

科学原理を分野横断的に活用して材料開発：マテリアルキュレーション®

(物材機構) ○吉武 道子

Interdisciplinary Utilization of Scientific Principles for Materials R&D: Materials Curation®
(National Institute for Materials Science) ○Michiko Yoshitake

Materials science field is divided into many specific regions, and knowledge out of one's specialty is not utilized fully, which prevents efficient R&D of materials. We have proposed a method of interdisciplinary utilization of scientific principles in materials science (solid state physics, polymer science, materials mechanics, chemical thermodynamics, etc.). To support the interdisciplinary utilization of scientific principles, a prototype of database and its search tool of materials property relationship has been developed by a collaboration with a company. This system (database + search tool) makes the users notice relations among various materials properties and help to discover break-through materials and helps machine learning by suggesting descriptors and giving hints for analyzing the results.

Keywords : Material Property; Relationship; Scientific Principles; Database; Search System

材料科学分野では専門分野の細分化が進んで、ある分野で常識的な知識もちょっと専門分野が異なると全く知られず、そのために不要な実験を行っている場合が散見される。また、画期的な発見（金属を全く使わないカーボンアロイ触媒のような）は、異分野の知見を組み合わせることで実現することが多い。さらに、最近のサステナブルな製品開発においては、従来用いていた材料の大胆な置き換えが必要になる場合も多い。このように異分野の知見を組み合わせることの重要性は高まっている。また昨今、実験・計算による数値データの機械学習による材料開発、及び機械学習とロボット実験を組み合わせた自律実験による開発加速が盛んになっている（図1の青色ループ）が、その際にどのような材料のどのようなデータ（記述子）を入力すればよいか、見つかった最適な材料がどうしてよいかの理解については、人の知識と経験が必要である（図1の赤線）。

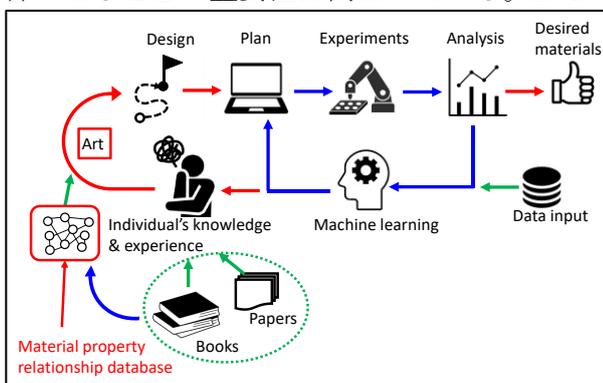


図1 機械学習も組み合わせた材料研究開発のプロセス概念図

そこで、材料関係の専門分野の教科書などから、ある物性がどのような要因によって決定づけられるかという関係性を分野横断的に利用する手法、「マテリアルキュレーション®」を提案し、著者自身、様々な材料開発や特性予測に用いてきた¹⁾。関係性の簡単な一例を図2に示す。この例では、電池特性の指標である酸化還元電位が光学特性（色）から推測できることが示されている（発色のメカニズムに依存するが）。

このような関係性を、広い分野から集めてデータベース化し、ある物性と別の物性との関係性が検索できるシステムを考案し(図3)特許化した。この特許群を実装するために企業と共同研究を行い、異なる分野の専門書十数冊を用いた物性間関係性の探索システムのプロトタイプ版を開発した。図4に示したのはプロトタイプ版の画面の一例で、**surface tension** と繋がっている物性として **solubility parameter** を見つけ、さらに繋がっている **solubility**、**density** と関係性を見つけた例である。実際に NIMS の PoLyInfo という高分子データベースで **surface tension** と **density** の数値の相関プロットを調べると、良い相関があることが分かった。

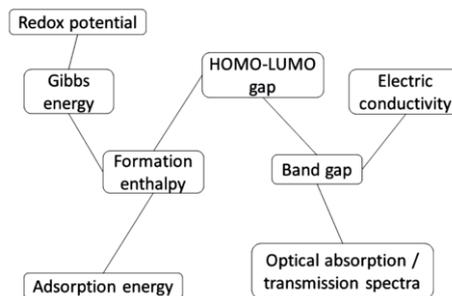


図2 物性間の関係性の一例

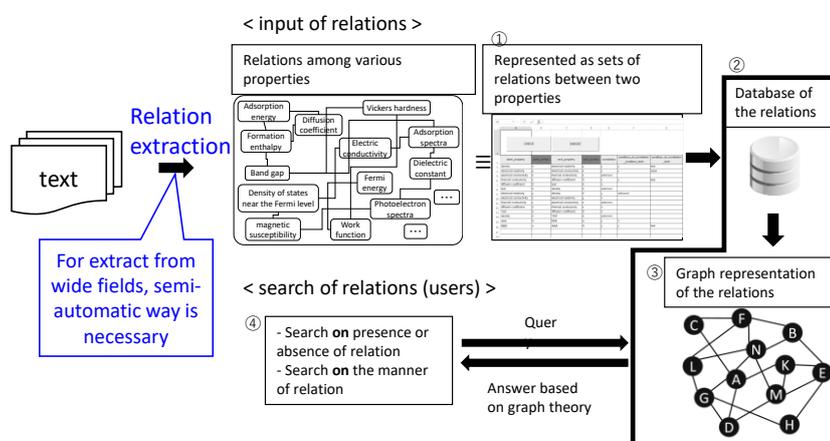


図3 物性間の関係性のデータベースとその探索システムの概念図

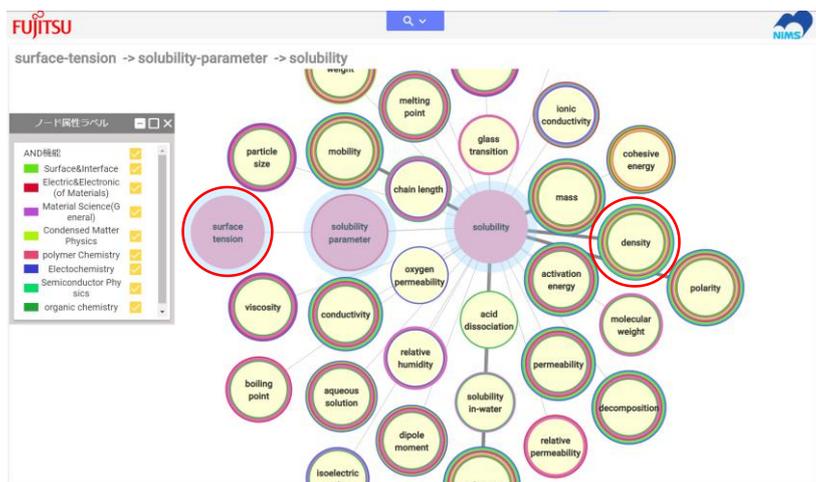


図4 物性間関係性を探索するシステムのプロトタイプ画面の一例

1) M. Yoshitake, *Materials* **2021**, *14*, 6946.