

科学法則を分野横断的に用 いる材料探索の支援システム

物質・材料研究機構

機能性材料研究拠点

ナノ電子デバイス材料グループ

主席研究員 吉武道子

2020年6月18日

新技術の特徴

基本的に、実験や計算で得られる数値データが必要ない(材料探索方針の設定。具体的材料を絞り込むには数値データは必要。)

数値データではなく、科学法則という知識データを利用

科学法則を分野横断的に用いることを可能にする、ネットワーク型の知識データベースと知識探索システム

プレゼンの構成

- 1) 科学法則を分野横断的に用いる材料探索
(マテリアルキュレーション[®])とは
機械学習との違い
科学法則を分野横断的に用いる狙いと方法
- 2) 科学法則を元にした実際の例
考え方のわかる例
実際に適用した例
- 3) 物性間関係性のデータベース化と探索

機械学習とマテリアルキュレーション[®]との違い

機械学習がやっていること

	A	B	C	D	▪	▪	▪	Z
#1	2	1	5	7	▪	▪	▪	4
#2	3	4	6	2	▪	▪	▪	5
#3	5	7	1	3	▪	▪	▪	4
#4	6	2	6	4	▪	▪	▪	6
▪	▪	▪	▪	▪	▪	▪	▪	▪

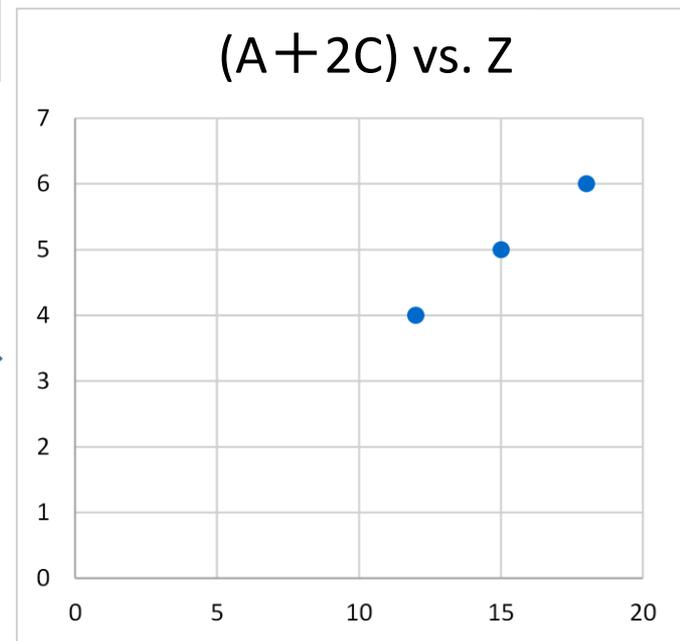
A、B、C、DとZとの間にどのような相関？

人間が見てもぱっとはわからないが、
コンピュータは見つけるのが得意



数値データのパターンを見つける

最適化の強力なツール



科学法則を分野横断的に用いて発見されたと推測される 他の研究者の事例：固体燃料電池正極用カーボンアロイ触媒

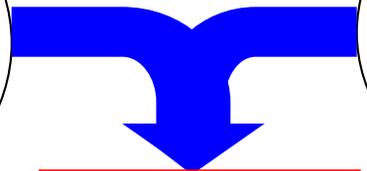
カーボンアロイ触媒：炭素と窒素のみからなり、**貴金属を全く含まない触媒**で、従来の白金触媒を置換（群馬大学の尾崎教授による発見）

既に、固体高分子形燃料電池の電極材料として日清紡が実用化し、Ballard Power Systems Inc. (Ballard社：カナダ・ブリティッシュコロンビア州)のポータブル燃料電池に採用されている。

尾崎教授は有機合成の専門

燃料電池正極用触媒（白金をカーボンに担持したもの）：如何に触媒の白金含有量を減らすか

反応としては同じ



C, Nのみからなる触媒

有機合成用触媒：カーボンをアンモニアとともに高温で熱処理すると触媒能がある

「白金量を如何に減らすか」という研究のデータからは決して発見されない

有機化学専門の尾崎教授による金属を全く含まない燃料電池用触媒の発見

原理的探索空間

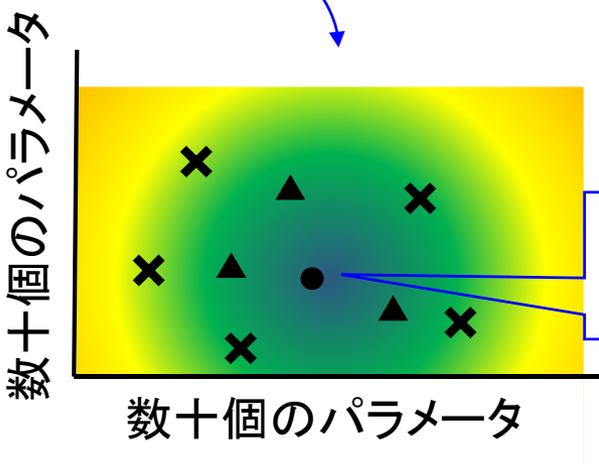
従来の探索領域

燃料電池用含Pt触媒

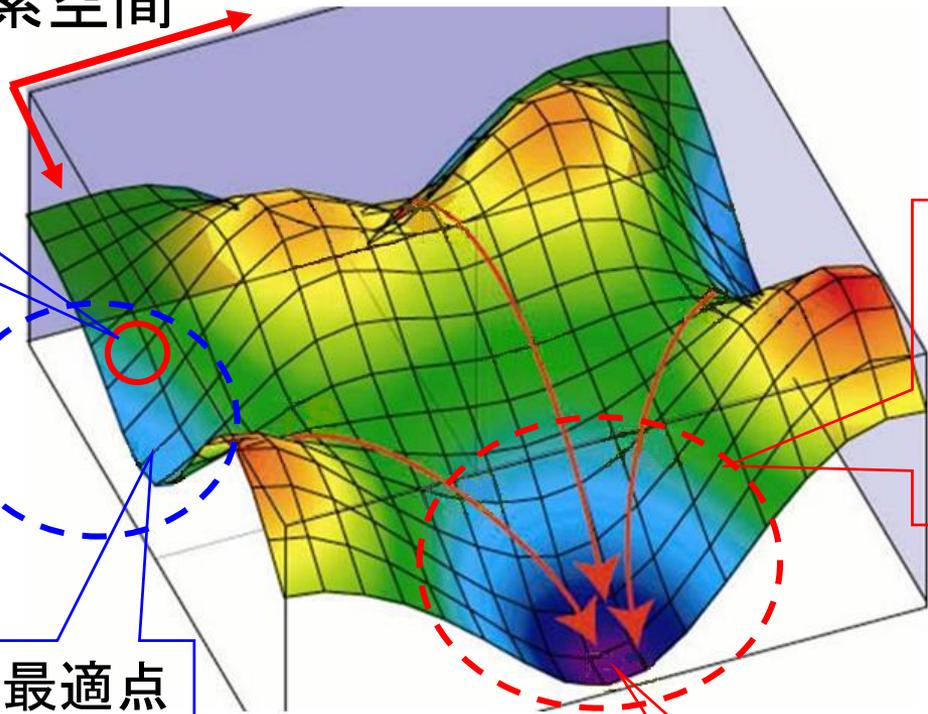
機械学習の探索範囲

Pt・貴金属の種類・量を減らすには？

局所最適点



パラメータ数値のある範囲で最適化



仮説生成

科学法則: この近辺を探すと良い(当たりをつける)、データが無いと数値は出せない

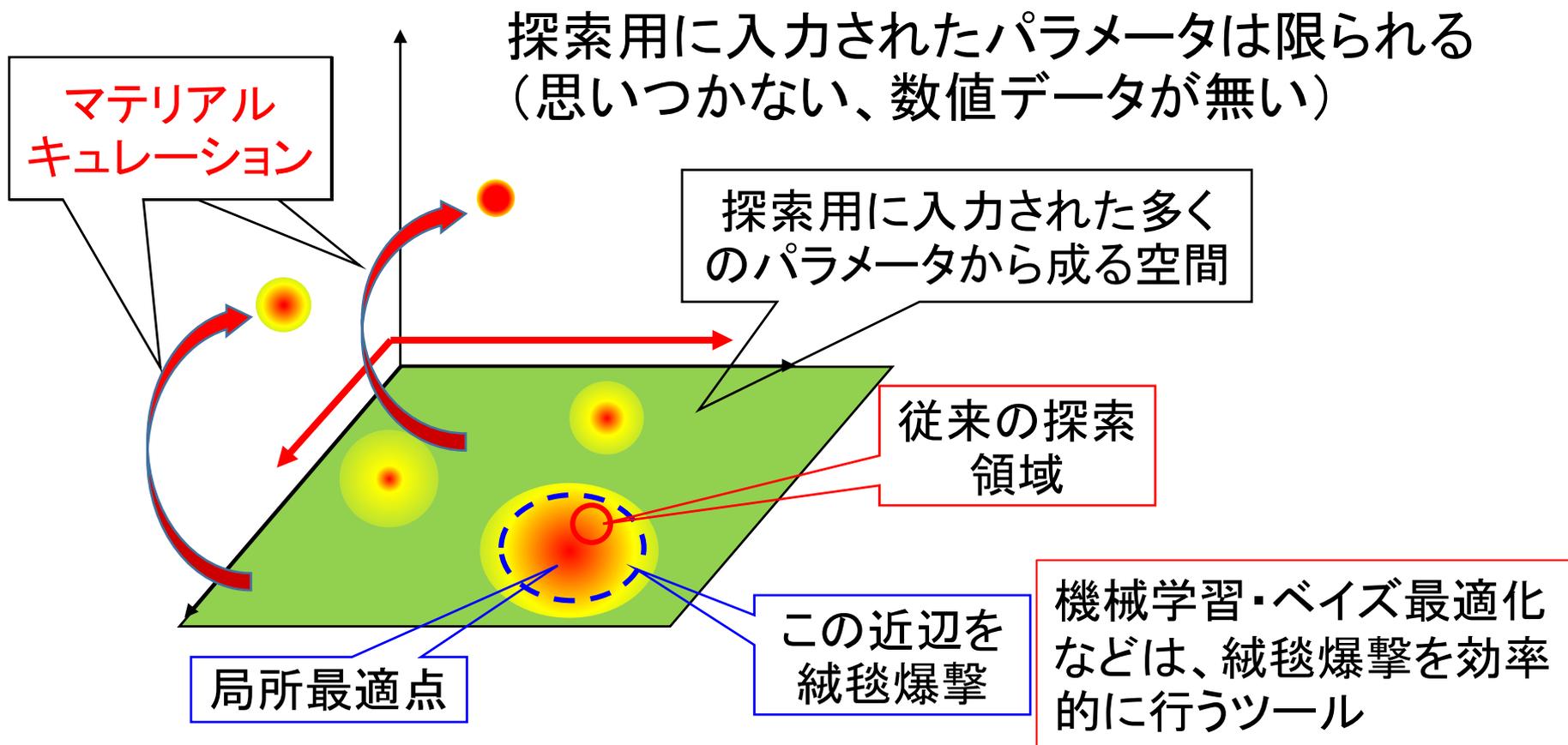
有機化学分野における同じ素反応の触媒は？

最適点

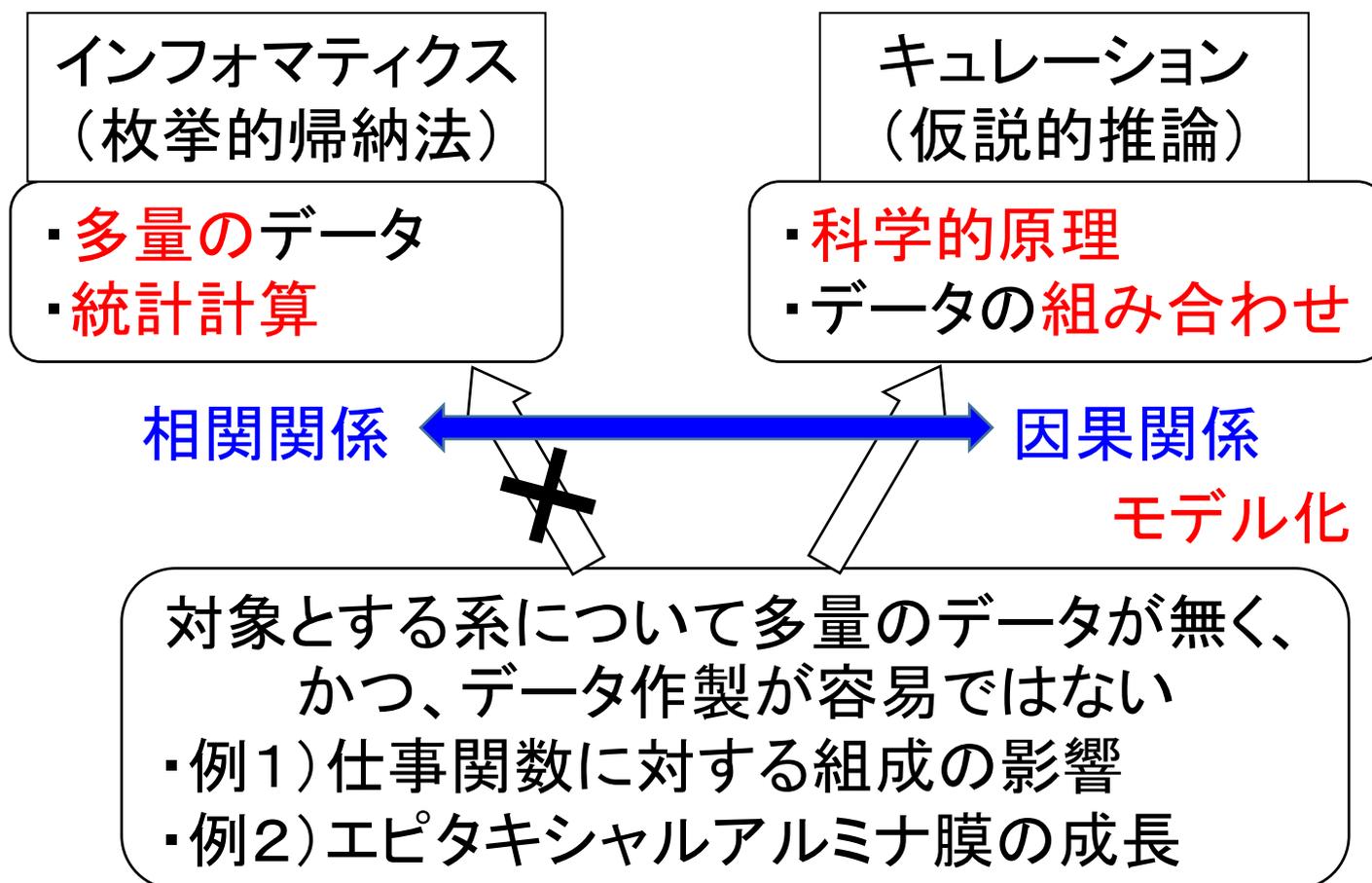
炭素と窒素のみからなるカーボンアロイ触媒

科学法則を分野横断的に用いる材料探索(マテリアルキュレーション[®])の狙いと方法:

