

マテリアルキュレーション：材料情報の活用による材料探索例 3

Materials Curation: case study #3

○吉武 道子¹ (1. 物材機構)

°Michiko Yoshitake¹ (1.National Institute for Materials Science)

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

「マテリアルキュレーション」は、ごく最近使われ始めた「キュレーション」という言葉をマテリアルに対して適用しようと、発表者が作り出した造語である[1]。「キュレーション」という言葉は、美術館や博物館で展示物の収集や展覧会の企画を担当する専門職を指す「キュレーター」という言葉に由来する。キュレーターの行っている“①既存のコンテンツの意味を捉えなおし、②選択・絞込み・結合・編集を行い、③新しい価値・意味づけ・文脈をユーザーに提供する”ことを「キュレーション」と呼ぶ[2]。これは、爆発的に増加する情報に埋もれる知識を有効活用する手法としてビジネス界で注目されつつある。

2013年春の応用物理学会で「マテリアルキュレーション」の概要を [3]、具体例 1 を 2014 年春の応用物理学会[4]にて紹介し、2014 年秋の応用物理学会では具体例 2 として熱電変換材料を取り上げた[5]。

今回は、マテリアルキュレーションによって、デバイスの電極材料として用いられることも多い遷移金属炭化物の仕事関数が、炭素欠陥や窒素置換によってどのように増減するかを、ヴィッカーズ硬さという機械的性質から予測できること[6]を、具体例 3 として紹介する。単結晶における遷移金属炭化物の仕事関数への炭素欠陥の影響が唯一実測されている HfC と TaC において、炭素欠陥の導入により仕事関数はそれぞれ、減少、増加と異なった挙動を示す。同様の結果が第一原理計算においても得られている。この第一原理計算を手掛かりに、実験も計算もされていない他の遷移金属炭化物における炭素欠陥による仕事関数の増減を予測する方法が、ヴィッカーズ硬さという全く異なる物性情報との結合であることを示す。

[1] 吉武道子,「機能材料」2013年2月号 Vol.33, pp.48-55.

[2] 勝見明, 石ころをダイヤに変える「キュレーション」の力, 潮出出版(2011)

[3] 吉武道子, 2013 年春季応用物理学講演会 : 27pB6-1

[4] 吉武道子, 2014 年春季応用物理学講演会 : 19a-F4-1

[5] 吉武道子, 2014 年秋季応用物理学講演会 : 17p-A23-1

[6] M. Yoshitake, J. Vac. Sci. Technol. A 32, 061403 (2014).

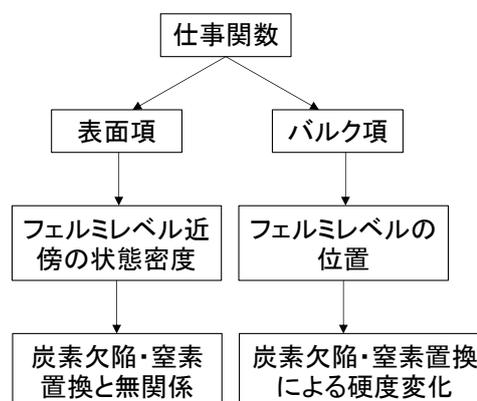


図 キュレーション手法を用いて、遷移金属炭化物の仕事関数が炭素欠陥や窒素置換によってどのように増減するかを考察するための道筋