

2025 年 6 月 3 日
株式會社日立先端科技

化合物探索支援服務 “Chemicals Informatics” 榮獲 2024 年度 “日本材料學會技術獎”



獎牌

株式會社日立先端科技 (以下稱 “日立先端科技”) 憑藉 “基於公開資訊 “Chemicals Informatics : (以下稱 “CI”) “的材料探索技術”，榮獲由公益社團法人日本材料學會頒發的 2024 年度 “日本材料學會技術獎 (以下 “稱本技術獎”) ”。

本技術獎為頒授予在材料科學與工程領域有顯著技術貢獻之個人或團體，旨在肯定並表揚其在新技術開發或現有技術革新與實際運用方面的卓越成就。

此次，日立先端科技針對材料開發所提供的雲端服務 “CI”，在研發探索有機與無機材料方面，因有助於提升有效性與作業效率而備受肯定。

關於 “CI”

此項化合物探索支援服務，係採用日立先端科技基於專利等公開資料獨創的資料庫，可根據收錄在「CI」中龐大的化合物資料，透過 AI 快速且全面性地搜尋，找出可望開發為新材料的候選材料，並以分子動力學模擬^{*1}，預測其效果和機制等相關資訊。透過此項服務，可大幅減少以往仰賴文獻調查的候選材料探查與搜尋或以實驗計畫法^{*2}進行的全面性實驗，為提升開發流程效率與縮短期程提供支援，並讓新材料可盡快實際運用，以及最佳化的實驗次數，從而在降低開發成本及減少 CO₂ 排放量方面貢獻心力。

日立先端科技自 2020 年起提供此項服務，目前已應用於以化學與材料製造商為主的客戶其研究開發現場。

*1 分子動力學模擬：此為透過解原子的運動方程式來預測材料性質的計算機模擬技術

*2 實驗計畫法：此為在進行多種條件組合的實驗時，透過統計學，毫無遺漏地將條件加以組合，推導出所需實驗，並分析其結果的方法

未來展望

目前各方對於高功能材料與環保材料等新材料的開發需求正日益高漲，探索最佳材料將是今後的開發過程中不可或缺的流程，提升此流程的效率，將有助於大幅加快整體的開發速度。日立先端科技不僅提供“CI”的服務，亦提供使用 MI (材料資訊學；Materials Informatics) 的“材料開發解決方案”，可根據過去的實驗資料，協助探索用於開發之材料的配比或份量等最佳條件。此外，我們還提供「實驗數據收集服務」和「DX 概念制定支援」等廣泛的 DX 解決方案，並透過支援各種材料開發流程的效率化，為提高第一線工作人員的生產效率和在工業領域推動 DX 做出貢獻。

日立先端科技將活用在全球前線能力、專業領域知識、接觸點與技術能力等方面的優勢，從各種社會課題出發，創造能解決課題的解決方案與商業模式，為產業與社會基礎設施領域的市場成長貢獻力量。

相關連結

[About CI](#)

[Contributing to Efficient Development of Metal Thin Film Materials by Using Chemicals Informatics and Materials Informatics](#)

洽詢單位

Informatics Promotion Dept.

Industrial & Social Infrastructure Business Group

Informatics.aj@hitachi-hightech.com