探索用に入力されない領域に、科学法則を頼りに探索空間を広げる



機械学習的インフォマティクスとの違い



マテリアルキュレーション手順

0)・自分のいる(供給側の)視点から離れる
・現状から少し組成や成分を変えるというような、改良改善の発想から離れる
・自分の専門を離れる

I)ユーザーは、最終的に何を望んでいるのか？

II)その最終目的を達するために必要な要件を、科学的原理の観点から記述

広範な分野にわたる物理法則などの知識データベース

II)記述した観点を満たす方法として、原理的に考えられるものを列挙
(役立つブレインストーミング法:現状で使用されている方法が使われている科学的理由を考え、別の方法でその科学的理由を満たす方法が無いかを考える)

III)列挙した方法を、一つずつ検証

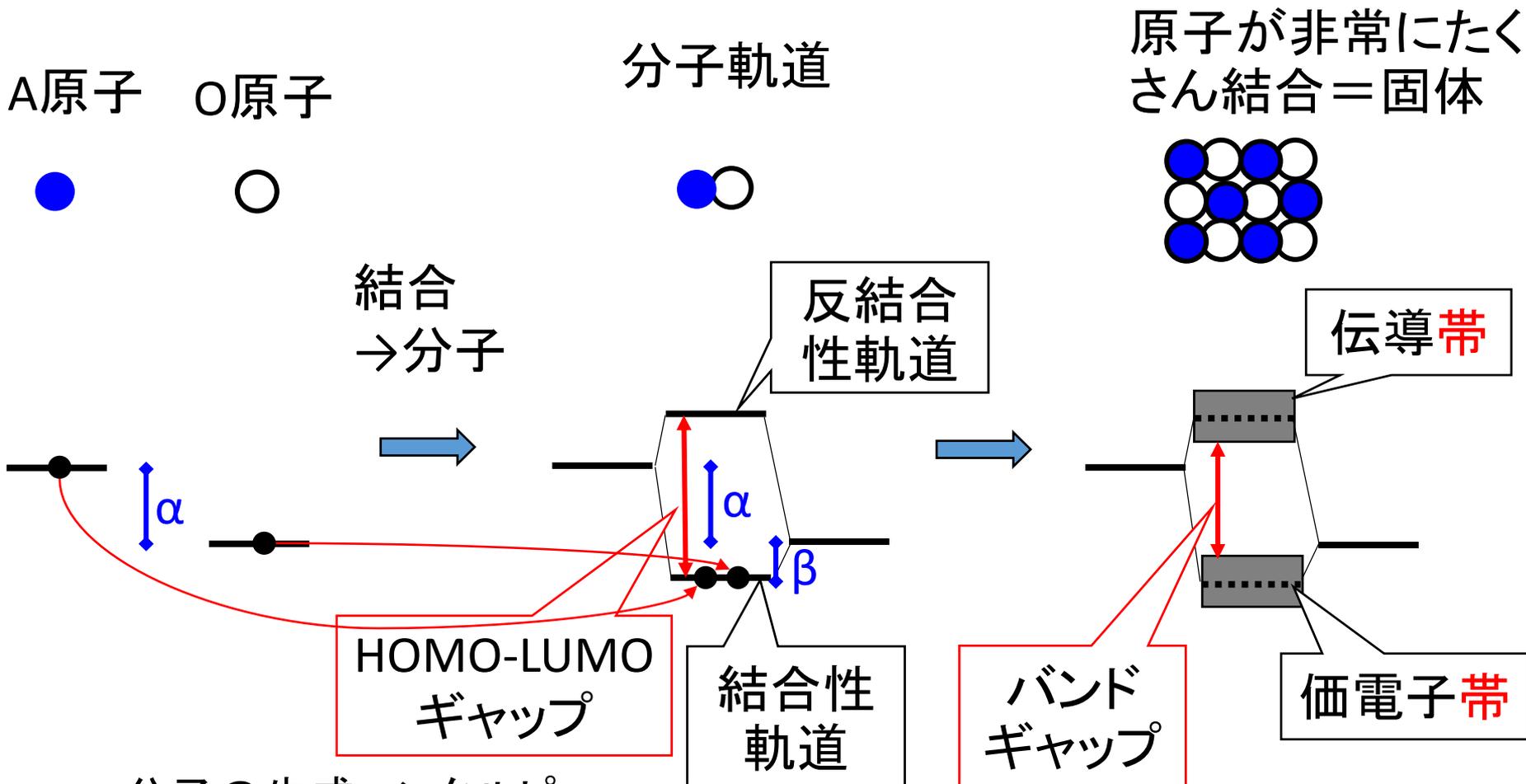
数値などのデータベース、インフォマティクス

IV)最終目的を達する新しい解

マテリアル
キュレーション
支援システム

科学原理を元にした考え方の例

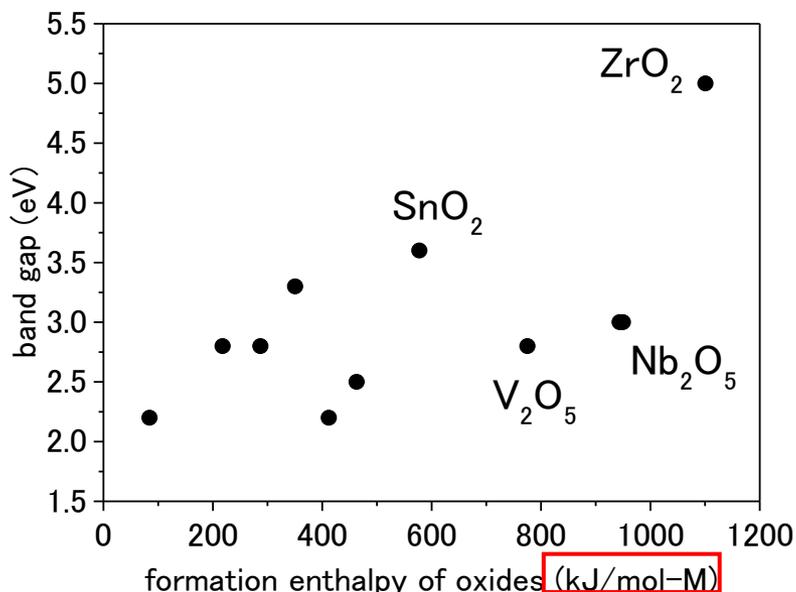
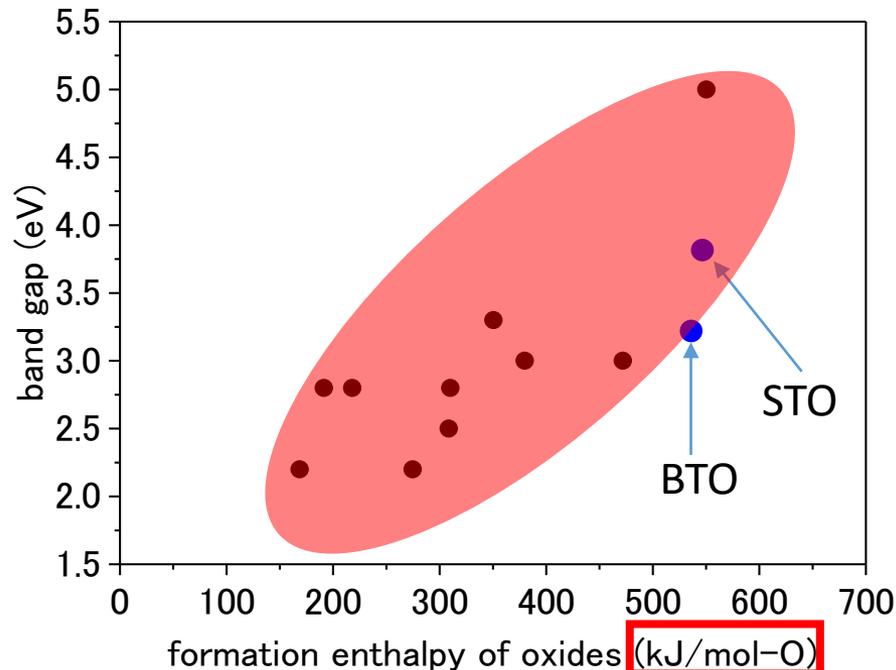
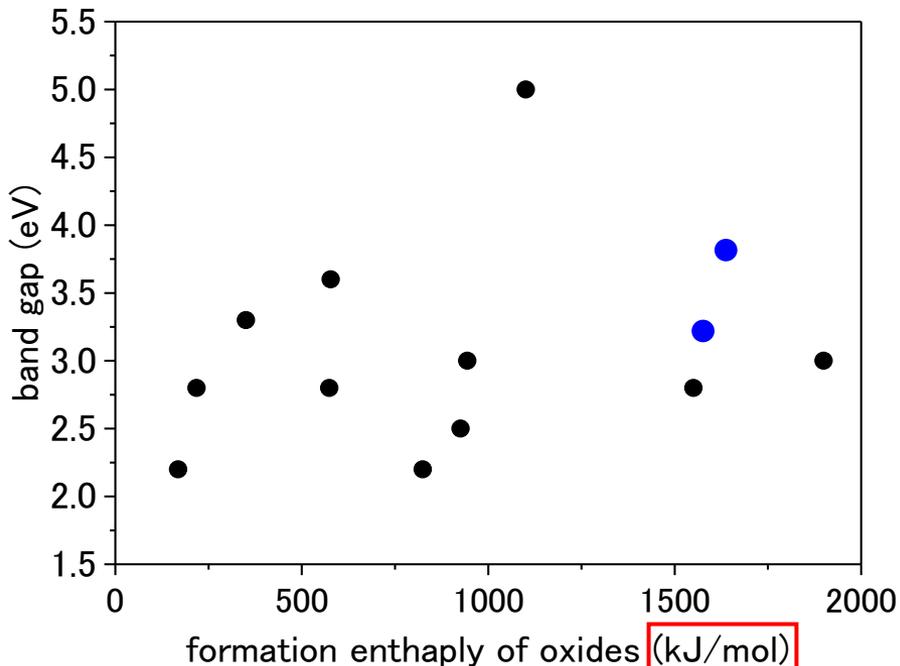
金属酸化物の生成エンタルピーとバンドギャップ



分子の生成エンタルピー
 $= (\alpha + \beta) + \beta = \alpha + 2\beta$
 $= \text{HOMO-LUMOギャップ}$

