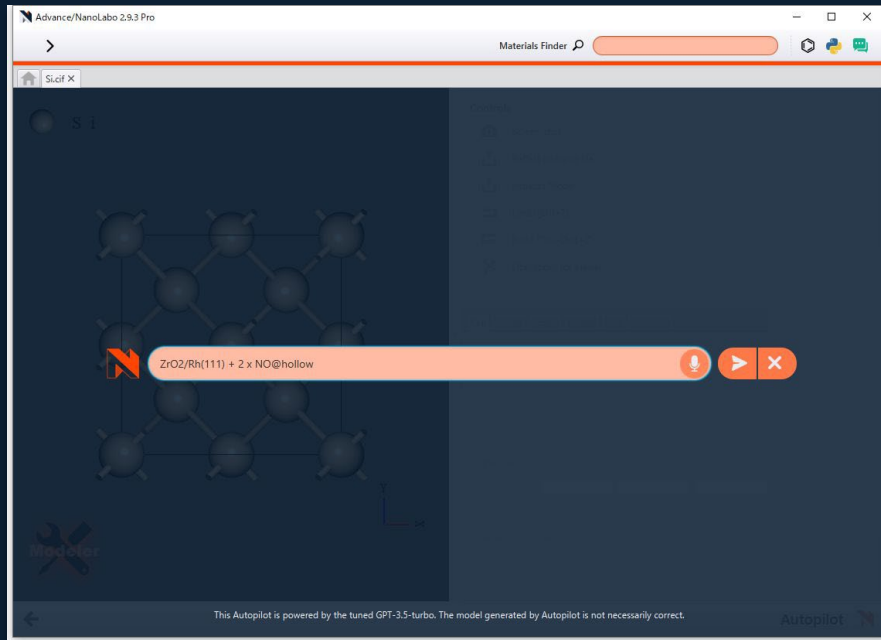
⇒ Fe のスーパーセルを作成した後、Fe を Ni に 10.0%置換、Fe を Cr に 11.1%置換、Fe を Mn に 12.5%置換します。  
※AI が元素置換率を自動計算してくれます。

## 3. 命令文「ZrO<sub>2</sub>/Rh(111) + 2 x NO@hollow」

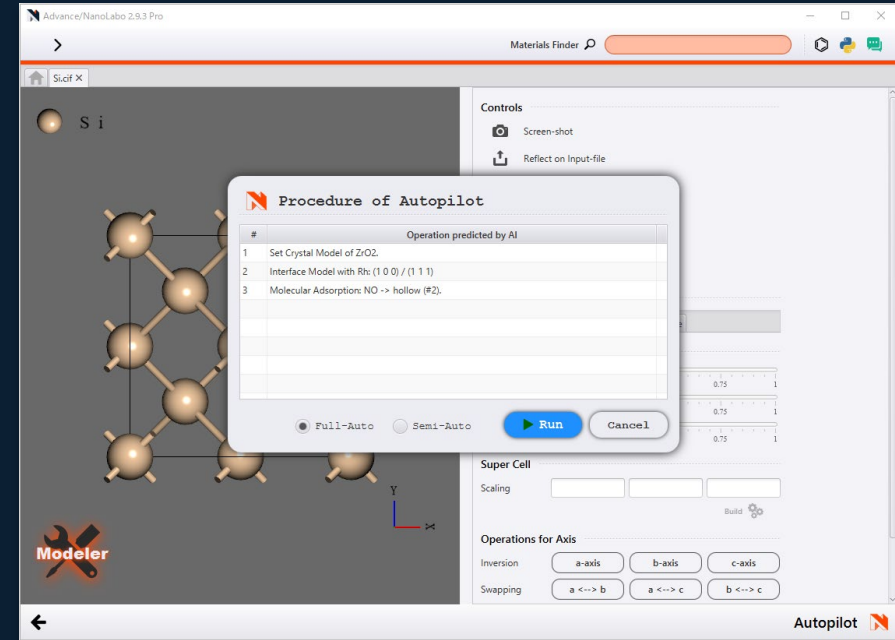
⇒ ZrO<sub>2</sub> と Rh(111)の界面モデルを作成して、その上に一酸化窒素分子をホローサイトに 2 つ吸着させます。  
※AI は化学式を使った曖昧な表現も理解します。

音声による命令文の入力にも対応しています。また、AI による自動モデリング遂行中にユーザーが細部を適宜設定できる“セミオートモード”も利用可能です。Autopilot の機能は、Advance/NanoLabo の次バージョンよりお使いになれます。Advance/NanoLabo のライセンス料金以外の追加費用は発生しません。AI については、GPT3.5-turbo をベースに実装しています。

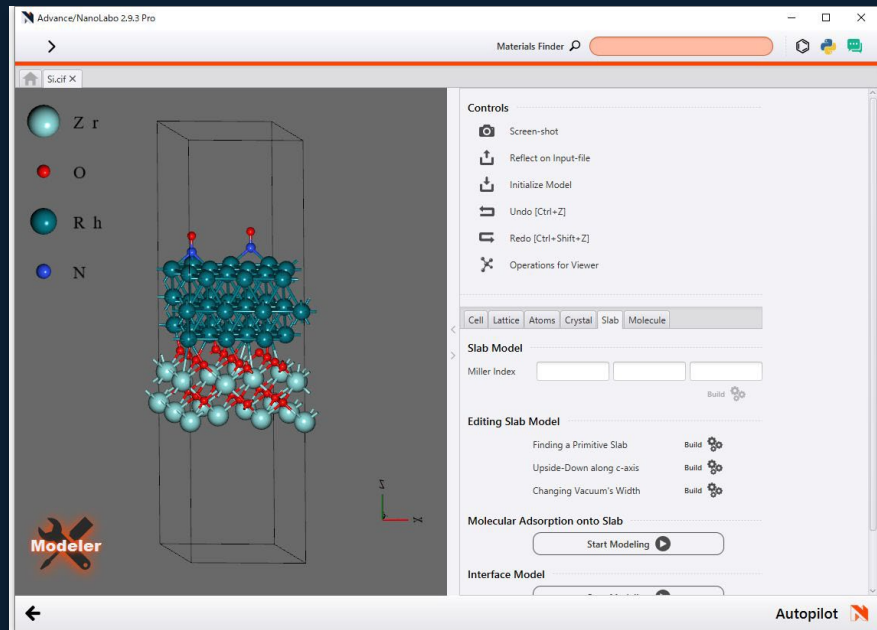
## ① 命令文の入力



## ② モデル作成手順の確認



## ③ モデル作成の自動実行



- ① 命令文を入力し、
- ② モデル手順を確認後に、
- ③ モデル作成が自動実行されます。

詳細は動画をご覧ください ⇒



### アドバンスソフト株式会社

詳しい情報をご希望の方は、まずはお問い合わせください。デモンストレーションも可能です。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西

TEL: 03-6826-3971 URL: <http://www.nanolabo.advancesoft.jp/>

E-mail: [office@advancesoft.jp](mailto:office@advancesoft.jp)