固体の生成エンタルピー
 \sim バンドギャップ

金属酸化物の生成エンタルピーとバンドギャップ



価数が異なる
酸化物に対し、
価数をそろえる

有機化合物の場合

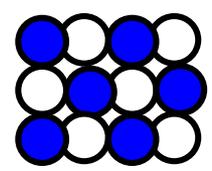
A原子 O原子



分子軌道



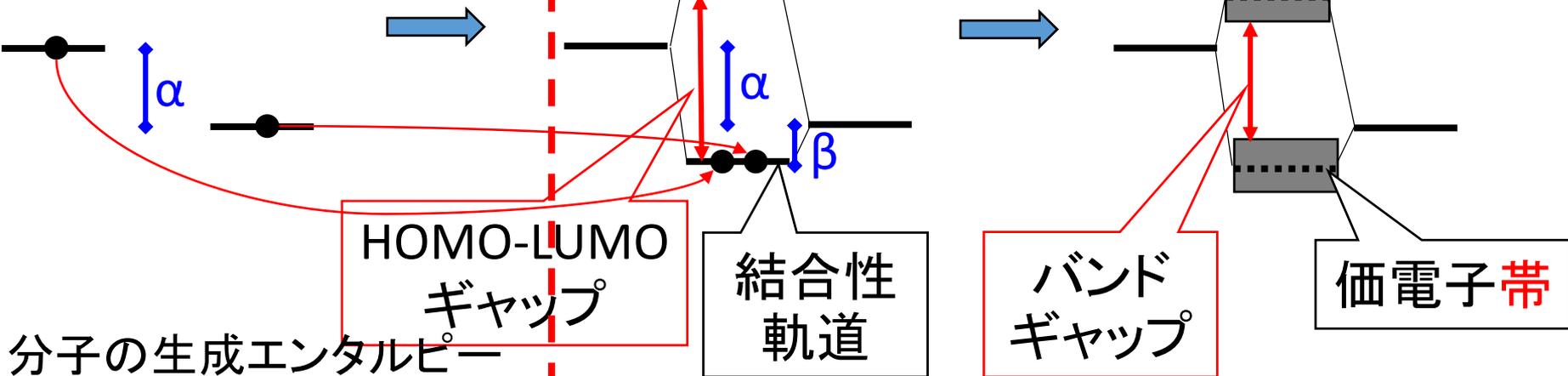
原子が非常にたくさん結合 = 固体



結合
→ 分子

反結合性軌道

伝導帯



HOMO-LUMO
ギャップ

結合性
軌道

バンド
ギャップ

価電子帯

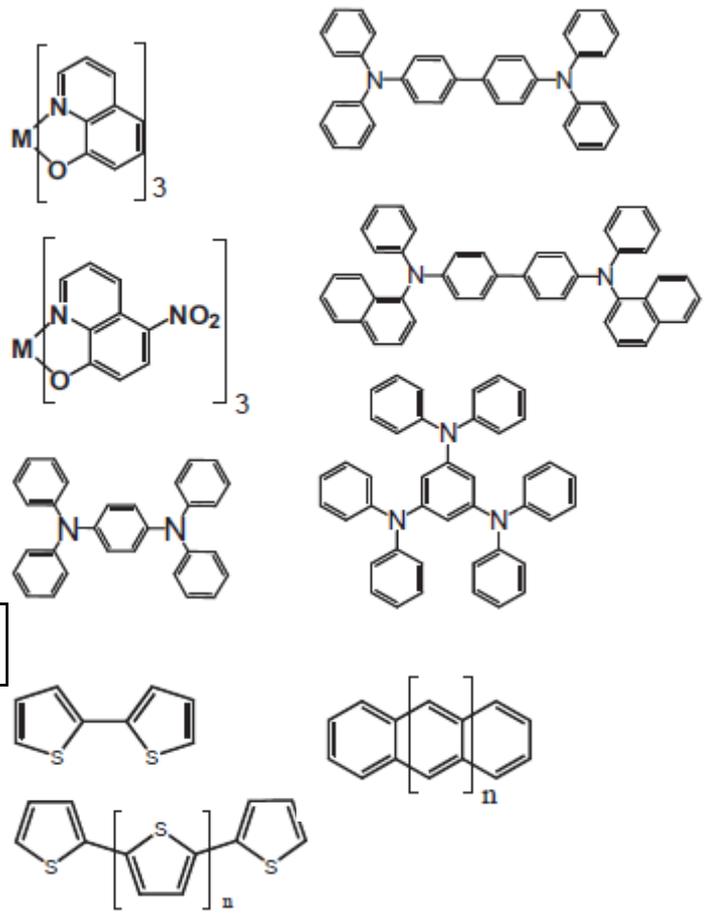
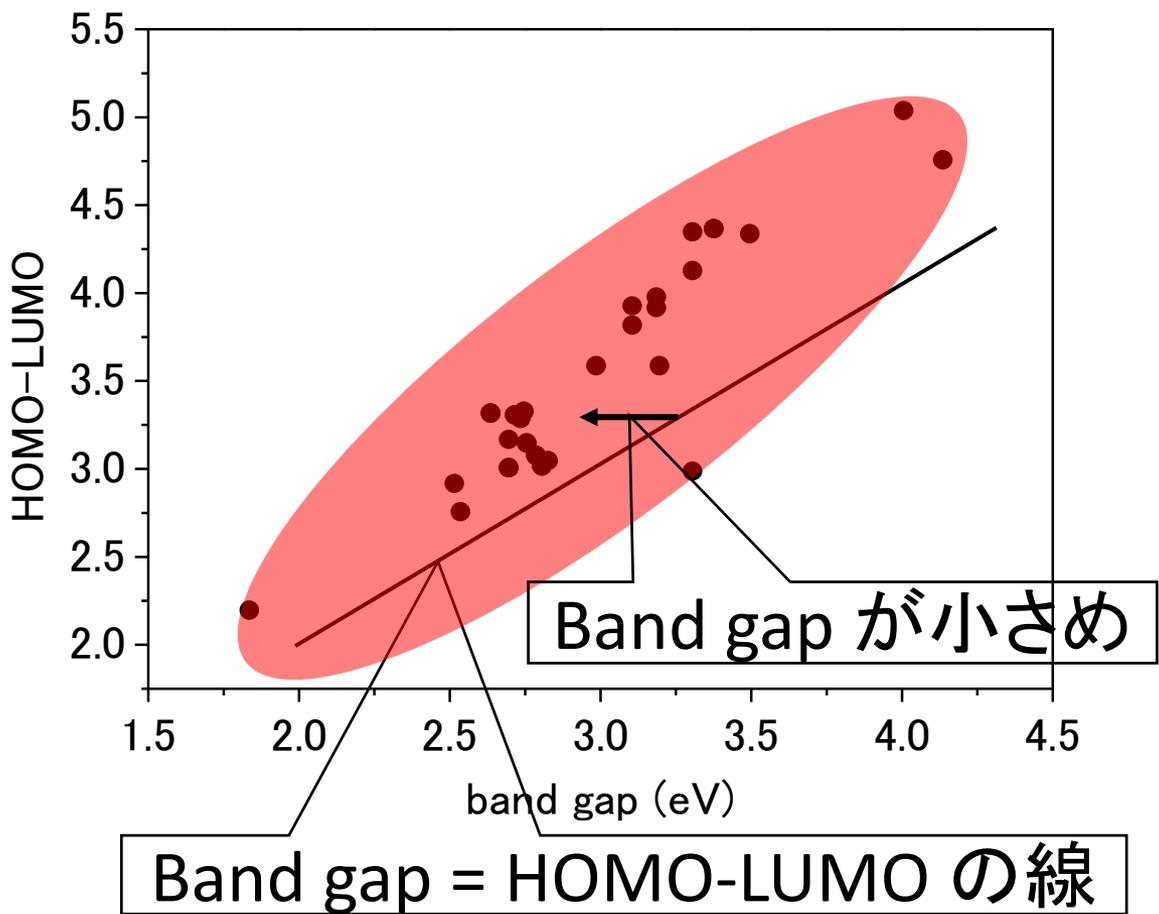
分子の生成エンタルピー
= $(\alpha + \beta) + \beta = \alpha + 2\beta$
= HOMO-LUMO ギャップ

固体の生成エンタルピー
~ バンドギャップ

有機物の場合、分子の生成エンタルピーは、HOMO-LUMO 形成に関与しない結合の生成エンタルピーが含まれている。

有機物における分子HOMO-LUMOギャップとバンドギャップ

Optical Materials 58 (2016) 51-60



生成エンタルピーと酸化還元電位

電気化学:

標準酸化還元電位: E°

標準ギブスエネルギーの変化: ΔG°

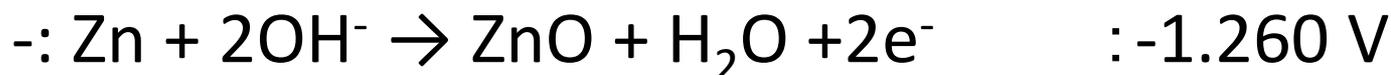
$$E^\circ = -\Delta G^\circ / nF$$

n: 価数, F: ファラデー定数 = 9.65×10^4 C/mol

酸化銀電池: 公称電圧 **1.55 V**

SR**

標準酸化還元電位と電池反応



(Znの酸化 & Ag_2O の還元)



生成エンタルピーからの酸化還元電位の計算

	価数	kJ/mol	kJ/mol-O	kJ/mol-M
ZnO	2	350.5	350.5	350.5
Ag ₂ O	1	31.1	31.1	15.55

$$\begin{aligned}
 E^\circ &= \frac{-\Delta G^\circ}{nF} \sim \frac{-\Delta H^\circ}{nF} \\
 &= (350.5 - 31.1) [\text{kJ/mol}] / (2 * 9.65 \times 10^4 [\text{C/mol}]) \\
 &= 3.310 / 2 [\text{V}] \\
 &= \mathbf{1.655 [\text{V}]}
 \end{aligned}$$

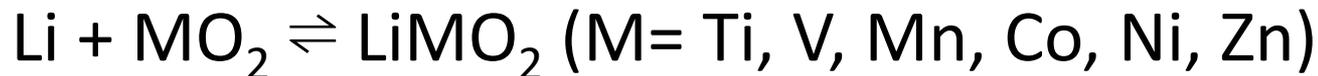
Cf. 公称電圧: **1.55 V**

標準酸化還元電位から計算: **1.602 V**

Gibbs energy: $\Delta G^\circ \neq$ Enthalpy ΔH°
 \sim Enthalpy ΔH°

イオン電池の起電力

リチウムイオン電池



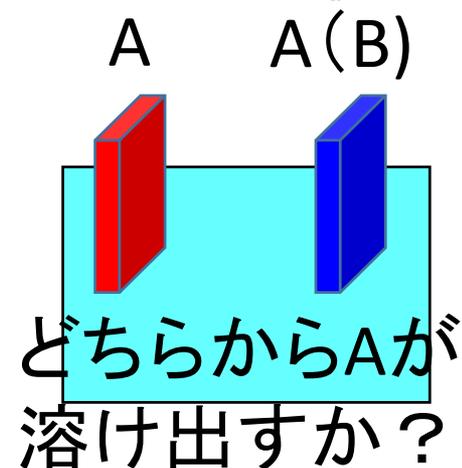
反応の極限、100%反応が左から右に起こる場合のギブス生成エネルギー: $-\Delta G$

エントロピー項は十分小さい \rightarrow 反応に関与する物質のトータルエネルギーを第一原理計算で計算して、その差を $-\Delta H$ として、 $E^\circ \sim -\Delta H^\circ / nF$ の式から、リチウムイオン電池の起電力が概算できる。

M	Ti	V	Mn	Co	Ni	Cu	Zn
起電力	2.36	3.03	3.35	3.97	3.14	3.88	4.63

酸化還元電位のデータが無いような合金の酸化還元電位を予測する

合金化したら酸化しやすくなる？
酸化しにくくなる？

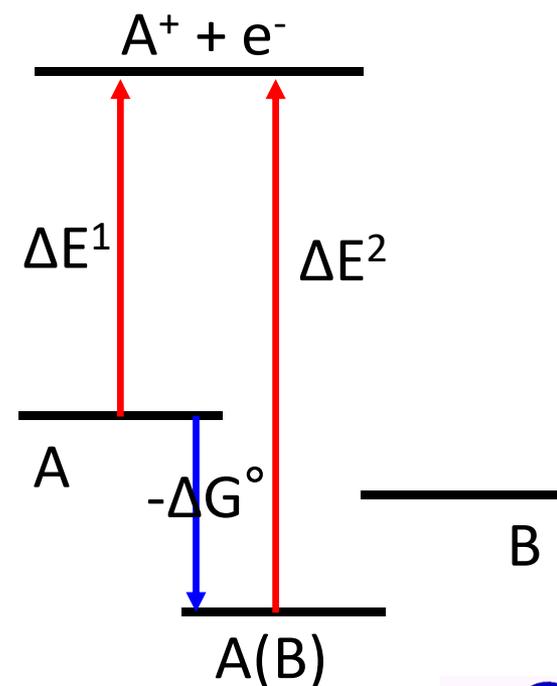


一方の電極がA, もう一方の電極がAにBが固溶したA(B)

電極反応



二つの酸化還元電位の差 ΔE は,
A \rightarrow A(B)の反応のギブスエネルギー変化 ΔG を用いて計算できる。



合金化の反応はエネルギーが安定化する場合のみに起こる(ΔG° が負)。

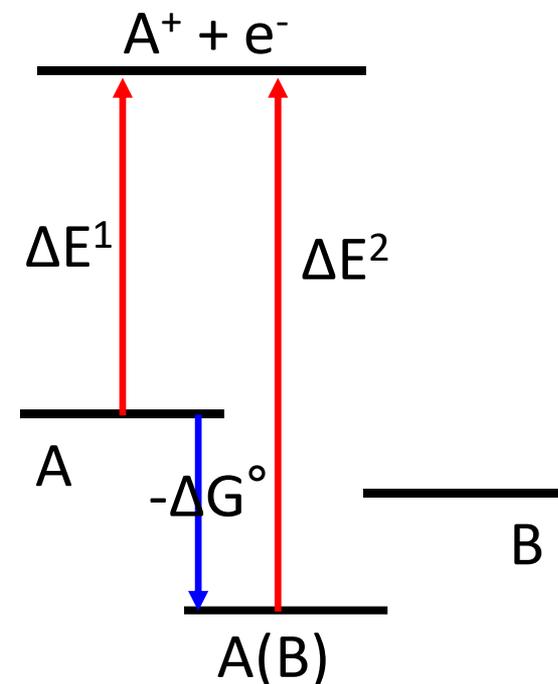
→合金が安定な場合は合金化すると必ずイオン化しにくくなると言える。

・合金が安定かどうか(酸化還元電位の定性的変化)

→ 状態図

・どの程度、酸化還元電位が変化するか

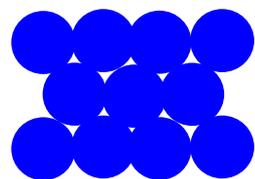
→ 合金化の ΔG° ($\sim \Delta H^\circ$)



酸化物生成エンタルピーと酸素吸着エネルギー

酸化物生成エンタルピー

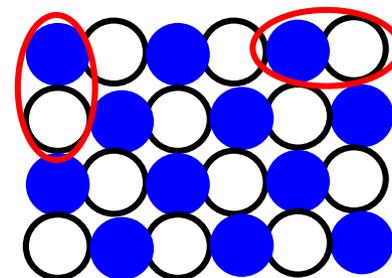
A金属



酸素分子

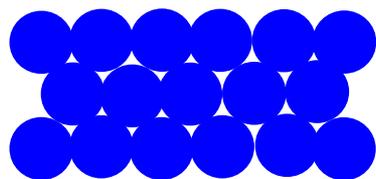


金属酸化物



金属上への酸素吸着エネルギー

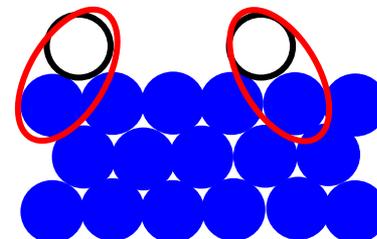
A金属



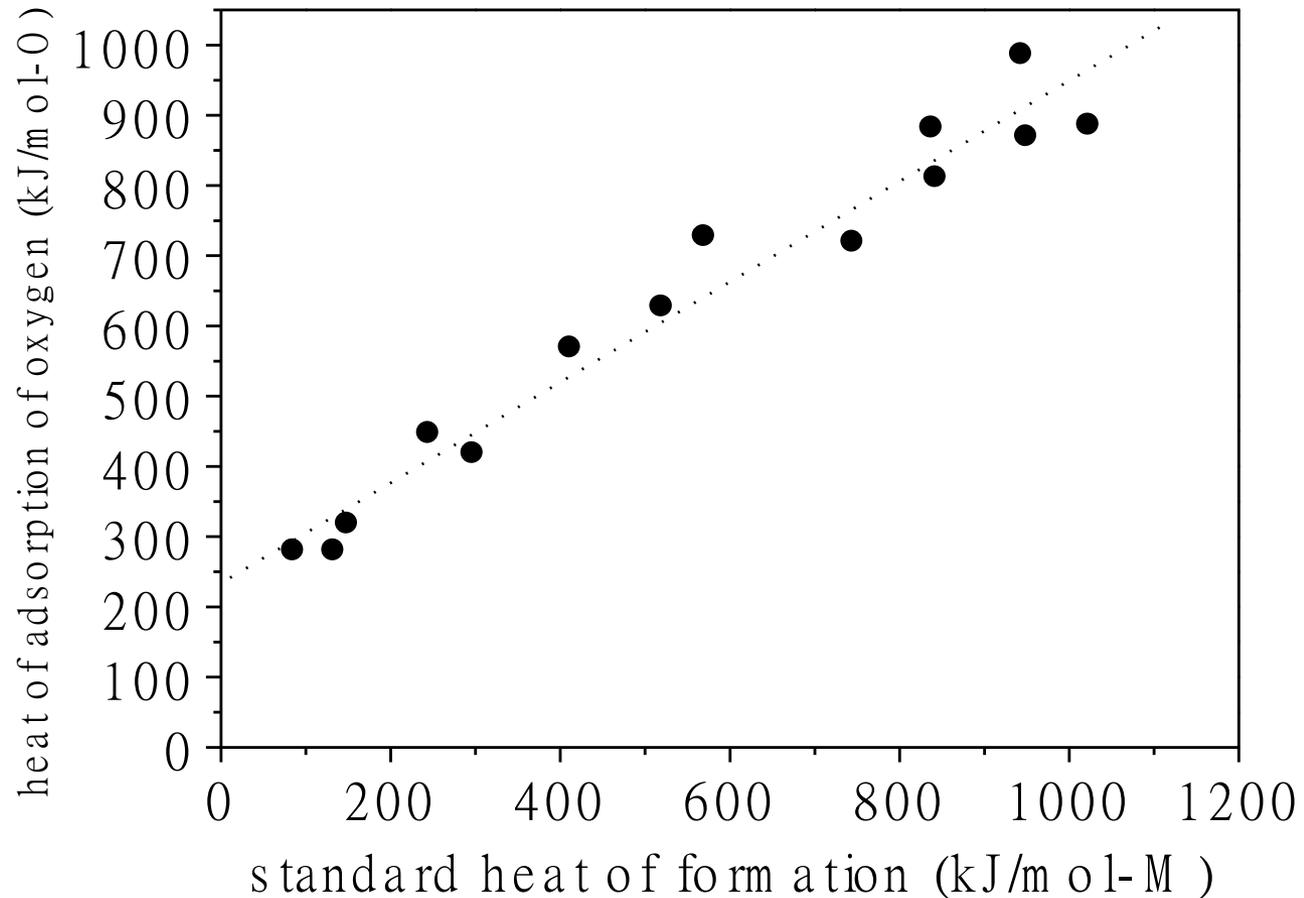
酸素分子



酸素吸着



酸素の吸着エネルギー H_{ads} (kJ/mol-O) を 酸化物の生成エンタルピー H_{form} (kJ/mol-M) から下式によって見積もる

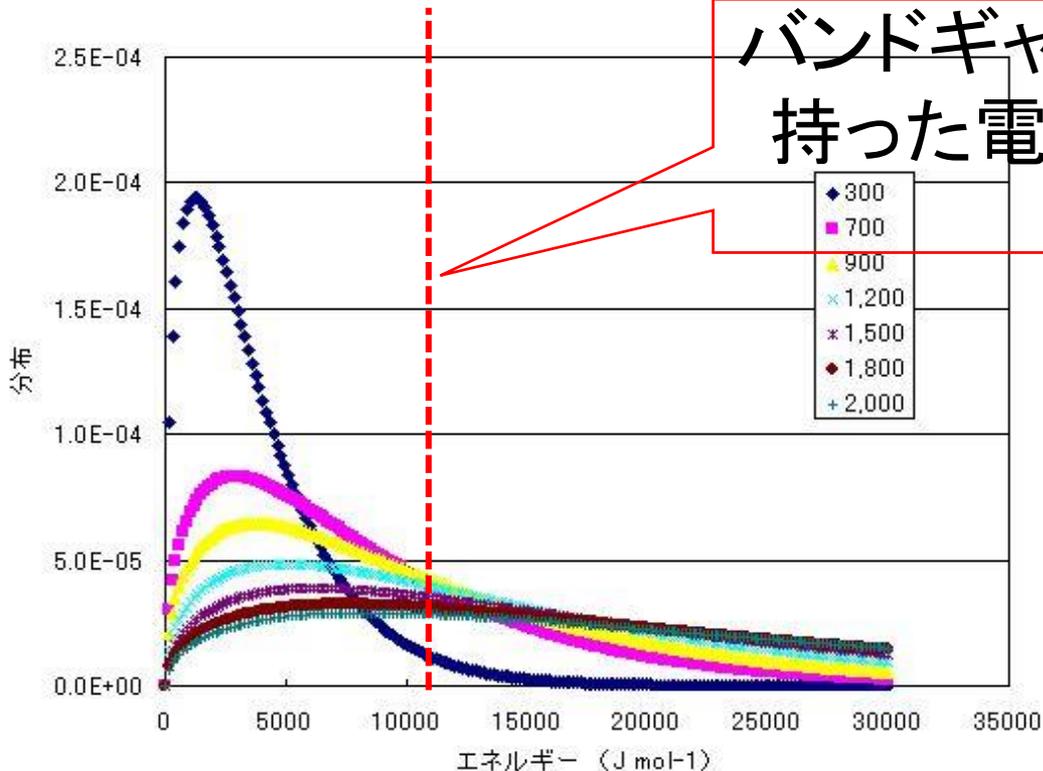
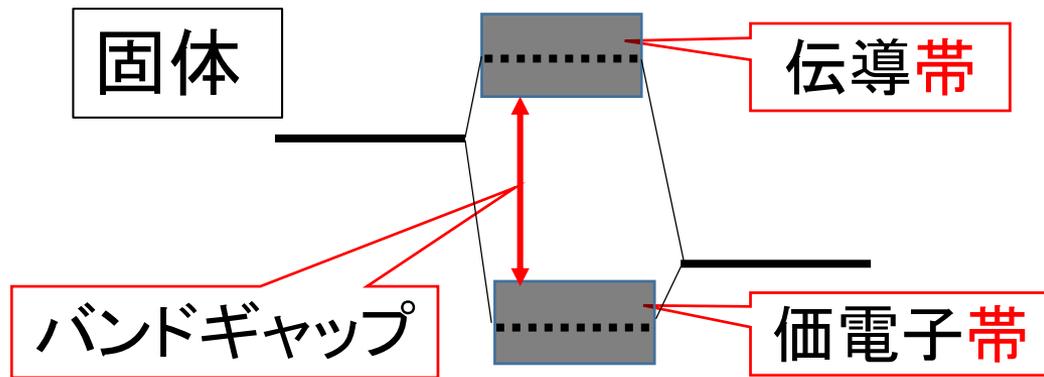


J. Vac. Sci. Technol. A 32, 021102 (2014).

$$H_{ads} \text{ (kJ/mol-O)} = 0.715 \times H_{form} \text{ (kJ/mol-M)} + 234$$

バンドギャップの大きさと電気伝導率

電子のエネルギー分布：
理想気体分子のエネルギー分布と同じ：ボルツマン分布



バンドギャップを超えるエネルギーを持った電子は、熱的に伝導帯に励起されている

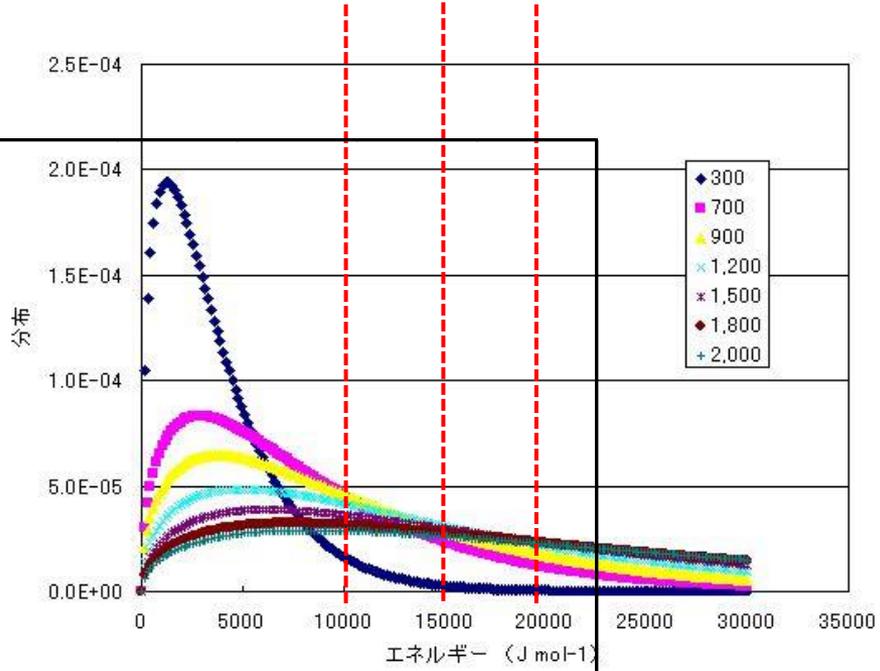
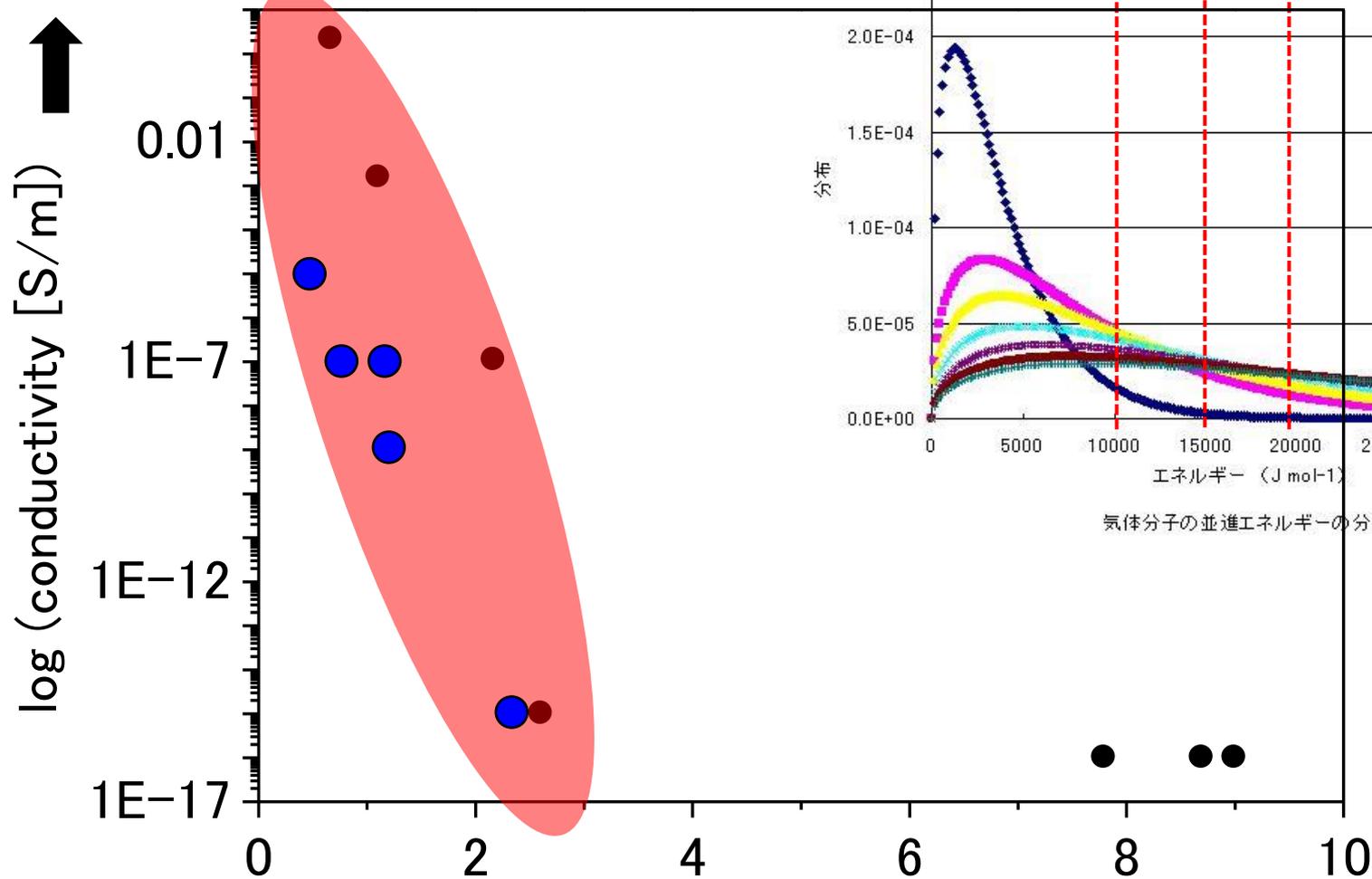
バンドギャップが小さい半導体には、伝導帯に電子がいる

電気が流れる

気体分子の並進エネルギーの分布

バンドギャップの大きさと電気伝導率

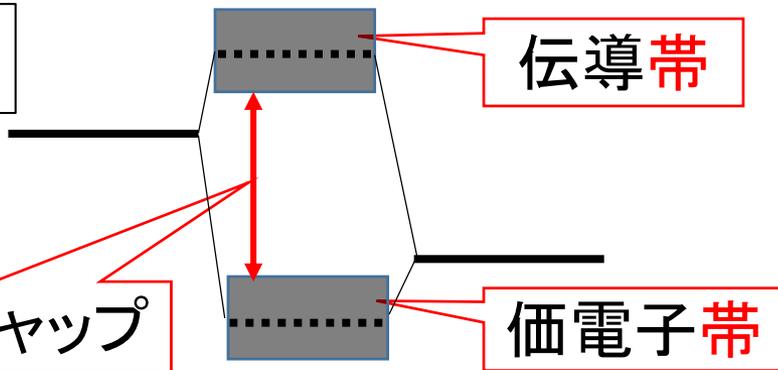
電気が良く流れる



● : 酸化物、● : 有機物

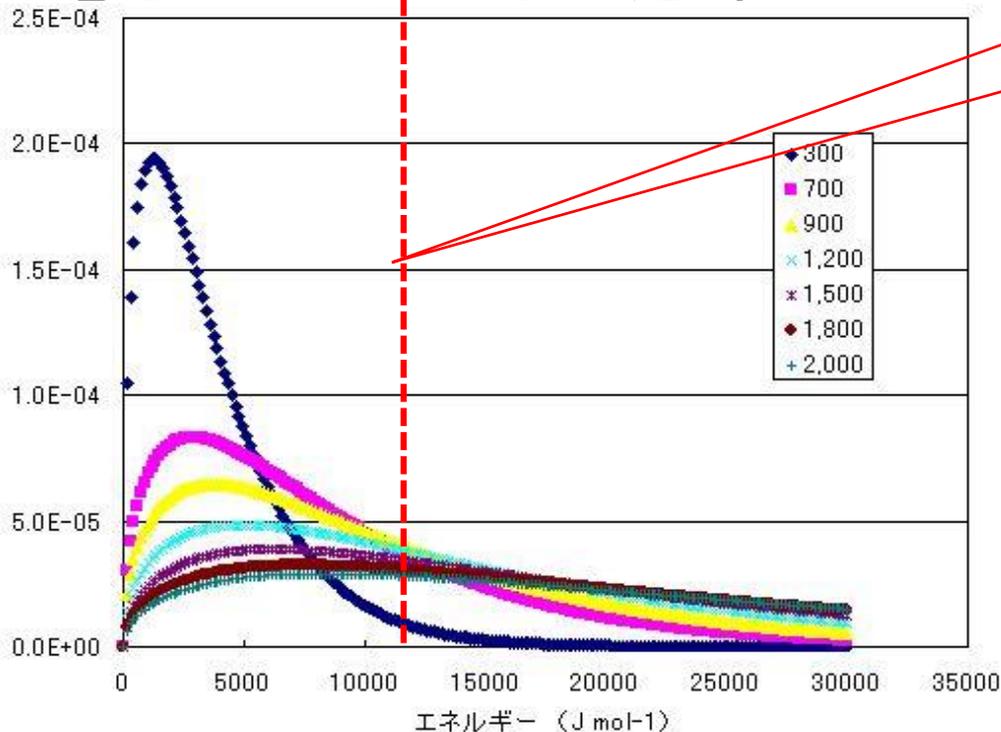
バンドギャップの大きさと色(光学スペクトル)

固体



価電子帯の電子は、バンドギャップを超えるエネルギーの光を吸収して伝導帯に励起される

電子のエネルギー分布



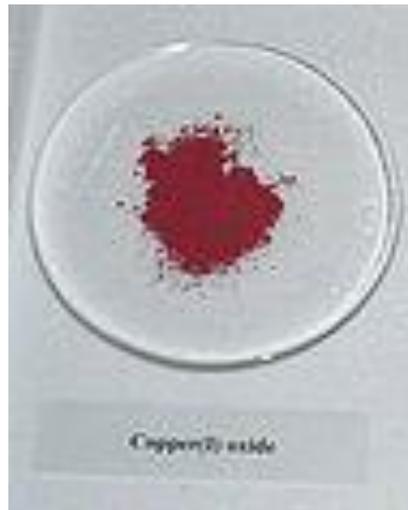
気体分子の並進エネルギーの分布

バンドギャップが大きい半導体は、波長の短い光のみ吸収。バンドギャップが小さい半導体はほとんどすべての波長の光を吸収→赤～黒っぽい。

酸化銅(II) CuO
バンドギャップ 1.2eV



酸化銅(I) Cu_2O
バンドギャップ 2.2eV



WO_3 : 2.7eV



CdO : 2.18eV



Fe_2O_3 : 2.2eV

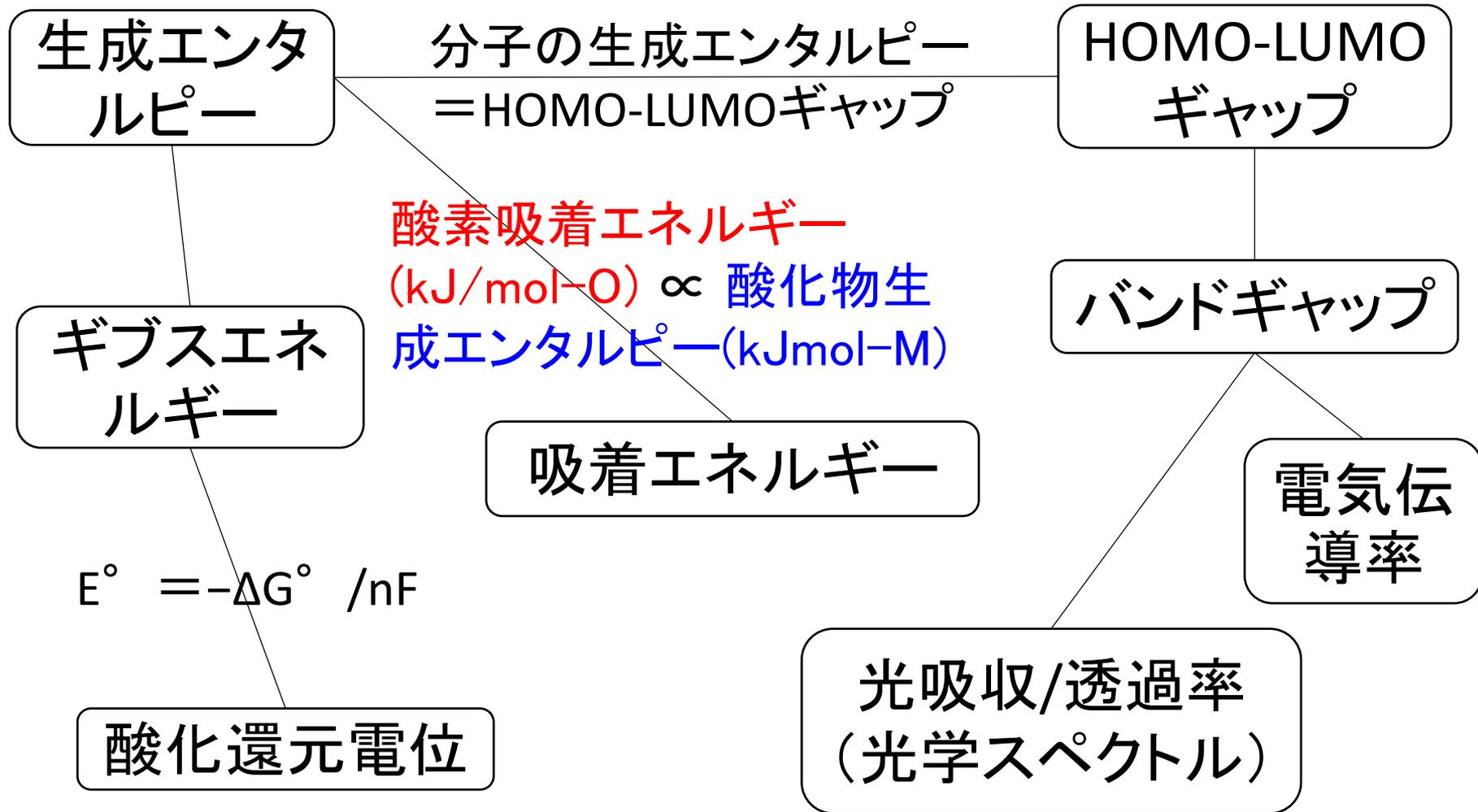


PbO : 2.8eV



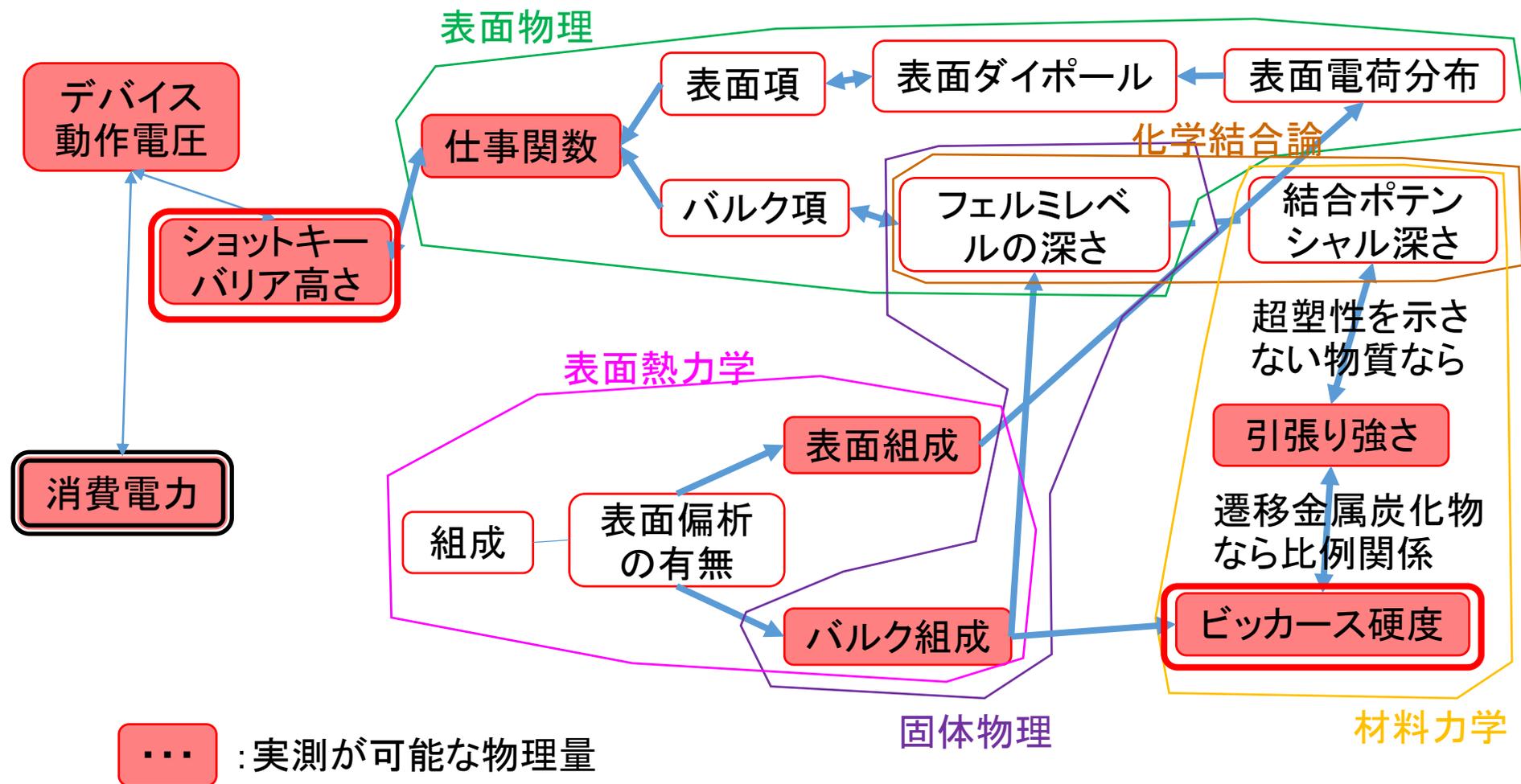
写真はWikipediaから

物性間の関係図: 物質の性質を表す特性(数値が入っているわけではない)の間関係を表すネットワーク図



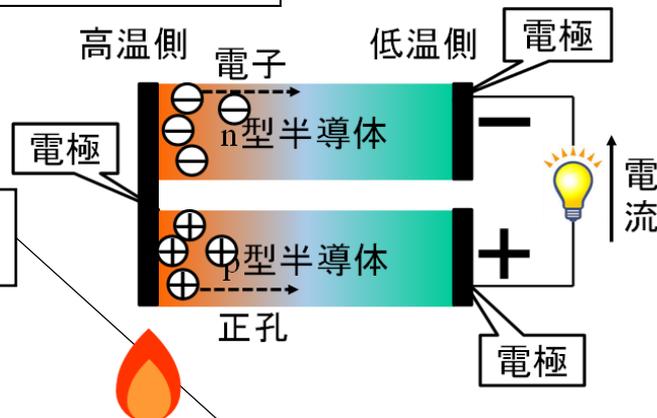
実際に適用した例

硬さからデバイス特性を推測する



熱電材料で言われるトレードオフは避けられる

電気伝導率の周りを探索した場合の結果の模式図



熱電材料の性能 $Z = S^2 \sigma / \kappa$

トレードオフと
言われる理由

ゼーベック係数 S

電気伝導率 σ

熱伝導率 κ

温度による電位差

キャリア
密度

移動度

電子熱
伝導率

格子熱
伝導率

フェルミ
分布関数

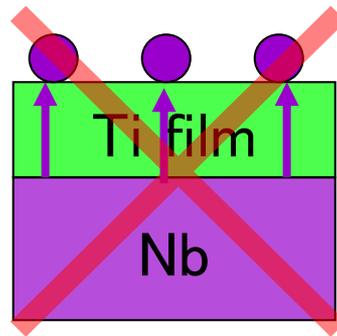
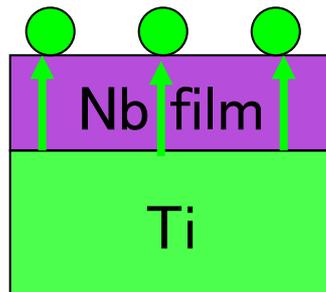
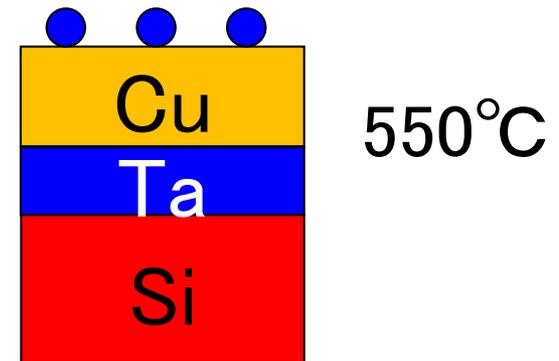
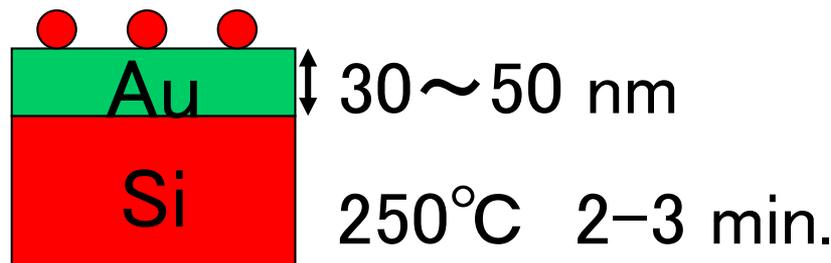
電子状態
密度

トレードオフを
避ける制御
ルート

フォノン散乱

電子の有効質量

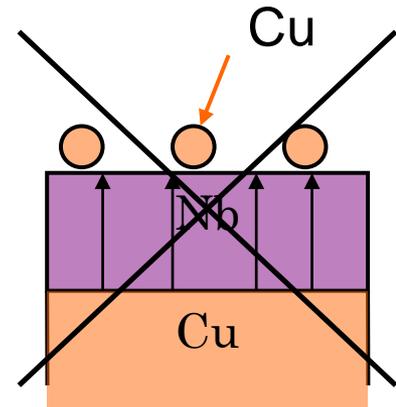
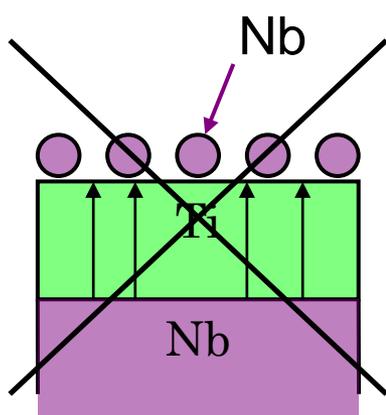
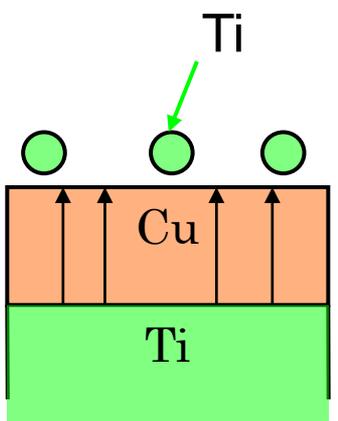
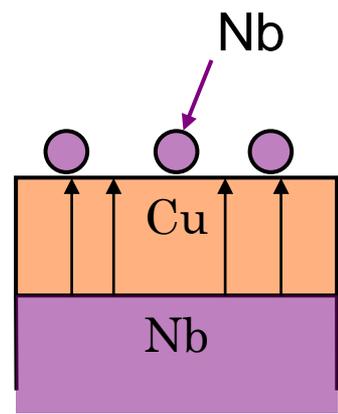
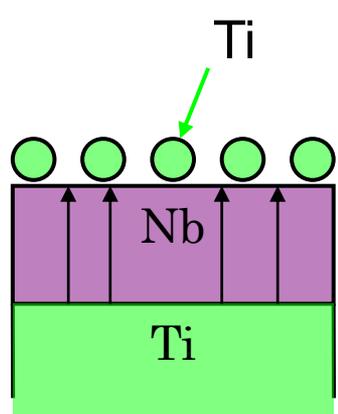
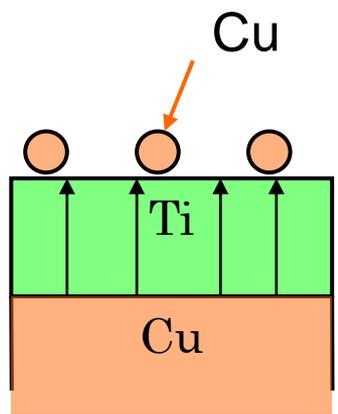
薄膜における下地元素の表面偏析の予測



数か月実験してようやく一つの系の実験データが取れる
 →系を変えて実験してうまく行く系を見つけるのは非現実的
 →予測してできるだけ実験を減らす

系に依らない、一般的な現象の予測方法の開発
 →他の研究者も利用できるソフトとして公開

偏析の有無は基板と膜の元素の組み合わせに依存



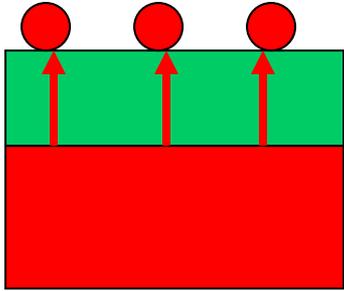
バルク
状態図

金属間
化合物

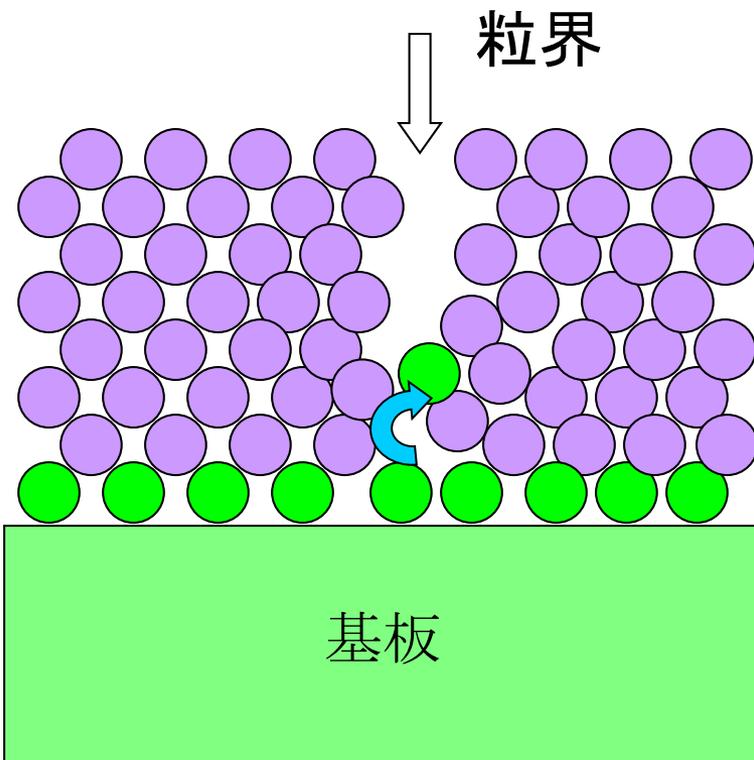
合金(固溶)

相分離

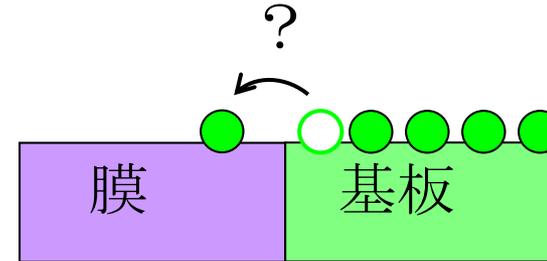
偏析の有無をどうやって予測するか？



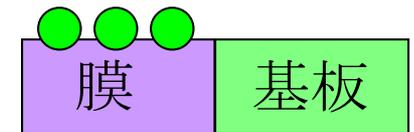
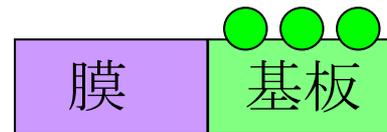
M.Yoshitake, Y.Aparna and K.Yoshihara, J. Vac. Sci. Technol., A 19, 2001, pp. 1432-1437.



基板元素が偏析するかどうか？

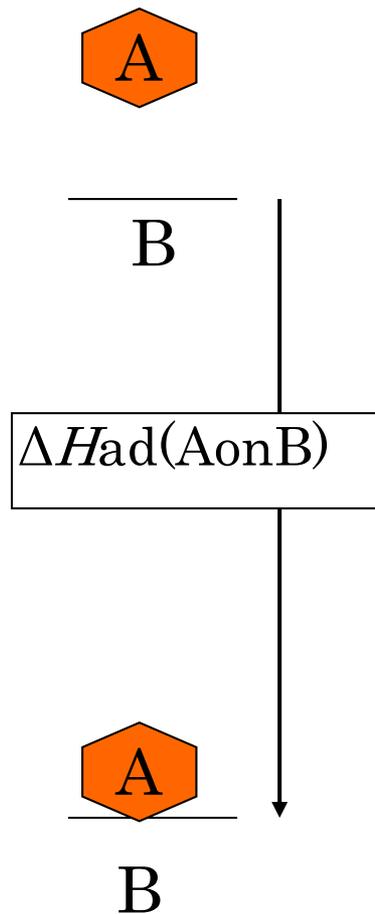


どちらがエネルギー的に安定か？



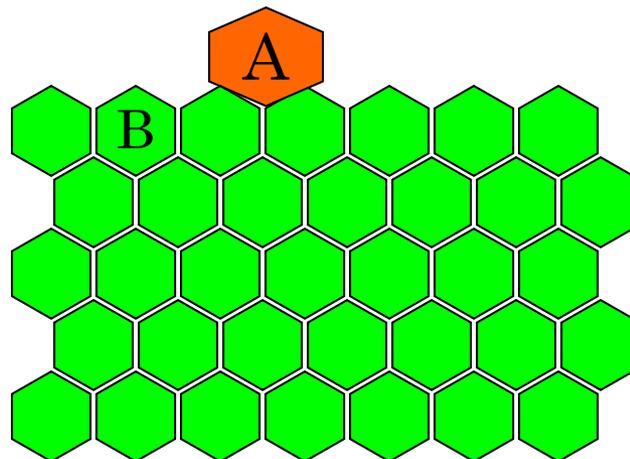
吸着エネルギーの大小を見積もる

吸着エネルギーの推定：Miedemaによる半経験的方法 (非常に基本的な物理量だけから推定できる)



気体状の原子A : Aの表面積分の表面エネルギー = $\Delta H_{\text{vap}}(A)$

Aの表面積 : (Bと接触していない面積)
 Bの表面積変化 : - (Aとの接触面積)
 界面エネルギー : 混合エンタルピーのA-B接触面積分



$$\Delta H_{\text{ad}}(A_{\text{on}}B) = -F \cdot \gamma(B) \cdot S_B + (1 - F) \cdot \gamma(A) \cdot S_A + F \cdot \Delta H_{\text{sol}}(A_{\text{in}}B) - \Delta H_{\text{vap}}(A)$$

実験結果 vs 予測

27通りのうち、不一致は5通りのみ

実際には、吸着エネルギーには結晶方位依存性などがあるはず。
→ 大体の予想をするには、簡単なパラメータのみからかなり良い一致

film	substrate	adsorption energy of substrate atom (kJ/mol)		prediction	experiment
		on film	on substrate		
Al	Ti	345	365	NO	NO
Ti	Al	384	270	YES	YES
Al	Cr	253	305	NO	NO
Cr	Al	377	270	YES	YES
Ti	Cr	295	305	(NO)	NO
Cr	Ti	410	365	YES	YES
Al	Cu	243	365	NO	NO
Cu	Al	332	270	YES	NO
Ti	Cu	300	265	YES	YES
Cu	Ti	385	365	YES	YES
Cu	Ni	303	340	NO	NO
Al	Nb	494	582	NO	NO
Nb	Al	415	270	YES	YES
Ti	Nb	533	582	NO	NO
Nb	Ti	410	365	YES	YES
Nb	Cr	330	305	YES	NO
Cu	Nb	511	582	NO	YES
Nb	Cu	320	265	YES	NO
Zr	Al	390	270	YES	YES
Zr	Ti	357	365	(NO)	YES
Zr	Cr	290	305	NO	YES
Zr	Cu	310	265	YES	YES
Zr	Nb	527	582	NO	NO
Cu	Fe	250	315	NO	NO
Fe	Cu	285	265	YES	YES
Nb	Fe	345	315	YES	YES
Zr	Fe	310	315	(NO)	YES

表面偏析の予測: <http://surfseg.nims.go.jp/>

First, select A or B,
then choose element
of A(substrate) or B
(film) from the periodic
table.

B (Film) Ti

A (Substrate) Cu

Choose other elements

Choose annealing atmosphere

- vacuum or inert
- oxygen
- hydrogen

Calculate

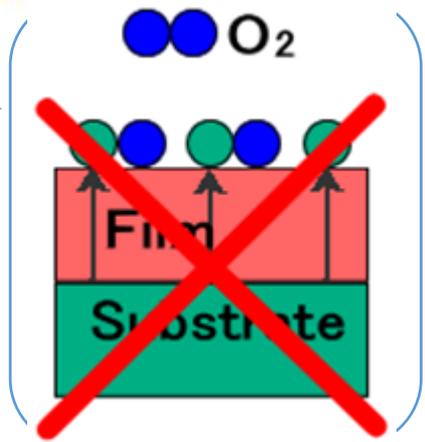
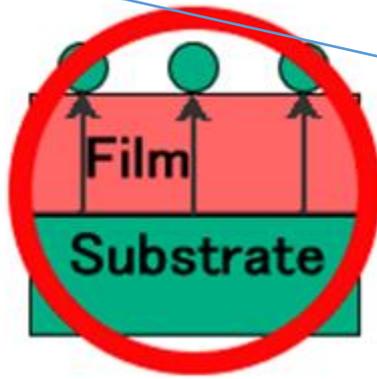
	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	1 H															2 He		
2	3 Li	4 Be									5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3	11 Na	12 Mg									13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	L	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	A															
	L	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
	A	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

Top

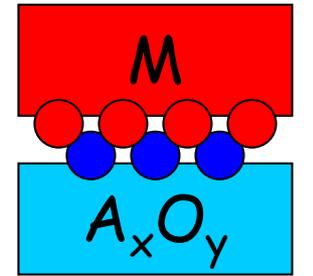
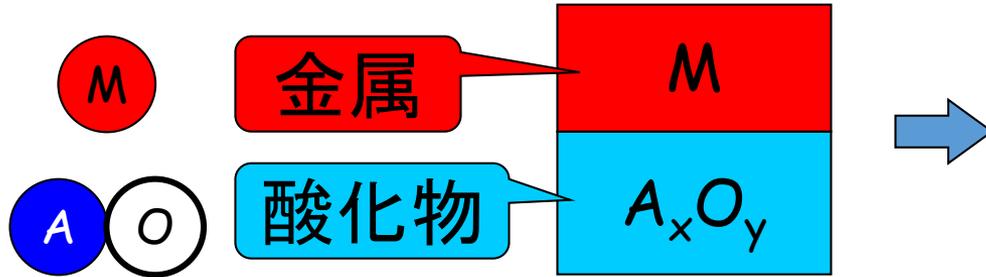
結果が図示される

現実的な組合せ
~5000通り予測

Adsorption energy
Cu on Ti : 310 kJ/mol
Cu on Cu : 265 kJ/mol

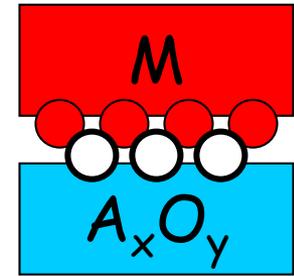


金属 - 酸化物界面の結合予測



金属終端
A-M結合

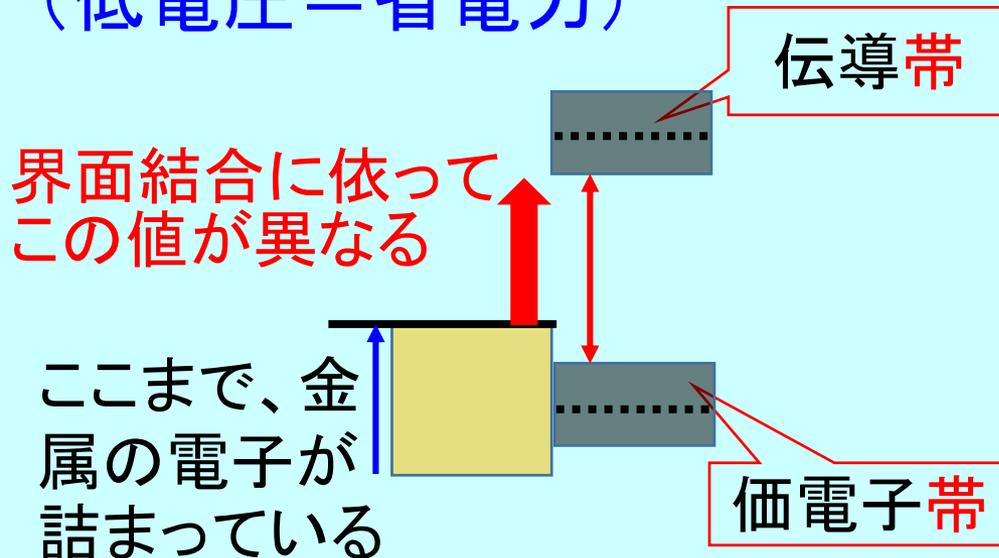
OR



酸素終端
O-M結合

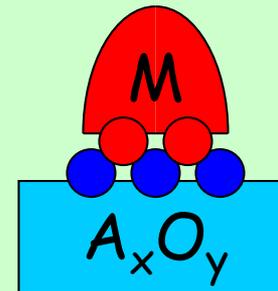
どちらの界面結合になるかが重要

金属の電子を半導体の伝導帯
へ励起 = デバイスの動作電圧
(低電圧 = 省電力)



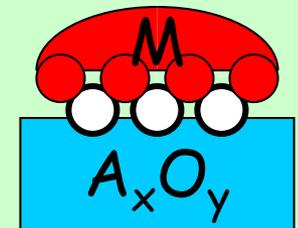
濡れ性

濡れ性低い



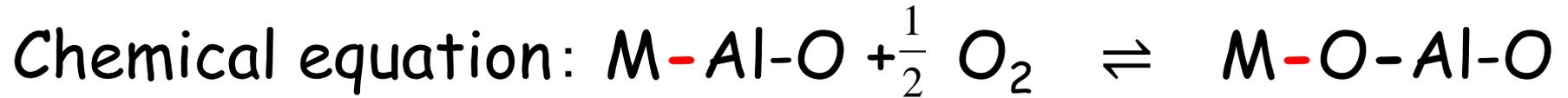
金属終端
A-M結合

濡れ性高い



酸素終端
O-M結合

化学平衡式(純金属)



Equilibrium constant:
$$K = \frac{a(M-O-A-O)}{a(M-A-O) p(O_2)^{\frac{1}{2}}}$$

$K = \exp(-\Delta G/RT)$: $M-A$, $M-O$: binding energy

界面形成時の酸素分圧の影響を無視すると、 $M-A$ の結合エネルギーと $M-O$ の結合エネルギーとの大小で、平衡が決まる。

どうやって、 $M-A$ 、 $M-O$ 結合エネルギーを見積もるか？
→Miedemaの吸着エネルギーと酸素の吸着エネルギー(酸化物の生成エンタルピーと良い相関がある)の値を使う

M-Al結合エネルギーの近似値

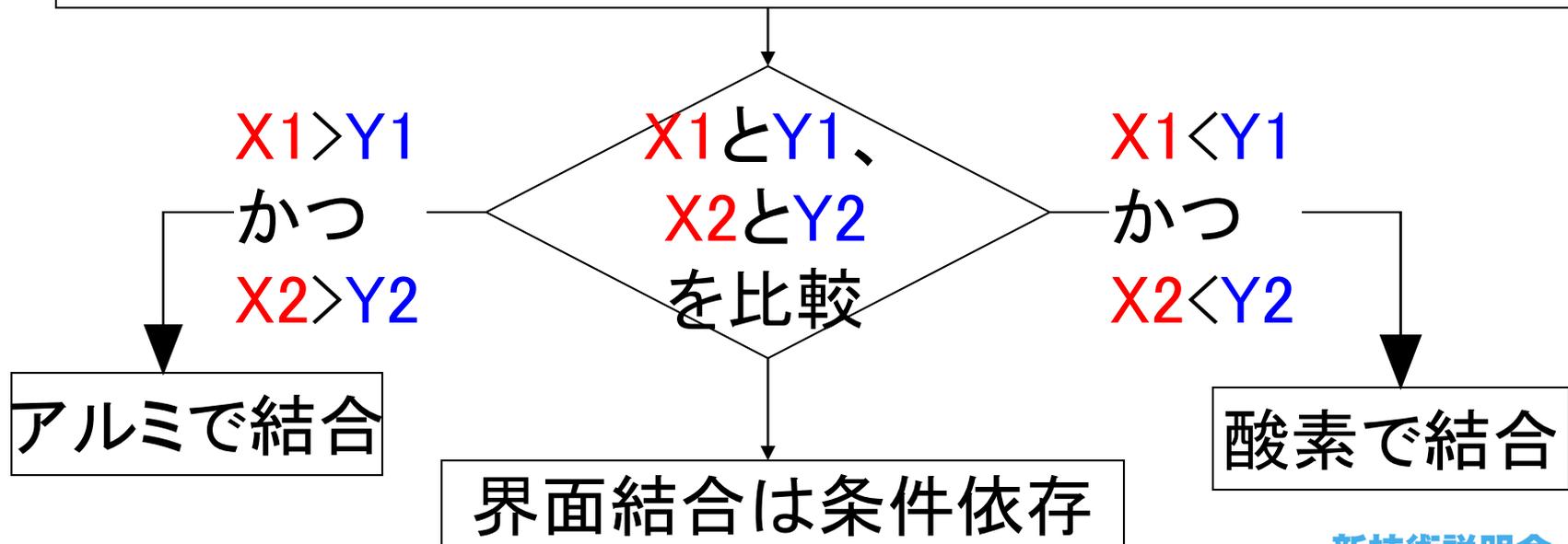
方法1) 金属M上へのAlの吸着エネルギー = $X1$

方法2) (金属M上へのAlの吸着エネルギー) - (金属M上へのMの吸着エネルギー) = $X2$

M-O結合エネルギーの近似値

方法1) 金属M上への酸素の吸着エネルギー = $Y1$

方法2) (金属M上への酸素の吸着エネルギー) - (酸素分子の解離エネルギー) / 2 = $Y2$



純金属M-アルミナ界面で予想される界面結合(界面 終端元素)

X1

X2

Y1

Y2

M	M-Al結合エネルギー (kJ/mol-M)		M-O結合エネルギー (kJ/mol-O)		M-Alと M-Oの 大小関係	予想される 界面終端 元素	文献の実 験結果
	(AlonM)	(AlonM)- (MonM)	(OonM)	(OonM)- 1/2O ₂			
Ti	384	21	908.96	662.43	<	O	O
V	400	-1	788.34	541.8	<	O	O
Cr	377	74	641.44	394.91	<	O	O
Fe	392	76	528.65	282.12	<	O	O
Co	408	73	446.36	199.82	<	O	O
Ni	407	67	409	162.46	<	O	O
Cu	332	67	346.47	99.93	<	O	O
Nb	409	-173	913.07	666.54	<	O	O
Rh	447	12	356.62	110.09	~	Al, O	
Pd	413	130	295.06	48.53	>	Al	
Ag	280	58	242.69	-3.85	>	Al	Al, O
Ir	474	-61	429.98	183.45	~	Al, O	
Pt	450	2	329.31	82.77	~	Al, O	

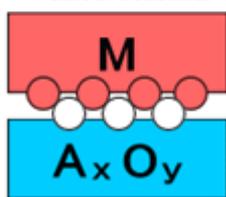
J. Vac. Sci. Technol. A **32**, 021102 (2014)

純金属-酸化物界面

Choose element of M or A_xO_y from the periodic table.

M	Cu
A_xO_y	Al ₂ O ₃
Calculate	

Without reaction



O-M bond

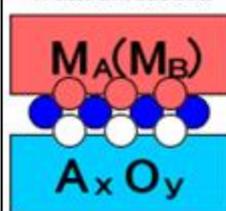
白玉 = 酸素原子を介して結合
Cu-Cu-O-Al-O-Al---

合金-酸化物界面

Choose element of M or A_xO_y from the periodic table.

	M_A	M_B
$M_A(M_B)$	<input checked="" type="radio"/> Cu	<input type="radio"/> Al
A_xO_y	Al ₂ O ₃	
Calculate		

Without reaction



A- M_A bond

青玉 = アルミ原子を介して結合
Cu(Al)-Al-O-Al-O-Al--

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	H															He		
2	Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
3	Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	L	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	A															
			L	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			A	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	H															He		
2	Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
3	Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	L	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	A															
			L	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			A	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

独立行政法人 物質・材料研究機構 が発信する 世界最大級の マテリアルデータベースサイト

データベース

基礎物性

- ▶ 高分子データベース (PolyInfo)
- ▶ 無機材料データベース (AtomWork)
- ▶ 電子構造計算データベース (CompES)
- ▶ 放射性物質の除去・回収技術のためのデータベース (READS)
- ▶ 中性子反応データベース (NeuTran)
- ▶ 界面熱伝達率データベース (ITC)
- ▶ 拡散データベース (Kakusan)
- ▶ 超伝導材料データベース (SuperCon)

エンジニアリング

- ▶ 金属材料データベース (Kinzoku)
- ▶ CCT線図データベース (CCTD)
- ▶ 材料リスク情報プラットフォーム (MRIP)
- ▶ 傾斜機能材料データベース (FGMs)

NIMS構造材料データシート オンライン

- ▶ クリープデータシート (CDS)
- ▶ 疲労データシート (FDS)
- ▶ 腐食データシート (CoDS)
- ▶ 宇宙関連材料強度データシート (SDS)
- ▶ データシート資料集
- ▶ 金属組織データベース (Kinso)

[印刷物の問い合わせ](#)

アプリケーションシステム

- ▶ 複合材料熱物性予測システム (CompoTher)
- ▶ 高分子物性推算システム
- ▶ **金属偏析予測システム (SurfSee)**
- ▶ **界面結合予測システム (InterChemBond)**
- ▶ 溶接熱履歴シミュレーション

ユーザ

新規ユーザ:

MatNaviの利用は無料ですが、ユーザ登録が必要です。(登録・検索・閲覧 無料)

▶ [新規ユーザ登録](#) [\[初めての方へ\]](#)

登録ユーザ:

利用するデータベースを選択し、各ページの[利用開始]からログインしてください。登録したE-mailアドレスとパスワードが必要です。

▶ [パスワードを忘れた方](#) ▶ [退会](#)

▶ [登録情報変更](#)

金属偏析予測システム

界面結合予測システム

MatNavi Search

search

AND OR あいまい検索

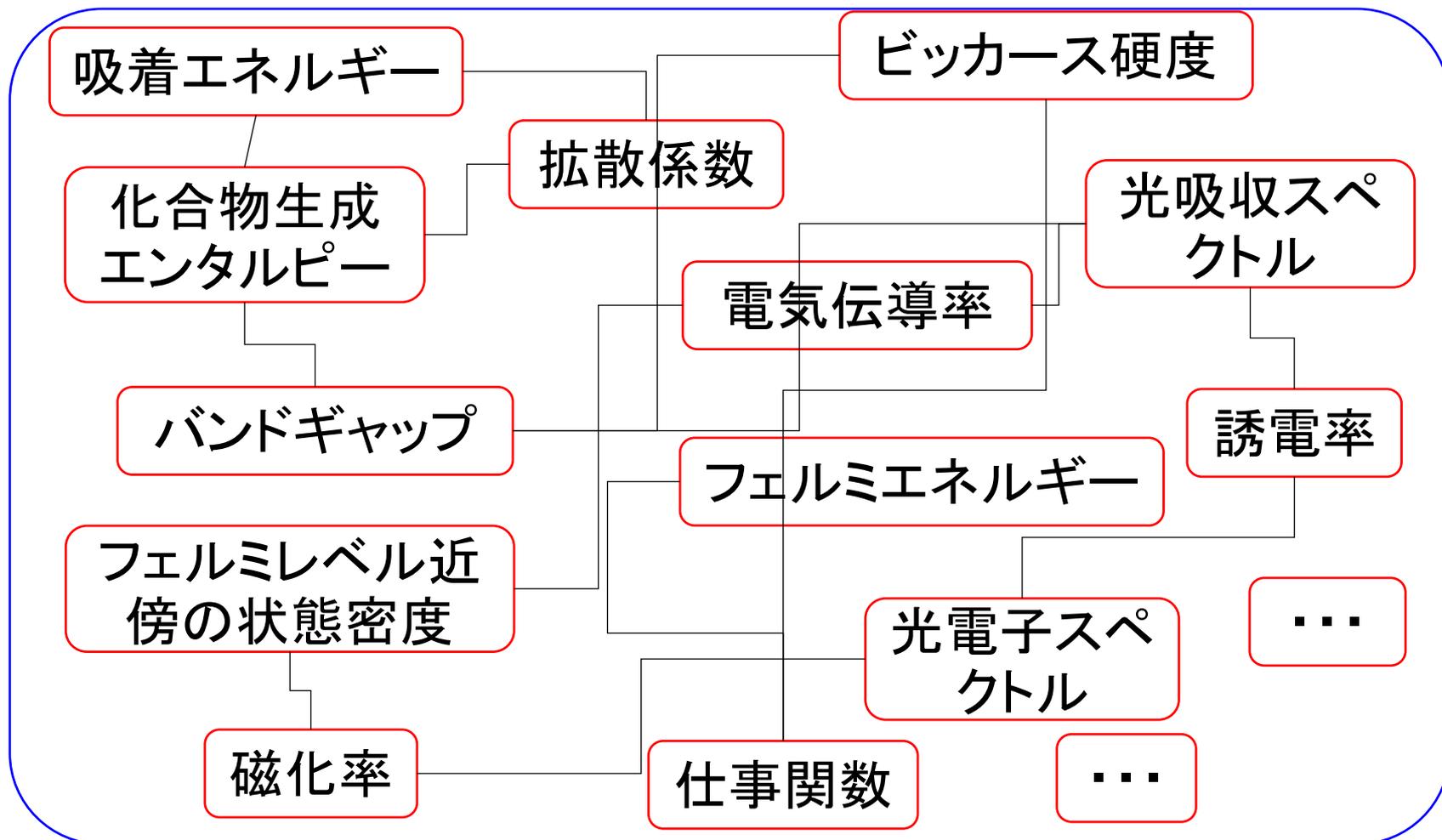
カテゴリ検索

- Material
- Element
- Alloy
- Ceramic
- Polymer

- Phase Transition
- Mechanical Properties

関係性のデータベース化と探索

様々な物性間の関係を、科学法則に基づいて関連付け、コンピュータがその関係性を使ってデータ検索・補間



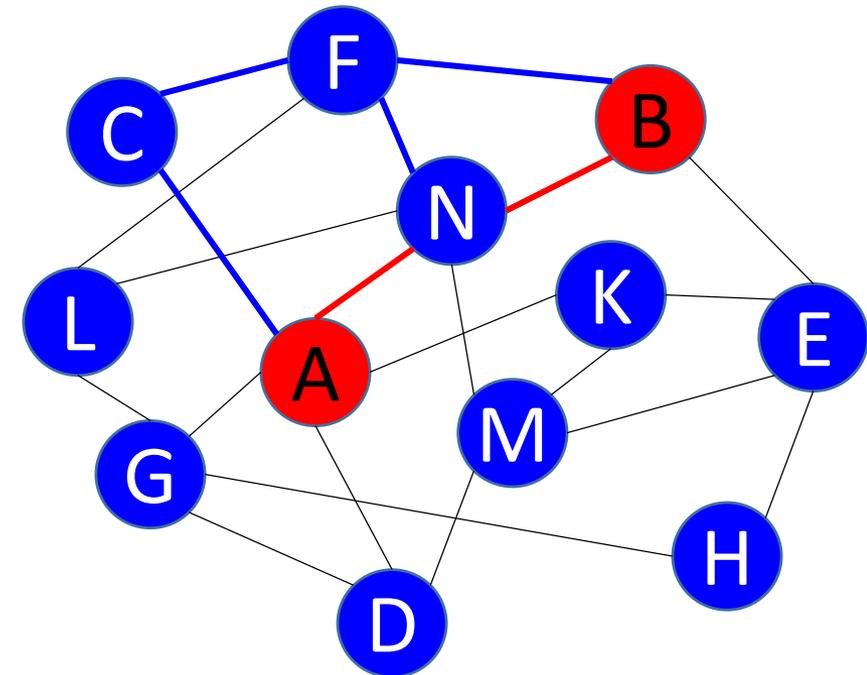
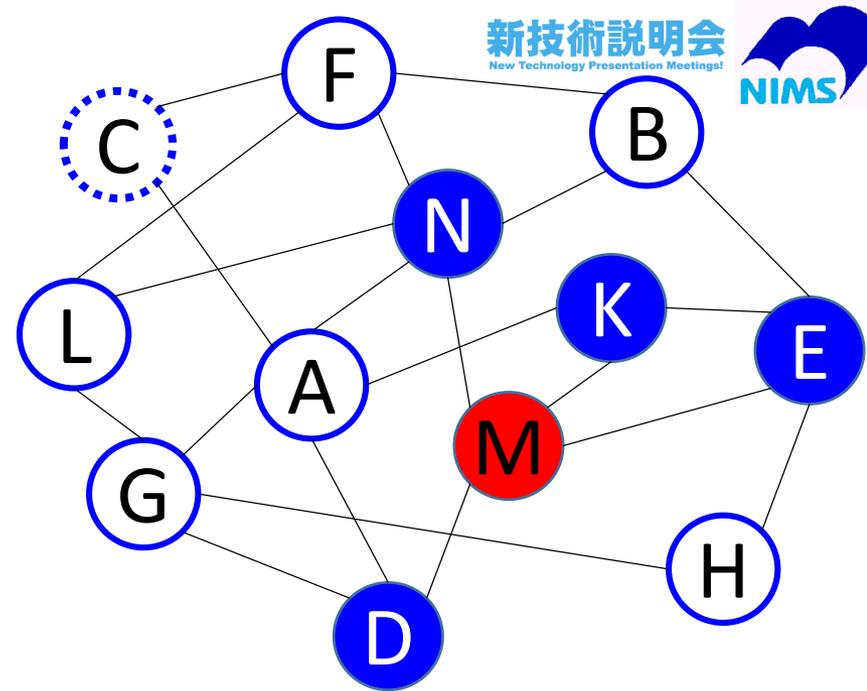
どの物性値があれば、別のどの物性値が推測できるか

探索の基本的な種類: 2つ

- ・物性Mの周辺の関係性
Mが別のどんな物性の影響を受けているか？
- ・物性Aと物性Bとの関係性
Aの値を大きくしようと材料を変えたら、思いがけずBの値が変化してしまった、どうして？

Choose search type

- ◎ search properties around (M)
within (n) connections
- ◎ path between (A) and (B)
 - shortest
 - within (i) connections
 - all paths

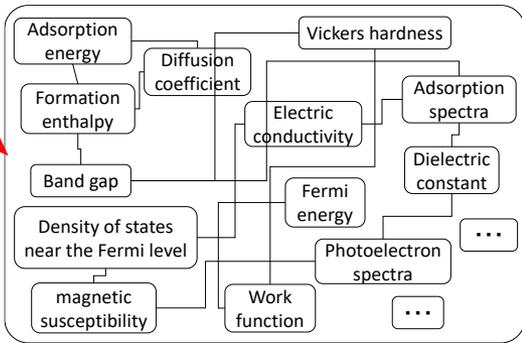


物性間関係性探索システム: 2017年春応用物理学会でデモ

<関係性の入力側>

Relations among various properties

吉武
が手
入力



① Represented as sets of relations between two properties

start_property	start_value	end_property	end_value	condition	condition_of_correlation	condition_of_correlation_line	unit	unit_line
density	ρ	electrical resistivity	ρ	∝	∝	∝	Ω·cm	Ω·cm
electrical resistivity	ρ	electrical conductivity	σ	∝	∝	∝	Ω ⁻¹ ·cm ⁻¹	Ω ⁻¹ ·cm ⁻¹
electrical conductivity	σ	thermal conductivity	κ	∝	∝	∝	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹
thermal conductivity	κ	diffusion coefficient	D	∝	∝	∝	m ² ·s ⁻¹	m ² ·s ⁻¹
diffusion coefficient	D	heat	Q	∝	∝	∝	J	J
heat	Q	density	ρ	∝	∝	∝	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³
density	ρ	electrical resistivity	ρ	∝	∝	∝	Ω·cm	Ω·cm
electrical resistivity	ρ	electrical conductivity	σ	∝	∝	∝	Ω ⁻¹ ·cm ⁻¹	Ω ⁻¹ ·cm ⁻¹
electrical conductivity	σ	thermal conductivity	κ	∝	∝	∝	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹
thermal conductivity	κ	diffusion coefficient	D	∝	∝	∝	m ² ·s ⁻¹	m ² ·s ⁻¹
diffusion coefficient	D	thermal conductivity	κ	∝	∝	∝	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹
heat	Q	diffusion coefficient	D	∝	∝	∝	m ² ·s ⁻¹	m ² ·s ⁻¹
density	ρ	FEET	ρ	∝	∝	∝	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³
FEET	ρ	1000	ρ	∝	∝	∝	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³
1000	ρ	AAA	ρ	∝	∝	∝	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³
AAA	ρ	AAA	ρ	∝	∝	∝	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³

② Database of the relations

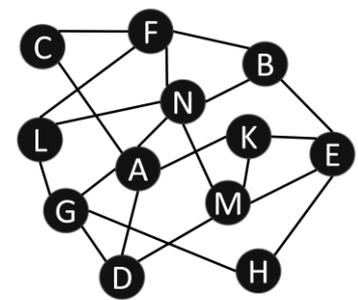


<関係性探索側(ユーザー)>

- ④ - Search **on** presence or absence of relation
- Search **on** the manner of relation

Query
Answer based on graph theory

③ Graph representation of the relations

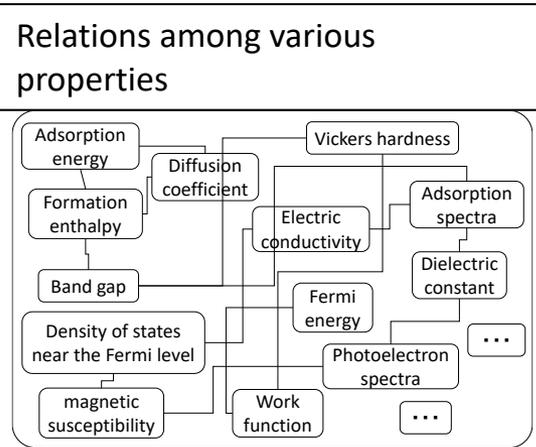


表面と真空, 61 (2018) 200-205.

マテリアルキュレーション[®]支援システム(プロトタイプ)

2019年春応用物理学会で発表(共同研究:富士通/富士通総研)

<関係性の入力側>



①

Represented as sets of relations between two properties

start_property	end_property	correlation	condition_of_correlation	condition_of_correlation_limit
Density	electrical resistivity	D	Y	best
electrical resistivity	electrical conductivity	D	Y	best
electrical conductivity	thermal conductivity	C	Y	best
thermal conductivity	diffusion coefficient	D	Y	best
diffusion coefficient	test	A	in	best
test	Density	D	in	unknown
electrical resistivity	Density	D	Y	unknown
electrical conductivity	electrical resistivity	D	in	unknown
thermal conductivity	electrical conductivity	C	in	unknown
diffusion coefficient	thermal conductivity	C	in	unknown
Test	diffusion coefficient	D	in	unknown
Density	TSC	A	unknown	
isba	isb	in	in	
BBB	AAA	D	Y	best

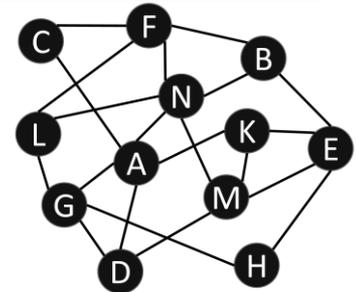
②

Database of the relations



③

Graph representation of the relations



関係性半自動抽出

文書

もっと広く多くの分野から関係性を抽出するために

自然言語処理

<関係性探索側(ユーザー)>

④

- Search **on** presence or absence of relation
- Search **on** the manner of relation

Query

Answer based on graph theory

マテリアルキュレーション支援システム 起動画面

The screenshot displays the Fujitsu Material Curation Support System interface. At the top left is the Fujitsu logo, and at the top right is the NIMS logo. The interface features a search control panel with the following elements:

- Path search:** Includes fields for "From" (set to "選択なし"), "Contain" (set to "選択なし"), and "To" (set to "選択なし"). A "Depth" dropdown is set to "Shortest Path + 0".
- Network:** Includes a "Keyword" field (set to "選択なし") and a "Depth" dropdown set to "1".
- A "Search" button is located to the right of the Network section.

Below the search panel, two network diagrams illustrate the search results:

- Left Diagram:** A network graph with nodes A through N. Nodes A and B are highlighted in red. A path is shown in blue, starting from node C and ending at node A.
- Right Diagram:** The same network graph. Node C is highlighted with a dashed blue circle. Node M is highlighted in red. A dashed blue arrow points from node C to node M.

Red and blue dashed lines connect the search parameters to the corresponding nodes in the network diagrams. A red arrow points from the "From" field to node A, and a blue arrow points from the "To" field to node B. Another blue arrow points from the "Keyword" field to node C, and a blue arrow points from the "Depth" field to node M.

マテリアルキュレーション支援システム
体験会(2019年2月)

Path search: From polarizability Contain 選択なし To yield-strength Shortest Path + Depth 0

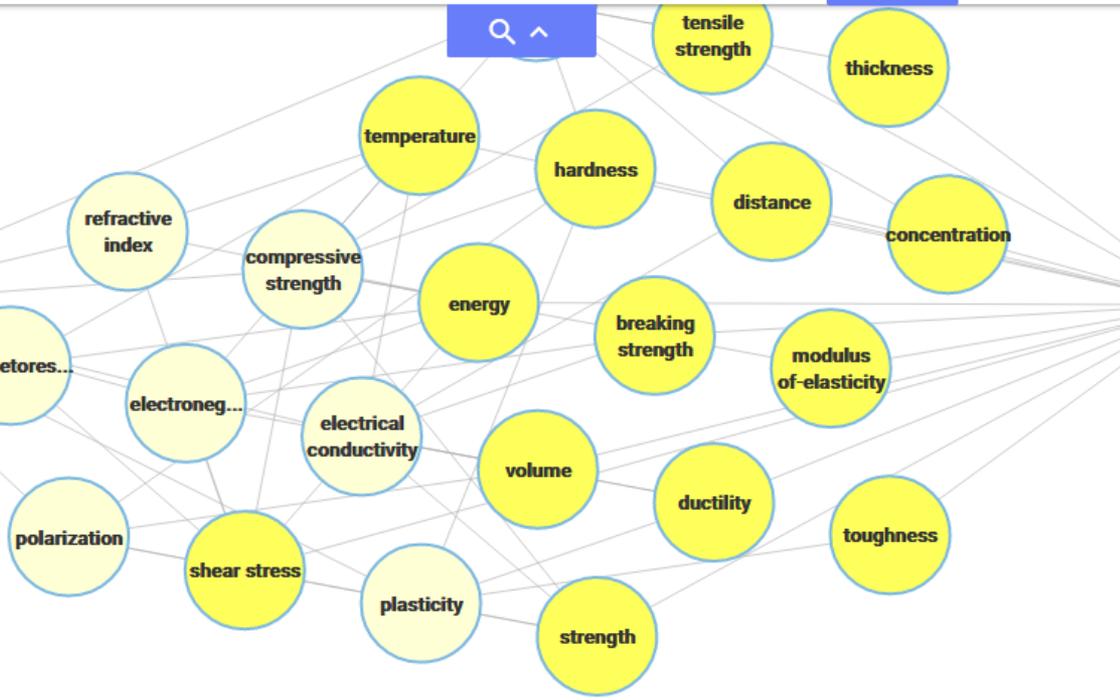
Network: Keyword 選択なし Depth 1

Search



[From] polarizabi...

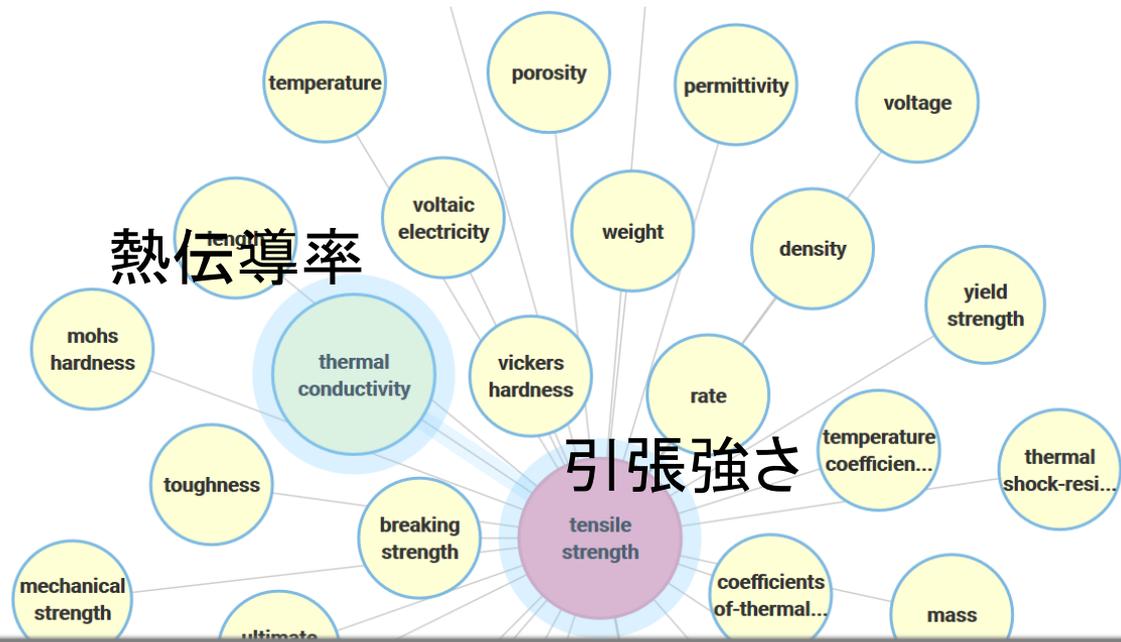
[To] yield strength



分極率
電気的性質

降伏強度
材料力学
(機械的性質)

物性同士をつなぐ線をクリックすると、そのつながりが記載された書籍名と、つながりを抽出した文章が表示される



詳細情報



【ノード情報】

テキスト：OCR_MaterialsHandbook_Springer_17.txt

【エッジ情報】

tensile-strength young fs-modulus thermal-conductivity and permittivity etc .

現状：プロトタイプなので、①用いている**サーバーの性能**が低い、②**デモ用の通信回線**に制限がある、などの理由により、読み込ませた**文献は9冊**だけで、抽出された**物性は約2000個**のみ。

まだ、実用に耐えるだけの規模のデータベースではない。商用化へ踏み出せれば、ピックアップ済みの文献200冊以上を読み込ませ、大量の（自然言語データ）処理により、同義語などの整理も可能になり、抽出される物性の数も増え、十分なつながりが得られる。

同時に、自然言語処理の技術も向上中。

関連する知的財産権

- 発明の名称 探索システムおよび探索方法
- 出願番号 PCT/JP2019/030108
- 公開番号 WO2020/039871
- 発明者 吉武 道子

- 発明の名称 探索システム、探索方法および物性データベース管理装置
- 出願番号 PCT/JP2016/086739
- 公開番号 WO2017/221444
- 発明者 吉武道子、柳生進二郎、知京豊裕、桑島功

お問い合わせ先

国立研究開発法人物質・材料研究機構 外部連携部門 企業連携室

企業様向け総合窓口HP（スマホ対応）

<https://technology-transfer.nims.go.jp/>



企業様向けの総合窓口です。各種お問い合わせ・ご相談などお気軽にご連絡ください。



基礎研究を社会へつなげる

こちらは、企業様向けの総合窓口です。
NIMSは技術相談、共同研究、装置利用など、
企業様の多様なご要望に対応しております。



- 技術指導・業務実施**
研究者からアドバイスが欲しい
- 試料貸与**
NIMSの研究試料（サンプル）を
評価してみたい
- 装置利用**
NIMSの持つ最先端設備を使って
評価・分析を行いたい
- 実施許諾**
特許やノウハウをライセンスしてほしい
- 共同研究**
NIMSの研究者と一緒に研究がしたい
- その他**